

# ALFONSO BALDERESCHI

Wanda Andreoni  
Alfredo Pasquarello  
Andrea Testa

## Son héritage

scientifique et humain

---



# ALFONSO BALDERESCHI

Pionnier de la physique computationnelle à l'échelle mondiale, Alfonso Baldereschi a été professeur à l'École polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) et à l'Université de Trieste, en Italie : scientifique éminent, mentor inspirant et enseignant d'une profondeur inégalée. À travers la description de ses travaux scientifiques et des fragments de leur vie partagés avec lui, ses élèves, ses collaborateurs et ses collègues reconstituent le bagage scientifique et les leçons de vie qu'il leur a laissés – pour toujours.





**Alfonso Baldereschi**  
**Son héritage scientifique et humain**



# ALFONSO BALDERESCHI

Wanda Andreoni  
Alfredo Pasquarello  
Andrea Testa

Son héritage  
scientifique et humain

---

EPFL PRESS



Direction générale : Lucas Giossi  
Directions éditoriale et commerciale : Sylvain Collette et May Yang  
Responsable de production : Christophe Borlat  
Éditorial : Alice Micheau-Thiébaud et Jean Rime  
Graphisme : Anne Kummli  
Promotion et diffusion : Manon Reber  
Comptabilité : Daniela Castan  
Logistique : Émile Razafimanjaka  
Relecture : Simon Kroeger et Elisa Bagnoni

[www.epflpress.org](http://www.epflpress.org)

Première édition française, 2025

EPFL Press, Lausanne

EPFL Press est une maison d'édition de la fondation des Presses polytechniques et universitaires romandes.

ISBN 978-2-88915-730-3, version imprimée

ISBN 978-2-8323-2308-3, version ebook (PDF), [doi.org/10.55430/7514ABAP](https://doi.org/10.55430/7514ABAP)

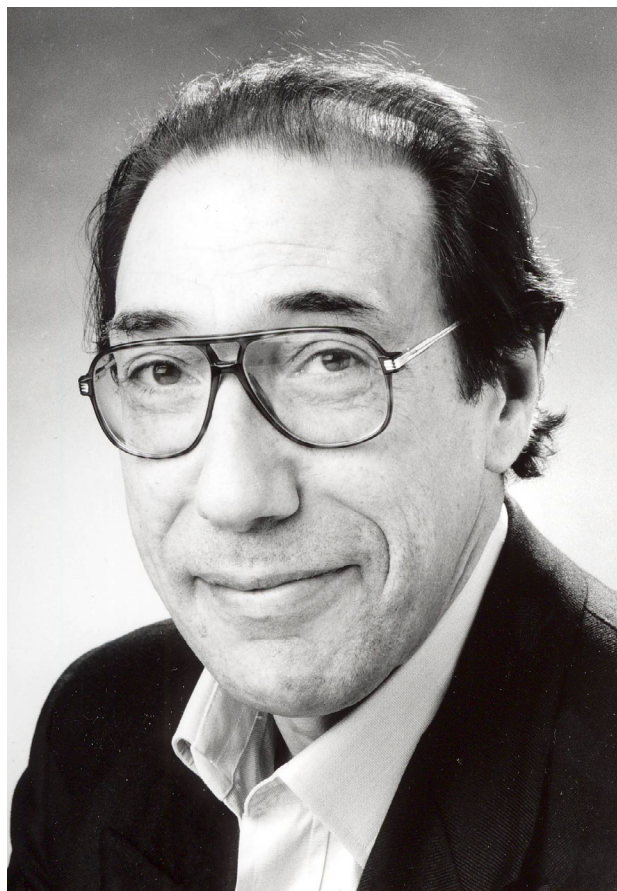
Imprimé en République tchèque



Cette licence vous oblige, si vous utilisez cette œuvre, à en citer l'auteur, la source et l'éditeur original, sans modification du contenu et sans utilisation commerciale.

# Sommaire

Préface	7
Biographie	9
Sélection de publications majeures	11
1. Les premiers pas de géant	49
2. Une étoile montante en Amérique	69
3. Forger Lausanne en pôle d'excellence	103
4. L'appel du pays natal	223
Liste complète des publications	281
Nécrologie	293
Affiliations des auteurs	295
Table des matières	299



ABoldewiel



## Préface

À travers cet ouvrage, nous avons cherché à canaliser le besoin exprimé par une large communauté internationale de rendre hommage à Alfonso Baldereschi, non seulement en tant que scientifique et enseignant, mais aussi en reconnaissance de ses qualités humaines exceptionnelles. Guidés par cette motivation, nous avons rassemblé dans cet ouvrage une sélection des contributions scientifiques les plus marquantes d'Alfonso, tout en sollicitant de nombreuses personnes pour qu'elles partagent leurs réflexions et souvenirs personnels.

Ainsi, l'ensemble des mots de tant d'auteurs évoque un chœur, le chœur de ceux qui ont bénéficié des connaissances, des enseignements, des sages conseils d'Alfonso. C'est l'expression d'une profonde admiration pour le scientifique, d'une gratitude sincère envers le professeur et le mentor, d'une affection véritable pour le collaborateur généreux, et d'une estime authentique pour le collègue bienveillant. Autant de sentiments que, de son vivant, nous avons sans doute trop souvent gardés sous silence, par simple timidité ou maladresse. À présent, nous ne pouvons qu'espérer qu'il les ait ressentis.

Nous souhaitons que cette collection contribue à préserver la mémoire d'Alfonso Baldereschi, en particulier en le faisant découvrir non seulement aux scientifiques, mais également aux nouvelles générations. Une pensée spéciale va à son fils Davide, à ses petits-enfants Adriano et Giuliano, ainsi qu'à leurs

descendants, auxquels nous tenons à faire connaître l'empreinte indélébile qu'il a laissée même en dehors de sa sphère familiale.

Les contributions ont été rédigées dans la langue choisie par les auteurs, et nous avons pris en charge leur traduction en français, qui constitue le fil conducteur de cet ouvrage. Nous avons regroupé les contributions selon les principaux lieux géographiques où l'interaction avec Alfonso Baldereschi a eu lieu, notamment Pise, les États-Unis, Lausanne et Trieste. Cependant, cette organisation ne saurait être considérée comme stricte, en raison de la nature des interactions qui peuvent se distinguer par leur multiplicité et leur étendue dans le temps. Malgré nos efforts pour inclure le plus grand nombre possible de personnes, il est probable que certaines, qui auraient souhaité contribuer à cet ouvrage, n'aient pas été contactées, et nous tenons à leur présenter nos excuses par avance.

Enfin, nous souhaitons adresser nos remerciements les plus chaleureux à tous les auteurs qui ont accepté de contribuer à cette collection, sans lesquels cet ouvrage n'aurait jamais vu le jour. En particulier, nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à Giovanni Bachelet, Nunzio Lipari, Franco Meloni, Maria Peressi, Michel Posternak, Raffaele Resta, Nicola Seriani, Vladan Stevanović et Flavio Toigo qui ont également consacré du temps pour nous aider à concrétiser ce projet, que ce soit en identifiant des

auteurs potentiels, en partageant leurs précieux conseils ou en recherchant du matériel pertinent. Nos sincères remerciements vont aussi à Davide Baldereschi, Laura Ferrentino Baldereschi, Chiara Bassani, Nathalie Boder, Francesco Casula, Alain Herzog, Gaetano Senatore, Oleg Yazyev et Juliana Velasquez pour leur soutien très apprécié. En dernier lieu, nous remercions chaleureusement l'Institut de

physique et la Faculté des sciences de base de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) pour leur généreux soutien financier, qui a rendu cette publication possible.

Lausanne, le 11 décembre 2024,

Wanda Andreoni, Alfredo Pasquarello,  
Andrea Testa

## Biographie

Alfonso Baldereschi naît le 24 septembre 1946 à Legnano, en Lombardie (Italie). Il entame ses études à l'Université de Milan, qu'il poursuit ensuite à l'Université de Pise après avoir réussi le concours d'entrée à la prestigieuse Scuola Normale Superiore de Pise. En 1967, après avoir soutenu sa thèse sous la direction de Franco Bassani, il entreprend des études postgrades (*perfezionamento*) au sein de cette même école. Ensuite, il s'installe aux États-Unis, où il travaille dans des institutions prestigieuses : d'abord à l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign, puis aux Laboratoires Bell de Murray Hill. De retour en Europe, il rejoint l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) en 1973. Il y est nommé professeur en 1981 et, la même année, il est également appelé à occuper un poste de professeur à l'Université de Trieste, où il conservera une part importante de ses activités de recherche et d'enseignement. Lorsque son mandat à l'EPFL prend fin en 2011, il poursuit sa carrière en Italie. Alfonso Baldereschi décède à Trieste le 22 avril 2024.

Les principaux centres d'intérêt scientifiques d'Alfonso Baldereschi ont toujours porté sur les propriétés physiques des matériaux réels. Ses contributions, riches et variées, s'expriment à travers plus de 250 articles publiés. Il est particulièrement reconnu pour une série d'avancées majeures dans les domaines des défauts dans les semi-conducteurs, des méthodes de structure électronique, des alignements de bandes aux interfaces des

semi-conducteurs et des propriétés diélectriques des solides. Par ailleurs, ses recherches ont constamment offert un appui précieux à plusieurs générations d'expérimentateurs, en particulier dans la manipulation des interfaces des hétérostructures et dans l'étude de l'adsorption moléculaire sur les surfaces métalliques. En 1990, Alfonso Baldereschi et ses collaborateurs sont récompensés par un prix décerné par le Concours Seymour Cray Suisse pour leur travail novateur sur la détermination de la polarisation spontanée à l'aide d'une expérience numérique. En 1993, il est nommé *fellow* de la Société américaine de physique (American Physical Society). Alfonso Baldereschi a non seulement été un pionnier de la matière condensée computationnelle, mais il a aussi largement contribué à l'essor de cette discipline, tant par son infatigable activité d'enseignement que par son rôle clé dans la fondation de l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), qu'il a dirigé à plusieurs reprises (1988-1990 et 1999-2011).

Au cours de sa carrière, Alfonso Baldereschi a exercé une influence considérable sous de nombreux aspects. À l'EPFL, il a notamment été directeur du Département de physique, puis directeur de l'Institut de théorie des phénomènes physiques. À ce dernier titre, il a orchestré la fusion entre la physique théorique de l'Université de Lausanne et celle de l'EPFL en 2003. Son action visait à élargir le spectre des disciplines représentées à l'EPFL, en

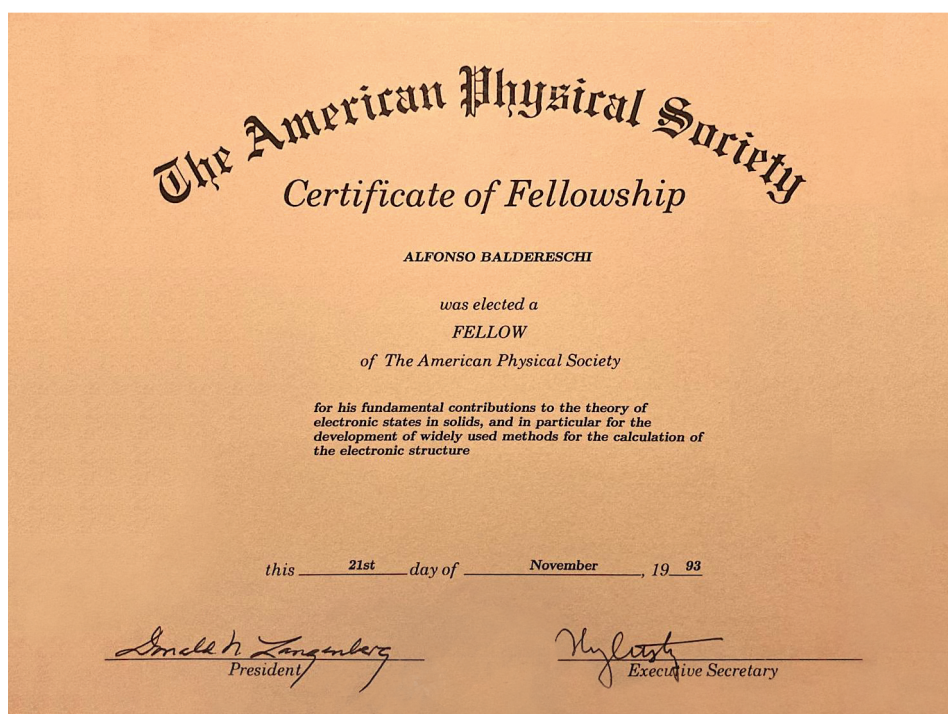


soutenant notamment la création de nouveaux axes de recherche en physique des hautes énergies et des particules, ainsi qu'en biophysique et physique de la matière molle.

Son apport en Italie a également été majeur. En plus de marquer des générations d'étudiants par ses cours exceptionnels, il a également joué un rôle clé dans l'élaboration du programme d'études en physique à l'Université de Trieste. Par ailleurs, sa participation assidue aux concours universitaires a été essentielle

pour identifier la nouvelle génération de scientifiques. Enfin, bien qu'étant théoricien, il a su guider ses collègues expérimentateurs dans la modernisation de l'équipement scientifique.

Alfonso Baldereschi s'est distingué par sa capacité à guider plusieurs générations de jeunes scientifiques, les accompagnant dans le développement optimal de leurs talents. Ces qualités lui ont valu une reconnaissance unanime en tant que mentor exemplaire et leader respecté.



Certificat de distinction en tant que *fellow* de la Société américaine de physique: Alfonso Baldereschi a été élu *fellow* de cette société en raison de ses contributions fondamentales à la théorie des états électroniques dans les solides, et en particulier pour le développement de méthodes largement utilisées pour le calcul de la structure électronique.

# Sélection de publications majeures

Landau levels and magneto-optic effects at saddle points

A. Baldereschi, F. Bassani, *Phys. Rev. Lett.* **19** (2), 66–68 (1967)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.19.66>

Binding to isoelectronic impurities in semiconductors

A. Baldereschi, J. J. Hopfield, *Phys. Rev. Lett.* **28** (3), 171–174 (1972)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.28.171>

Mean-value point in the Brillouin zone

A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* **7** (12), 5212–5215 (1973)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.7.5212>

Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors

A. Baldereschi, N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **8** (6), 2697–2709 (1973)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.8.2697>

Prediction of electronic interlayer states in graphite and reinterpretation of alkali bands in graphite-intercalation compounds

M. Posternak, A. Baldereschi, A. J. Freeman, E. Wimmer, M. Weinert, *Phys. Rev. Lett.* **50** (10), 761–764 (1983)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.761>

Self-consistent Hartree-Fock and screened-exchange calculations in solids: Application to silicon

F. Gygi, A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* **34** (6), 4405–4408 (1986)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.4405>

Band offsets in lattice-matched heterojunctions: A model and first principles calculation for GaAs/AlAs

A. Baldereschi, S. Baroni, R. Resta, *Phys. Rev. Lett.* **61** (6), 734–737 (1988)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.734>



## LANDAU LEVELS AND MAGNETO-OPTIC EFFECTS AT SADDLE POINTS

A. Baldereschi

Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy

and

F. Bassani

Istituto di Fisica dell'Università di Pisa, Pisa, Italy, and Gruppo Nazionale di Struttura della Materia del Consiglio Nazionale delle Ricerche, Rome, Italy

(Received 5 June 1967)

We give a quantum-mechanical treatment for the eigenstates of electrons near saddle points of the energy bands in the presence of a constant magnetic field. We find that Landau-type levels exist depending on the orientation of the magnetic field. Correspondingly, we find peaks in the interband transition probabilities and discuss selection rules on the Landau quantum numbers. We show the behavior of the optical constants for a chosen direction of the magnetic field, and indicate experimental consequences.

The quantum effects produced by a magnetic field near minima or maxima of energy bands have been studied extensively.<sup>1-3</sup> It has been shown that Landau levels are produced by the magnetic field and singularities in the interband transition probabilities are produced accordingly. This gives rise to magneto-optic effects corresponding to  $M_0$  transitions between maxima of the valence band and minima of the conduction band.<sup>4-6</sup> A general theory of the magnetic quantum states for arbitrary shape of the energy bands has been given by Lifshitz<sup>7</sup> in the semiclassical limit.

We consider nondegenerate bands and expand the energy as follows, taking the origin at the saddle point:

$$E(k) = E_0 + \alpha_x \hbar^2 k_x^2 + \alpha_y \hbar^2 k_y^2 + \alpha_z \hbar^2 k_z^2. \quad (1)$$

We choose the axes in such a way that  $\alpha_x$  and  $\alpha_y$  have sign opposite to  $\alpha_z$ . Following the procedure of Luttinger and Kohn,<sup>8</sup> we obtain the energy values in presence of a magnetic field, by solving the equation

$$\{\alpha_x [p_x - (e/c)A_x]^2 + \alpha_y [p_y - (e/c)A_y]^2 + \alpha_z [p_z - (e/c)A_z]^2\} F(\vec{r}) = (E - E_0) F(\vec{r}), \quad (2)$$

where  $\vec{p}$  is the operator  $-i\hbar\nabla$  and  $\vec{A}$  is the vector potential. The wave functions are given in zero order by

$$\psi(\vec{r}, \vec{H}) = F(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \vec{k}_0), \quad (2')$$

$\psi(\vec{r}, \vec{k}_0)$  being the Bloch function at  $\vec{k}_0$ . For our purposes we choose a gauge where the vector

potential is defined as

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{H} \times \vec{r} + \frac{1}{2}\text{grad}[H_y xz + H_z xy - H_x yz]. \quad (3)$$

With the Hamiltonian of Eq. (2) and the vector potential (3), the commuting constants of motion are

$$p_y \quad (4a)$$

and

$$\vec{H} \cdot \vec{p} - (e/c)H_z H_y x = S, \quad (4b)$$

where  $S$  indicates the dot product of the momentum and the magnetic field. We make use of the constant of motion (4b) and of expression (3) to perform a canonical transformation which reduces the Hamiltonian (2) to a simple quadratic form. The new canonically conjugate variables are

$$p = p_z - (\alpha_x \alpha_y H_z / \alpha) S \quad (5a)$$

and

$$q = -\frac{c}{eH_y} \left( p_x - \frac{e}{c} H_y z \right) - \frac{c}{e} \frac{\alpha_x H_x H_z}{\beta H_y} \left( p_z - \frac{S}{H_z} \right), \quad (5b)$$

where

$$\alpha = \alpha_x \alpha_y H_z^2 + \alpha_z \alpha_x H_y^2 + \alpha_y \alpha_z H_x^2, \quad (6')$$

and

$$\beta = \alpha_y H_x^2 + \alpha_x H_y^2. \quad (6'')$$

The Hamiltonian (2) becomes

$$\mathcal{H} = \frac{\alpha}{\beta} p^2 + \frac{e^2}{c^2} \beta q^2 + \frac{\alpha_x \alpha_y \alpha_z}{\alpha} S^2. \quad (7)$$

When  $\alpha > 0$ , the Hamiltonian (7) is that of a harmonic oscillator and the eigenvalues are

$$E - E_0 = (n + \frac{1}{2}) \frac{\beta 2e\hbar}{|\beta| c} \alpha^{1/2} + \frac{\alpha_x \alpha_y \alpha_z}{\alpha} S^2. \quad (8)$$

When  $\alpha < 0$ , the Hamiltonian (7) has continuous eigenvalues.

The above results indicate that discrete quantum levels exist also at saddle points of the energy bands in solids and are given by formula (8), provided the orientation of the magnetic field with respect to the  $z$  axis is within an elliptical cone, as indicated in Fig. 1. The spacing between the quantum levels is given by  $(2e\hbar/c)\sqrt{\alpha}$ , in agreement with the result of the semiclassical treatment.<sup>7</sup>

The existence of discrete quantum states produces peaks in the magneto-optic constants. The number of such peaks and their sharpness depend on the dipole matrix elements  $M_{nk_y s; n'k_y' s'}$  for transitions between the state  $n, k_y, s$  in the valence band and the state  $n', k_y', s'$  in the conduction band. Since the eigenfunctions are given by formula (2'), and  $F(r)$  is nearly a constant in the unit cell ( $\nabla F/F$  can be neglected), we obtain

$$M_{nk_y s; n'k_y' s'} = \int d\vec{r} \psi_c^*(\vec{k}_0, \vec{r}) \vec{e} \cdot \nabla \psi_v(\vec{k}_0, \vec{r}) \times \int d\vec{r} F_{cn'k_y' s'}^*(\vec{r}) F_{vnk_y s}(\vec{r}). \quad (10)$$

For allowed transitions at the critical point, the first matrix element in (10) can be taken as a constant, and selection rules are obtained from the second integral. Since  $p_y$  and  $S$  are the same operators in the valence and the conduction band, the selection rules  $k_y = k_y'$  and  $s = s'$  are always satisfied, while the selection rule on the magnetic quantum numbers  $n$  and  $n'$  does not exist in general because the  $F$ 's are eigenfunctions of different harmonic oscillators, centered at different points. We obtain the usual selection rule  $n = n'$  when the Hamiltonian for the valence band is proportional to the analogous Hamiltonian for the conduction band. For a general orientation of the mag-

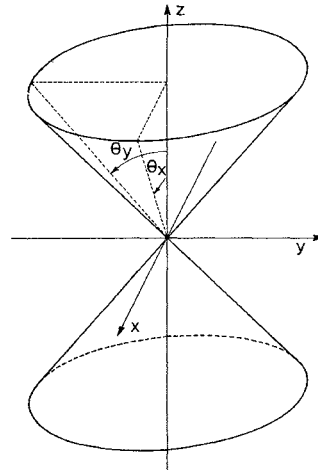


FIG. 1. Orientations of the magnetic field and existence of discrete quantum levels at a saddle point. Discrete quantum magnetic levels exist only if the direction of the magnetic field is inside the elliptical cone, here indicated by the intersections with the planes  $xz$  and  $yz$  [ $\tan \theta_x = (-\alpha_x/\alpha_z)^{1/2}$ ,  $\tan \theta_y = (-\alpha_y/\alpha_z)^{1/2}$ ].

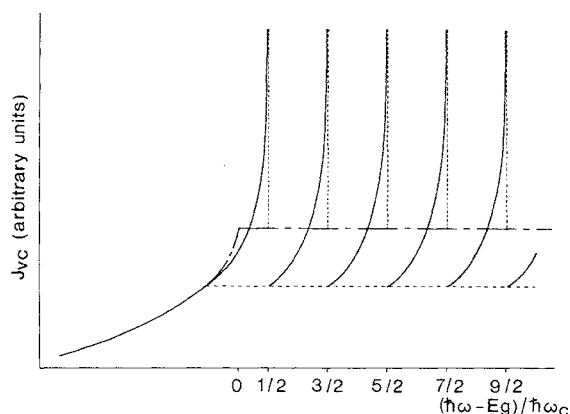


FIG. 2. Joint density of states at a critical point  $M_1$  in the presence of a magnetic field placed in the  $z$  direction, where the effective mass is negative. The quantity  $\hbar\omega_c$  indicates the cyclotron energy appropriate to the reduced transversal mass  $1/m = 1/m_c - 1/m_v$ , and  $E_g$  is the energy gap at the critical point. The zero-field case is also shown (broken line).

netic field, this implies that the effective masses in the valence band and the conduction band be proportional. When the magnetic field is the  $z$  direction and there is rotational symmetry with respect to the  $z$  axis, the selection rule  $\Delta n = 0$  is satisfied.

When discrete levels exist and the selection rule  $\Delta n = 0$  is valid, the divergences in the joint density of states

$$J_{vc} = C \sum_n \int ds \sigma(E_{nc}(s) - E_{nv}(s) - \hbar\omega) \quad (11)$$

give divergences in the optical constants, which result in sharp peaks corresponding to the quantum magnetic levels. If the selection rule on the magnetic quantum number is not valid, the matrix element (10) depends on  $s$  and the peaks in the optical constants are broader.

When we consider the removal of the spin degeneracy by the magnetic field we obtain a doubling of all levels, and the usual selection rules for polarized light hold.<sup>3,4</sup>

We present in Fig. 2 the joint density of states computed from Eq. (11) for optical transitions of the type  $M$  with rotational symmetry with respect to the  $z$  axis, in the presence<sup>1</sup> of a magnetic field in the  $z$  direction. It is well known that optical transitions of type  $M_1$  are

responsible for strong peaks in the reflectivity of most semiconductors.<sup>9</sup> The results of Fig. 2 indicate that a fine structure due to the quantum levels should be observed by magnetorefectance experiments. Figure 2 shows that the fine structure appears at the higher energy side of the peak, which is also shifted to higher energy.

We believe that magnetorefectance experiments of the type suggested should provide even more detailed information on the nature of the critical points than that which can be obtained by electroreflectance experiments.<sup>10</sup> Furthermore, magnetoelectro-optic effects could lead to a measurement of the effective masses at the point  $M_1$  in a similar way to what has been shown for the point  $M_0$ .<sup>11</sup>

<sup>1</sup>L. Landau, Z. Physik **64**, 629 (1930).

<sup>2</sup>L. M. Roth and P. N. Argyres, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by K. Willardson and A. Beer (Academic Press, Inc., New York, 1966), Vol. I, p. 159.

<sup>3</sup>R. J. Elliott, T. P. McLean, and G. G. Macfarlane Proc. Phys. Soc. (London) **72**, 553 (1958).

<sup>4</sup>E. Burstein, G. S. Picus, R. F. Wallis, and F. Blatt, Phys. Rev. **113**, 15 (1959).

<sup>5</sup>L. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, Phys. Rev. **114**, 90 (1959).

<sup>6</sup>J. Halpern and B. Lax, J. Phys. Chem. Solids **26**, 911 (1965).

<sup>7</sup>I. M. Lifshitz and M. I. Kaganov, Usp. Fiz. Nauk **69**, 419 (1959) [translation: Soviet Phys.-Usp. **2**, 831 (1959)], and quoted references.

<sup>8</sup>J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).

<sup>9</sup>J. C. Phillips, in *Solid State Physics*, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, Inc., New York, 1966), Vol. 18, p. 55, and quoted references.

<sup>10</sup>See, for instance, B. O. Seraphin and N. Bottka, Phys. Rev. **145**, 628 (1966); M. Cardona and F. H. Pollak, Phys. Rev. **142**, 530 (1966); J. C. Phillips, Phys. Rev. **146**, 584 (1966); D. E. Aspnes, Phys. Rev. **147**, 554 (1966); F. Aymerich and F. Bassani, Nuovo Cimento **48**, 358 (1967); and references quoted in the above articles.

<sup>11</sup>A. G. Aronov, Fiz. Tverd. Tela **5**, 552 (1963) [translation: Soviet Phys.-Solid State **5**, 402 (1963)]; Q. H. Vrehen and B. Lax, Phys. Rev. Letters **12**, 471 (1964); A. G. Aronov and G. Picus, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. **51**, 505 (1966) [translation: Soviet Phys.-JETP **24**, 339 (1967)], and quoted references; S. H. Groves, C. R. Pidgeon, and J. Feinleib, Phys. Rev. Letters **17**, 643 (1966).

## Binding to Isoelectronic Impurities in Semiconductors

A. Baldereschi

*Bell Telephone Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974*

and

J. J. Hopfield\*

*Department of Physics, Princeton University, Princeton, New Jersey 08540*

(Received 9 December 1971)

The potential produced by isoelectronic impurities is investigated and shown to be critically dependent upon screening. Two methods of calculation of the screened potential are used in this paper, one based on a first-principles wave-function approach and the other using the semiempirical theory of energy bands in semiconductors. The relaxation of the host crystal is also taken into account and shown to be important. The results are in satisfactory agreement with experiment.

Isoelectronic impurities in semiconductors may produce bound states in the forbidden gap,<sup>1</sup> binding a hole (or an electron). Experimental data are now available which suggest that an isoelectronic impurity may bind a hole (electron) only if its electronegativity is smaller (larger) than that of the host atom it replaces. This rule, however, does not indicate which systems will actually have a bound state. It is also found experimentally that only very large atoms (Te and Bi) or very small atoms (N and O) produce bound states (isoelectronic traps). On the theoretical side, the results achieved have been only qualita-

tive<sup>2,3</sup> and even the binding mechanism is not yet clear. One would like to be able to calculate for a given semiconductor whether a particular isoelectronic substitution will bind a hole (or an electron).

In the present paper we make binding calculations on a model potential for isoelectronic impurities and apply it to the case of isoelectronic donors (i.e., hole traps). The bare impurity potential is assumed to be the difference of atomic pseudopotentials<sup>4</sup> and is then screened using a dielectric function which reflects the local electron density. The relaxation of the host lattice

TABLE I. Values of  $\bar{E}$  and of the matrix element  $J$  as a function of lattice relaxation.  $J_{SO}$  is the spin-orbit contribution to the matrix element. The actual relaxation produced in the crystal is denoted  $\bar{X}$ . In the last two columns the predictions of the present model are compared with available experimental data. Numbers in parentheses are based on extrapolations. All energies are in eV.

J(X=0)											
		J(X=0)		local	J(X=1)						
		J(X=0)	average	density	J(X=0)	pseudo-	J(X=1)		Bound State?		
E	J <sub>SO</sub>	unscreened	screening	screening	dielectric	potential	dielectric	X	Theory.	Exp	
Si:Ge	-1.8	0.04	0.32	0.09	0.08	0.10	(0.54)	0.63	0.41	No	No
Si:Sn	-1.8	0.14	1.96	0.45	0.40	0.37	(2.34)	2.44	0.36	No	
Si:Pb	-1.8	0.43	2.45	0.77	0.72	0.61	(3.63)	3.20	0.35	No	
GaP:As	-1.4	0.06	1.24	0.35	0.30	0.06	0.76	0.97	0.43	No	No
GaP:Sb	-1.4	0.20	4.49	1.26	1.07	1.06	2.80	3.70	0.37	Yes	No
GaP:Bi	-1.4	0.72	5.60	1.93	1.71	1.83	(4.12)	4.94	0.35	Yes	Yes
ZnS:Se	-0.9	0.11	4.81	1.67	1.20	0.24	1.01	1.63	0.51	No	No
ZnS:Te	-0.9	0.28	9.46	3.34	2.41	1.19	2.98	4.21	0.48	Yes	Yes

around the impurity is also studied and turns out to be important. The results obtained using the pseudopotential theory are compared with those we have calculated by using the semiempirical dielectric theory,<sup>5</sup> and reasonable agreement is found.

The potential produced by an isoelectronic substitution is short range and will bind a particle only if it is sufficiently strong. Using a one-band, one-site Koster-Slater approach, the binding condition is<sup>2</sup>

$$1 + J/\bar{E} \leq 0, \quad (1)$$

where  $J$  is the diagonal matrix element of the impurity potential on the appropriate Wannier function and  $\bar{E}$  is an average energy related to the energy band  $E(\vec{k})$  as follows

$$\bar{E}^{-1} = \Omega(2\pi)^{-3} \int E^{-1}(\vec{k}) d^3k, \quad (2)$$

where the integration is on the Brillouin zone and  $\Omega$  is the unit cell volume. In the case of degenerate bands, an obvious generalization of Eq. (2) has to be used, but condition (1) is still valid.

The average energy  $\bar{E}$ , whose absolute value will be called threshold, depends only on the band structure of the host material and is very easily calculated. The first column of Table I shows a few values of  $\bar{E}$  obtained neglecting spin-orbit effects, which are small for the crystals considered.

Let us now discuss the impurity potential and its matrix element  $J$ . An isoelectronic substitution implies more than the replacement of an atomic core. The *unperturbed* covalent bond be-

tween the impurity and its neighbors has a length  $R_i$  generally different from the bond length  $R_h$  of the host crystal and consequently a strain field is produced. If we suppose that all atoms, beyond the nearest neighbors, move according to the elastic continuum theory, the displacement  $R$  of nearest neighbors will completely define the strain field present in the crystal. As a measure of this field we will use the dimensionless quantity  $X = R/(R_i - R_h)$  which ranges between  $X = 0$  (no relaxation) to  $X = 1$  (maximum relaxation).

Let us consider first the case  $X = 0$ . To make a specific example, let us consider GaP:Bi. The lattice is perfectly rigid and the impurity potential can be assumed to be the difference between the bare atomic pseudopotentials<sup>4</sup> of Bi and P. The potential thus obtained must be screened, and to begin we use the dielectric constant of the host crystal as given by Penn's model.<sup>6</sup> Furthermore, effects due to spin-orbit must be included, and can be described as the difference of the model spin-orbit pseudopotentials of Bi and P as given by Animalu.<sup>7</sup> The estimated spin-orbit corrections to  $J$  are given in the second column of Table I. The total matrix element  $J$  of the impurity potentials defined in this way are given in the third and fourth columns of Table I for unscreened and screened potentials, respectively. A comparison between the results immediately reveals the importance of screening. Substituting the numbers so far obtained into the binding condition (1), we see that screened potentials give better agreement with experiment. Still some discrepancies exist and they seem to



increase with increasing ionicity of the host material (Se would produce a deeply bound state in ZnS!). The explanation we propose is that Penn's screening, based on the average electron density, cannot be used for a potential whose range is less than the atomic radius. Walter and Cohen<sup>8</sup> show that the valence charge density of semiconductors has strong deviations from the average value of eight electrons per unit cell. In particular, the average charge density around Si, around P in GaP, and around S in ZnS can be estimated to be 12.5, 21.0, and 35.0 electrons per unit cell, respectively. Under these circumstances, a screening based on the *local* electron density is needed. We have estimated such screening by using Penn's interpolation formula<sup>6</sup> in which quantities such as the Fermi momentum and energy, and the plasma frequency, are evaluated according to the average *local* electron density. The Penn's gap, which does not effect the results in the range of interest here, is left unchanged. Using this crude model of local screening, we obtain the results shown in the fifth column of Table I. The agreement with experiment improves but  $J$  is still systematically too large for traps in ZnS. It should be noted that it is the more ionic crystals which are changed by using local density screening but that the change is not large enough. We will return later to this point.

If we now allow the lattice to relax, the additional potential produced by the displacement of atoms has to be considered. For maximum relaxation ( $X=1$ ), the total impurity potential can be obtained by subtracting the pseudopotential of a GaBi crystal from that of GaP and then retaining only that portion of the potential which is inside the unit cell containing the impurity atom. We have used, whenever possible, the pseudopotentials given by Cohen and Bergstresser,<sup>4</sup> with the undetermined constant potential  $V_0$  evaluated from the experimental values of the ionization potentials. The matrix elements  $J$  obtained in this way are shown in the seventh column of Table I. These numbers include the spin-orbit correction which we assume to be the same as that for  $X=0$ , since spin-orbit effects have been shown<sup>9</sup> to depend only slightly on pressure. For those crystals for which pseudopotential form factors are not available, the matrix element  $J$  has been estimated on the basis of electronegativity differences. The effect of relaxation is to make the potentials more attractive to holes, as was expected since in all cases here considered, relaxation makes the bonds longer and therefore

weaker (i.e., more attractive to holes). Note that in this  $X=1$  limit, we have circumvented the problem of screening by being able to use the empirical screened pseudopotentials.

The potential matrix element  $J$  can also be evaluated by using a different approach to semiconductor band structures: the dielectric theory.<sup>5</sup> The isoelectronic substitution GaP:Bi can also be described as follows: A unit cell of GaP is substituted with a unit cell of GaBi in the limit  $X=1$ , and with a compressed unit cell of GaBi (so as to match lattice constants) for  $X=0$ . The matrix element  $J(X=0)$  can be obtained by subtracting the average ionization potentials<sup>10</sup> of GaP and compressed GaBi, where for average we define the mean at  $I$ ,  $X$ , and  $L$  with weights 1, 3, and 4, respectively. The ionization potential of a compressed crystal is calculated from the deformation potentials of the valence band recently obtained by Lawaetz.<sup>11</sup> The same method can also be used for  $J(X=1)$ . In this case the difference in average ionization potentials includes also kinetic differences which must not appear in  $J$ . Kinetic contributions are subtracted off using an average value of the kinetic energy in the top valence bands equal to  $1.76(2\pi\hbar)^2/2ma^2$  which is the free-electron value for a crystal with lattice constant  $a$ . The results obtained in the two limits  $X=0$  and  $X=1$ , corrected for spin-orbit contributions, are given in the sixth and eighth columns of Table I.

Excellent agreement between the two methods is obtained for  $X=0$  in Si and GaP. For ZnS the dielectric theory predicts a much weaker potential and since this theory has been shown to be valid for all values of ionicity, we believe that the discrepancy is due to our crude model of local screening and/or the need for nonlinear screening since the bare potentials for ZnS are very deep. In this limit therefore we will trust more the method based on the dielectric theory. Satisfactory agreement is obtained for  $X=1$ , since the discrepancies between the two methods do not seriously affect the final result. In fact actual relaxations are always far from this limit. No argument has been found in favor of one method or the other and we arbitrarily use the pseudopotential method in this limit.

The behavior of  $J$  for intermediate relaxation has been obtained by linear interpolation between the two limits  $X=0$  and  $X=1$ . Figure 1 shows the dependence of  $J$  on relaxation for traps in GaP and indicates the importance of relaxation for this problem.

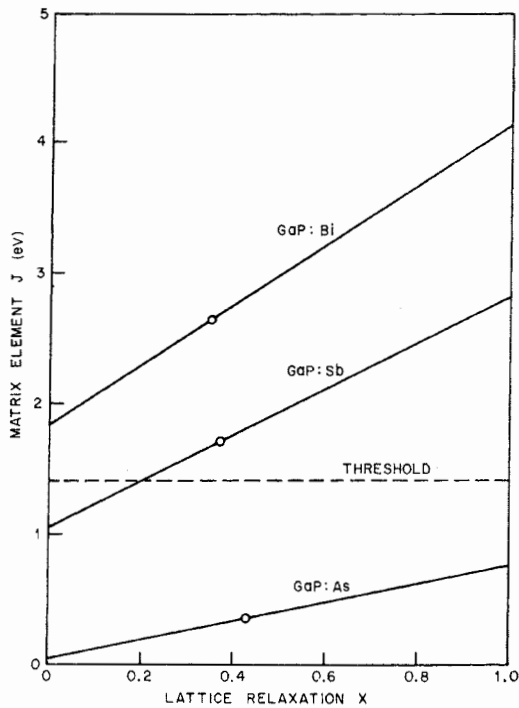


FIG. 1. Dependence of the matrix element  $J$  on lattice relaxation for GaP:As, GaP:Sb, and GaP:Bi. The broken line represents the threshold  $|E|$ . The dots indicate the actual relaxation and show that according to the present model Bi and Sb are traps in GaP whereas As is not. Note that Sb will produce a barely bound state while experimental data seem to indicate a barely unbound state.

At this point, to find out if a bound state exists or not, we need only to know the actual relaxation  $\bar{X}$ , the one which minimizes the strain energy. Using the previously defined model for strain field, usual values of the elastic constants and the force constants given by Martin,<sup>12</sup> we obtain for  $\bar{X}$  the values shown in Table I and the dots of Fig. 1.

The binding mechanism here proposed agrees with the experimental observation that a hole can be bound in GaP by Bi and in ZnS by Te. The on-

ly discrepancy is for GaP:Sb where we predict a barely bound state whereas experiment shows a barely unbound state. No isoelectronic traps are predicted in Si due to its high threshold.

As shown by Faulkner<sup>2</sup> and by Phillips,<sup>3</sup> the binding energy of these traps is a delicate quantity and we do not attempt an evaluation here, but the strong effect of relaxation we have found seems to indicate that the binding energy must be very sensitive to an externally applied pressure. In this respect, isoelectronic traps would differ from traditional donors and acceptors which are bound by pressure-independent Coulomb forces and therefore rigidly follow the associated energy-band extremum. A strong pressure dependence of the binding energy of isoelectronic traps has indeed been observed in GaP.<sup>13</sup>

It is a pleasure to thank C. H. Henry for his generous contributions throughout this work, J. C. Phillips and E. O. Kane for many helpful discussions, and R. A. Faulkner who provided a copy of his computer code for pseudopotential band-structure calculations.

\*Consultant, Bell Telephone Laboratories, Murray Hill, N. J. 07974.

<sup>1</sup>For a review on isoelectronic impurities, see W. Czaja, in *Festkörperprobleme*, edited by O. Madelung (Vierweg, Braunschweig, 1971), Vol. XI, p. 65.

<sup>2</sup>R. A. Faulkner, Phys. Rev. **175**, 991 (1968).

<sup>3</sup>J. C. Phillips, Phys. Rev. Lett. **22**, 285 (1969).

<sup>4</sup>M. L. Cohen and V. Heine, in *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (Academic, New York, 1970), Vol. 24, p. 37.

<sup>5</sup>J. C. Phillips, Rev. Mod. Phys. **42**, 317 (1970).

<sup>6</sup>D. R. Penn, Phys. Rev. **128**, 2093 (1962).

<sup>7</sup>A. O. E. Animalu, Phil. Mag. **13**, 53 (1966).

<sup>8</sup>J. P. Walter and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **4**, 1877 (1971).

<sup>9</sup>P. J. Melz and I. B. Ortenburger, Phys. Rev. B **3**, 3257 (1971).

<sup>10</sup>J. A. Van Vechten, Phys. Rev. **187**, 1007 (1969).

<sup>11</sup>P. Lawaetz, to be published.

<sup>12</sup>R. M. Martin, Phys. Rev. B **1**, 4005 (1970).

<sup>13</sup>J. L. Merz, to be published.

## Mean-Value Point in the Brillouin Zone

A. Baldereschi

*Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974*

(Received 6 November 1972)

A new special point in the Brillouin zone is introduced. It is defined as the point such that the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone. This special point is termed the "mean-value point," and is dictated by the crystal symmetry. The coordinates of the mean-value point for cubic lattices are explicitly given.

Different kinds of special points in the Brillouin zone have been introduced since the existence of these zones was noticed in 1928.<sup>1</sup> After the work by Bouckaert *et al.*<sup>2</sup> on the symmetry properties of wave functions in crystals, the concept of high-symmetry points in the zone gained large popularity and is still one of the basic concepts in solid-state physics. Later, when deep interest arose in the thermodynamical and optical properties of solids, the concept of phonon (or electron) density of states became relevant and critical points were introduced by Van Hove<sup>3</sup> and studied in more detail by Phillips.<sup>4</sup>

Often, one is not interested in studying the properties of a single quasiparticle which belongs to a particular point of the Brillouin zone, but rather in studying the properties of all the quasiparticles of a certain kind which are present in the crystal in order to obtain crystal properties. In these studies one is usually faced with the problem of averaging quasiparticle properties (i. e., averaging over the Brillouin zone). It is well known that carrying out such averages is difficult and time consuming. It

is useful in this respect to introduce a new special point in the Brillouin zone: the mean-value point.<sup>5</sup> Qualitatively, it is defined as the point such that the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone. It will be shown that the symmetry properties of crystals provide a way to uniquely define this point for any given lattice. The coordinates of the mean-value point in cubic lattices will be given together with two examples from semiconductor physics which will show how useful this new point can be.

While studying crystal properties, one often encounters Brillouin-zone integrals such as

$$I = \int_{\text{BZ}} f(\mathbf{k}) d^3k = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \bar{f}, \quad (1)$$

where the integrand  $f(\mathbf{k})$  is a periodic function of wave vector and  $\Omega$  is the primitive cell volume. As shown in (1), this integral can be expressed as the Brillouin-zone volume times the average value of



$f(\mathbf{k})$ . Furthermore, without loss of generality, we can assume that  $f(\mathbf{k})$  belongs to the completely symmetric irreducible representation of the crystal point group (this representation is usually denoted  $\Gamma_1$ ), because, if this is not the case, we can decompose  $f(\mathbf{k})$  into irreducible representations and it is easily demonstrated that only the  $\Gamma_1$  representation contributes to integral (1).

Using the symmetry properties of  $f(\mathbf{k})$  ( $\Gamma_1$  symmetry and periodicity in  $\mathbf{k}$  space), we can decompose it into symmetrized linear combinations of plane waves<sup>6</sup> with  $\Gamma_1$  symmetry, as follows:

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i G_i^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k}), \quad (2)$$

where  $G_0^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k}) \equiv 1$  and the summation index  $i$  runs over the stars of equivalent lattice vectors. Note that the functions  $G_i^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k})$  which appear in (2) depend on the lattice structure but not on the particular function  $f(\mathbf{k})$ . On the right-hand side of (2), only the coefficients  $a_i$  depend on the particular function  $f$ . Inserting (2) into (1), we obtain

$$I = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \bar{f} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} a_0, \quad (3)$$

since it is easily demonstrated that all terms in (2) but the first ( $i=0$ ) give vanishing contribution to the integral (1). We see, therefore, that the average value  $\bar{f}$  is nothing but the first term in expansion (2). We must find a way to evaluate this term.

In view of Eqs. (2) and (3) one might be tempted to define the mean-value point as the point  $\mathbf{k}^*$  such that  $G_i^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k}^*) = 0$  for any positive integer  $i$ . In fact, if this can be done, then

$$f(\mathbf{k}^*) \equiv a_0 \equiv \bar{f}. \quad (4)$$

This is asking too much, of course. We have to be satisfied if we can find a point  $\mathbf{k}^*$  for which the first equality in (4) is not strictly valid but is a reasonably good approximation. Since expansions similar to (2) are *generally* rapidly convergent, we define the mean-value point as the particular point  $\mathbf{k}^*$  for which

$$G_i^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k}^*) = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n), \quad (5)$$

with  $n$  being the largest integer possible. The value of  $n$  is limited by the compatibility between different equations in system (5). In general, we expect  $n=3$ , since the unknown variables in (5) are the three coordinates of  $\mathbf{k}^*$ . It might happen that system (5) has more than one solution and the system obtained by adding to (5) the  $(n+1)$ th equation  $G_{n+1}^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k}^*) = 0$  has no solutions at all. In this case we define the mean-value point as that particular solution of system (5) which minimizes the absolute value of the next term  $|G_{n+1}^{(\Gamma_1)}(\mathbf{k})|$ .

We can now determine the coordinates of the

mean-value point for cubic lattices.

*Simple cubic.* In this case  $n=3$  and system (5) is

$$\begin{aligned} X + Y + Z &= 0, \\ XY + YZ + ZX &= 0, \\ XYZ &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

where  $X = \cos(2\pi k_x/a)$  and similar definitions hold for  $Y$  and  $Z$ . System (6) uniquely defines the mean-value point  $\mathbf{k}^* \equiv (\pi/a)(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ , which lies halfway between the high-symmetry points  $\Gamma$  and  $R$  of the Brillouin zone.

*Face-centered cubic.* In this case  $n=2$ . The resulting system has an infinite number of solutions, and, as already explained, we uniquely define the mean-value point as the one which minimizes the next term in expansion (2). The mean-value-point coordinates are  $\mathbf{k}^* \equiv (2\pi/a)(0.6223, 0.2953, 0)$ .

*Body-centered cubic.* In this case, again we have  $n=2$  and minimization of the  $i=3$  term in expansion (2) is necessary. The mean-value point is  $\mathbf{k}^* \equiv (2\pi/a)(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8})$ . The location of the mean-value point in the Brillouin zone of cubic lattices is shown in Fig. 1.

The mean-value point  $\mathbf{k}^*$  that we have defined is really significant only if  $f(\mathbf{k}^*)$  approximates closely the average value  $\bar{f}$ . We can say in general that the approximation is good if expansion (2) can be truncated after the term  $i=3$ . This is generally the case, because, using tight-binding language, such truncation in expansion (2) means including interactions up through the third neighbors. How-

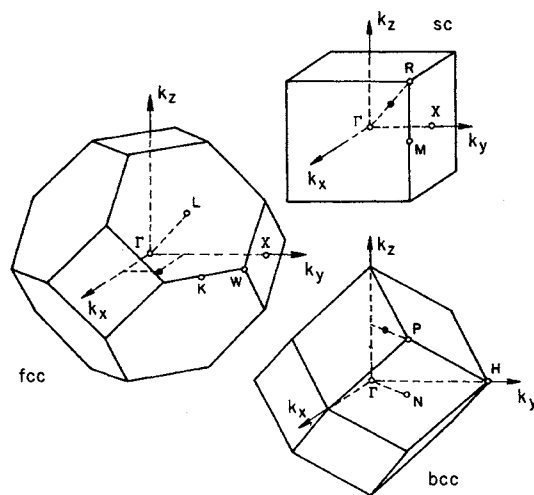


FIG. 1. Mean-value point in the Brillouin zone of different cubic lattices. Solid circles are the mean-value points, whereas open circles indicate high-symmetry points.

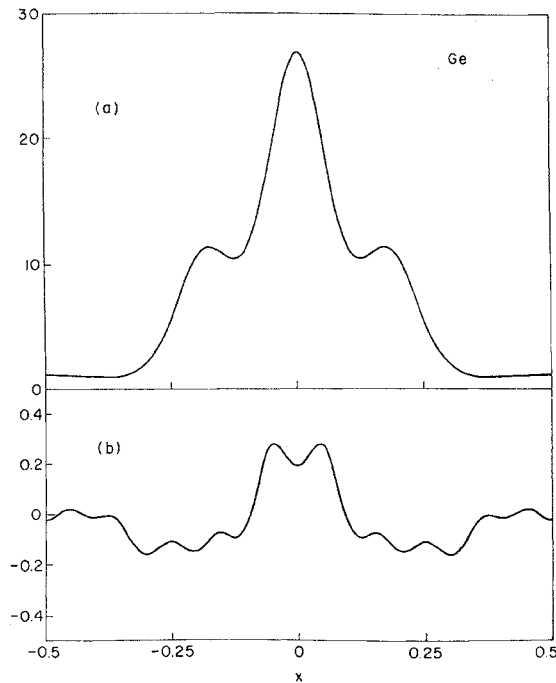


FIG. 2. (a) Valence charge density in Ge along the bond direction as obtained using the mean-value-point method. The origin is halfway between the two atoms and units are electrons per primitive cell. (b) Difference between the valence charge densities in Ge as obtained by Walter and Cohen (Ref. 7) and by the mean-value-point method. Note the change in scale between (a) and (b).

ever, special cases might happen in which  $f(\vec{k})$  varies so strongly in the Brillouin zone that a large number of terms have to be retained in expansion (2) and the mean-value point becomes meaningless. We believe that these special cases, though not impossible, occur only rarely.

We now present two examples from semiconductor physics in order to give convincing evidence of the elegance, power, and usefulness of the mean-value-point technique in making averages over the Brillouin zone. Both examples make use of the mean-value point defined for face-centered-cubic lattices.

The first example is the calculation of the valence-electron charge density in semiconductors. We define

$$f(\vec{k}) = e \sum_v |\psi_v(\vec{k}, \vec{r})|^2, \quad (7)$$

where the band index  $v$  runs over all valence bands and  $\psi_v(\vec{k}, \vec{r})$  are Bloch functions. Valence-electron charge densities for a few semiconductors have

TABLE I. Average energy per electron in the valence bands. Different approximations of the Kleinman-Phillips (KP) method are compared with the mean-value-point method. The zero of energy is at the top of the valence bands ( $\Gamma$  point) and energy units are eV.

	KP			Mean-value point
	8 points	64 points	512 points	
Ge	-4.76	-5.07	-5.09	-5.18
GaAs	-4.66	-4.94	-4.95	-5.01
ZnSe	-4.59	-4.80	-4.80	-4.85

been calculated by Walter and Cohen,<sup>7</sup> using a grid of 3360 sample points in the Brillouin zone. Using the same wave functions, we have calculated the valence-electron charge density in Ge with the mean-value-point technique. The result along the (1, 1, 1) direction is shown in the upper portion of Fig. 2. It was our intention to compare our result with that of Walter and Cohen in the same graph, but since the two results agree to within 1%, differences between them could hardly be appreciated. Therefore, we have represented in the lower portion of the figure, using a magnified scale, the difference between the two results.

The equilibrium lattice constant and the bulk modulus of crystals may be calculated from the total crystal energy as a function of lattice constant. One of the terms which enters the total crystal energy is the sum of the one-electron energies over all occupied states. We define

$$f(\vec{k}) = \sum_v E_v(\vec{k}), \quad (8)$$

where the band index  $v$  runs over the valence bands and  $E_v(\vec{k})$  are the one-electron energies. We use the pseudopotential method to compute  $E_v(\vec{k})$  for Ge, GaAs, and ZnSe. We obtain for the sum of the one-electron energies the results shown in Table I. In this case the mean-value-point method is compared with a method due to Kleinman and Phillips,<sup>8</sup> which is based on a procedure for successive approximations.

The above examples serve to demonstrate the accuracy of the mean-value-point technique. One comment on Table I is in order. The Kleinman-Phillips eight-point approximation is inadequate in averaging over the Brillouin zone and this approximation is nothing but the commonly used weighted average on the high-symmetry points  $\Gamma$ ,  $X$ , and  $L$ . When 512 points are used, our mean-value-point method agrees with the Kleinman-Phillips method within 2%.

<sup>1</sup>M. J. O. Strutt, Ann. Phys. (Leipzig) 85, 129 (1928); F. Bloch, Z. Phys. 52, 555 (1928).

<sup>2</sup>L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, and E. Wigner, Phys. Rev.

50, 58 (1936).

<sup>3</sup>L. Van Hove, Phys. Rev. 89, 1189 (1953).

<sup>4</sup>J. C. Phillips, Phys. Rev. 104, 1263 (1956).

<sup>5</sup>A. Baldereschi, Bull. Am. Phys. Soc. **17**, 237 (1972); D. J. Chadi and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **7**, 692 (1973).

<sup>6</sup>J. Callaway, *Energy Band Theory* (Academic, New York,

1964), p. 56 and also Appendix 1.

<sup>7</sup>J. P. Walter and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **4**, 1877 (1971).

<sup>8</sup>L. Kleinman and J. C. Phillips, Phys. Rev. **116**, 880 (1959).

## Spherical Model of Shallow Acceptor States in Semiconductors

A. Baldereschi\*

*Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974*

Nunzio O. Lipari

*Xerox Research Laboratories, Rochester, New York 14644*

(Received 13 March 1973)

The effective-mass approximation for shallow acceptor states in cubic semiconductors with degenerate valence bands is reformulated. The Hamiltonian is written as the sum of a spherical term and a cubic correction, thus pointing out the relevance of the spherical symmetry in the acceptor problem and the strong similarity to the case of atoms with the spin-orbit interaction. Without the introduction of any explicit representation of the Hamiltonian, the present formulation yields a meaningful classification of the acceptor states and reduces the eigenvalue problem to simple radial Hamiltonians. These radial Hamiltonians are explicitly given for the most important acceptor states and are shown to apply also to the description of the exciton problem. The variational method is used in the numerical calculation. The resulting eigenvalues, eigenfunctions, and related quantities are given as functions of the relevant parameters. The theoretical ionization energies are compared with available experimental data.

### I. INTRODUCTION

The optical and transport properties of semiconductors are strongly affected by the presence of charged impurities, owing to the bound states that such impurities produce in the forbidden energy gap.<sup>1</sup> Depending on its valence being larger or smaller than that of the host atom it replaces, the impurity can act as a donor or acceptor, respectively. In the former case, the extra electrons are associated with the conduction-band minimum whereas, in the latter, the missing electrons (holes) are related to the valence-band maximum.

The relation between impurity states and band structure has been studied by Kittel and Mitchell<sup>2</sup> and Luttinger and Kohn,<sup>3</sup> within the limits of the effective-mass approximation. The potential produced by charged impurities is long range. At distances from the impurity site large compared to the lattice constant, this potential is well described by a Coulomb potential screened by the dielectric constant of the host. At distances smaller than or comparable to the lattice constant, the potential strongly deviates from the Coulombic behavior because of the presence of the impurity core. Since the wave functions of these bound states generally extend over distances of many lattice constants, the deviations affect only the ground state (central-cell corrections).

Donors and acceptors have been most studied<sup>4</sup> in crystals with the diamond and zinc-blende lattice. For these substances, it is well known<sup>5</sup> that the band structure has a simple minimum in the conduction band and a degenerate maximum in the valence band. Therefore donor states are easily investigated<sup>6,7</sup> whereas a complex analysis is required for acceptor states.<sup>8-12</sup>

The first investigation of acceptors in Si and Ge was done by Kohn and Schecter.<sup>8</sup> Using the variational method, they calculated the energies of the lowest four optical transitions in the acceptor spectrum. Later Mendelson and James<sup>9</sup> considered again the acceptor spectrum of Ge using the same variational approach but with more general trial functions. Since then, Suzuki *et al.*<sup>10</sup> and Mendelson and Schultz<sup>11</sup> have improved the previous variational calculations by including the split-off valence band, whereas Sheka and Sheka<sup>12</sup> have included the lowest conduction band in order to treat the case of small-gap semiconductors.

All these calculations show that the effective-mass approximation is satisfactory for excited states whereas, for the ground state, one must consider the chemical shift. These investigations, which use a brute force variational approach, have not helped in achieving a clear insight of the acceptor spectrum. In particular, these results do not show explicitly the dependence of the acceptor spectrum on the energy-band parameters and therefore they cannot be generalized to any cubic semiconductor. Furthermore, these calculations are time consuming even when a small number of trial wave functions is used; and the limited number (i.e., two) of angular momenta represented in the trial functions has no justification but necessity.

Recently, we have given preliminary reports<sup>13</sup> of a new approach to the acceptor problem which has several advantages over the previous investigations: The simple formulation of the problem and the absence of any explicit representation of the Hamiltonian make possible a clear insight and a meaningful classification of the acceptor states. Furthermore the new formulation suggests a new set of parameters to describe the valence band,

which allow us to tabulate results for any cubic semiconductor. In order to achieve all these advantages we make use of the strong similarity between acceptor centers and atomic and nuclear systems. This similarity, which has not been fully exploited so far, becomes apparent from the acceptor Hamiltonian if the terms which have strict cubic symmetry are separated from the terms which, besides having cubic symmetry, are also spherically symmetric. Since the former terms generally contribute much less to binding than the latter terms, we can neglect the cubic contribution in first approximation. In this way, we are left with a spherical model of the acceptor center which is strongly similar to atomic systems with the spin-orbit interaction included. In this analogy, different degenerate valence bands in the acceptor case play the role of different spin states in the atomic counterpart. Large profit can be obtained from this similarity because we can use the theorems and techniques of the angular momentum theory which were very useful in the study of atomic systems. The effect of the cubic term may then be added as a perturbation of the spherical model.

The spherical model is presented in detail in Sec. II. The radial Hamiltonians which describe acceptor states of various symmetries are derived in Sec. III in the limits of strong and weak spin-orbit coupling. Section IV is devoted to the numerical solution of these Hamiltonians. In this section we give the results for the acceptor energy levels, wave functions, mean radii, and probability to be in the central cell (the latter quantity is useful in the evaluation of central-cell corrections). The admixture coefficients of different angular momenta in the acceptor wave functions are also given to show the effect of interband coupling in this problem. Furthermore, the theoretical energy spectrum of acceptors is explicitly given for several semiconductors and compared with available experimental data. In Sec. V we summarize the main achievements of the present work and discuss possible extensions. For convenience, in the Appendix we give the concepts and theorems of angular momentum theory which are used in the present paper.

## II. SPHERICAL MODEL

In the present paper the acceptor center is described with a Coulomb potential screened by the static dielectric constant of the host crystal. Previous investigations<sup>8-11</sup> have shown that this approximation is satisfactory for excited states but not for the ground state, whose binding energy is affected by central-cell corrections due to the impurity core. We feel, however, that accurate solutions of the acceptor problem in the Coulomb approximation are nevertheless of great interest

even for the ground state since they allow an estimate of the magnitude of central-cell corrections. Furthermore we will restrict ourselves to the more common case of singly charged acceptors because this is the case where central-cell effects are less relevant. In fact, the larger the charge, the more localized (and therefore sensitive to chemical shifts) are the acceptor wave functions. Assuming also that the acceptor kinetic energy is well described in the effective-mass approximation, the acceptor Hamiltonian is<sup>14</sup>

$$H = (\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2) \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{\gamma_2}{m_0} (\hat{p}_x^2 J_x^2 + \hat{p}_y^2 J_y^2 + \hat{p}_z^2 J_z^2) - \frac{2\gamma_3}{m_0} [\{\hat{p}_x \hat{p}_y\} \{J_x J_y\} + \{\hat{p}_y \hat{p}_z\} \{J_y J_z\} + \{\hat{p}_z \hat{p}_x\} \{J_z J_x\}] - \frac{e^2}{\epsilon_0 \gamma}, \quad (1)$$

where  $\{ab\} = (ab + ba)/2$ ;  $\epsilon_0$  and  $m_0$  are the crystal dielectric constant and the free electron mass, respectively;  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ , and  $\gamma_3$  are the parameters proposed by Luttinger for the description of the hole dispersion relation near the center of the Brillouin zone;  $\hat{p}$  is the hole linear momentum operator and  $\hat{J}$  is the angular momentum operator corresponding to spin  $\frac{3}{2}$ . Hamiltonian (1) is valid for crystals with the diamond structure and in the limit of strong spin-orbit coupling, i.e., when the valence-band spin-orbit splitting  $\Delta$  at the center of the Brillouin zone is much larger than the acceptor binding energy. In the case of zinc-blende crystals, terms linear in  $\hat{p}$  should be added to Hamiltonian (1) but, as we have already proved in the case of exciton states,<sup>15</sup> the binding contribution due to these terms is very small and therefore negligible.

The above Hamiltonian can be thought of as describing a particle with spin  $\frac{3}{2}$  in a Coulomb potential. The first term is the particle kinetic energy, the second and third terms represent a kind of "spin-orbit" interaction, and the last term is the external potential. The strong analogy with atomic systems is evident. In the study of Hamiltonian (1) it is therefore convenient to use the same techniques which have been successfully applied in the theory of atomic spectra. To begin, let us introduce the following second-rank Cartesian tensor operators<sup>12</sup>:

$$P_{ik} = 3\hat{p}_i \hat{p}_k - \delta_{ik} \hat{p}^2 \quad (2a)$$

and

$$J_{ik} = \frac{3}{2}(J_i J_k + J_k J_i) - \delta_{ik} J^2, \quad (2b)$$

where the indices  $i, k = 1, 2, 3$  mean  $x, y, z$ , respectively. These operators are symmetric tensors

$$P_{ik} = P_{ki} \quad \text{and} \quad J_{ik} = J_{ki} \quad (3)$$



which have vanishing trace

$$P_{ik}\delta_{ik} = 0 \text{ and } J_{ik}\delta_{ik} = 0, \quad (4)$$

where we have used the Einstein convention on repeated indices. The convenience of introducing the tensor operators  $P_{ik}$  and  $J_{ik}$  is due to the fact that the operators  $\vec{p}$  and  $\vec{J}$  appear in Hamiltonian (1) in second order only. With the help of these tensor operators, the acceptor Hamiltonian can be written in compact form as follows:

$$H = \frac{\gamma_1}{2m_0} p^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} - \frac{1}{9m_0} [\gamma_3 - (\gamma_3 - \gamma_2)\delta_{ik}] P_{ik} J_{ik}. \quad (5)$$

The Cartesian tensors (2a) and (2b) are reducible tensors of second rank and therefore they can be decomposed into irreducible spherical tensors of rank  $l = 0, 1$ , and  $2$ . Because of the symmetry property (3) such decomposition does not contain the  $l = 1$  component. Since also the  $l = 0$  component is absent because our tensors have vanishing trace, we can write Hamiltonian (5) in terms of the second-rank ( $l = 2$ ) irreducible components  $P_q^{(2)}$  and  $J_q^{(2)}$  ( $q = -2, -1, 0, 1, 2$ ) as follows:

$$H = \left( \frac{\gamma_1}{2m_0} p^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \right) - \frac{3\gamma_3 + 2\gamma_2}{45m_0} (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) + \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{18m_0} \{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} + \frac{1}{5} \sqrt{70} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^{(4)} \} + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)}, \quad (6)$$

where we have used the definitions of scalar and vector products of irreducible spherical tensor operators which are given in the Appendix.

Expressions (1) and (6) are different but equivalent ways of writing the same acceptor Hamiltonian. The symmetry of our problem is obviously cubic and according to symmetry considerations Luttinger<sup>14</sup> wrote Hamiltonian (1) as the most general expression in second order in  $\vec{p}$  and with cubic symmetry. Expression (6) is equivalent to (1) but is written in terms of spherical tensors which are irreducible representations of the full rotation group and not of the cubic point group of the crystal. This makes it possible to separate in (6) the last term, which is strictly cubic, from the first two, which, besides having cubic symmetry, are also spherically invariant. This separation of the acceptor Hamiltonian into terms with spherical and cubic symmetry is the foundation of the spherical model that we are going to present. The rearrangement of terms in (6) suggests a more convenient set of parameters for the description of the acceptor problem. Together with  $\gamma_1$ , we use the parameter

$$\mu = (6\gamma_3 + 4\gamma_2)/5\gamma_1, \quad (7)$$

which gives the strength of the spherical spin-orbit interaction, i.e., the second term in (6), and

the parameter

$$\delta = (\gamma_3 - \gamma_2)/\gamma_1, \quad (8)$$

which measures the cubic contribution, i.e., the last term in (6). Furthermore we use the effective Rydberg

$$R_0 = e^4 m_0 / 2\hbar^2 \epsilon_0^2 \gamma_1 \quad (9)$$

and the effective Bohr radius

$$a_0 = \hbar^2 \epsilon_0 \gamma_1 / e^2 m_0 \quad (10)$$

as units of energy and length, respectively, and we write Hamiltonian (6) as follows:

$$H = \frac{1}{\hbar^2} p^2 - \frac{2}{r} - \frac{1}{9\hbar^2} \mu (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) + \frac{1}{9\hbar^2} \delta \{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} + \frac{1}{5} \sqrt{70} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^{(4)} + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} \}, \quad (11)$$

where the band structure of the host crystal is characterized through the valence-band parameters  $\mu$  and  $\delta$ .

The values of the parameters  $\mu$  and  $\delta$  for 13 crystals with the diamond and zinc-blende structure are listed in Table I together with the Luttinger valence-band parameters  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ , and  $\gamma_3$  and the values of the dielectric constant  $\epsilon_0$ . From these values it is evident that, with the only exception of Si for which  $\mu/\delta \approx 2$ , the parameter  $\delta$  is much smaller than the parameter  $\mu$ , and therefore the cubic term in Hamiltonian (11) will contribute little to the binding energy.<sup>13</sup> In the present paper we will completely neglect the cubic term in (11) and we will study the acceptor problem in the spherical approximation which is described by the following Hamiltonian:

$$H_{sph} = (1/\hbar^2) [p^2 - \frac{1}{9} \mu (P^{(2)} \cdot J^{(2)})] - 2/r, \quad (12)$$

which has full rotational symmetry. The effects of the cubic term will be studied in a future paper<sup>16</sup> as a perturbation on the solutions of (12).

The valence-band energy dispersion relation is given in the spherical model by

$$E = -(\gamma_1/2m_0) p^2 - \frac{1}{9} \mu (P^{(2)} \cdot J^{(2)}), \quad (13)$$

where  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  is a  $c$  number. Considering that  $J$  is the angular momentum operator corresponding to spin  $\frac{3}{2}$ , we can solve (13) and find two parabolic bands with curvature independent of the direction of  $\vec{k}$ ,

$$E_{\pm} = -(\hbar^2 \gamma_1 / 2m_0) (1 \pm \mu) k^2. \quad (14)$$

The dispersion relation (14) is represented in Fig. 1 for different values of  $\mu$ . Note that the parameter  $\mu$  has been defined in such a way that for  $\mu = 1$  one of the two bands becomes flat. Furthermore, for values of  $\mu$  larger than 1, the spherical model

TABLE I. Values of the static dielectric constant  $\epsilon_0$  and of the valence-band parameters  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ , and  $\gamma_3$  used in the present calculation. The valence-band parameters  $\mu$  and  $\delta$  introduced in the present paper in connection with the spherical model are also given together with the energy and length units  $R_0$  and  $a_0$ , respectively.

	$\epsilon_0$	$\gamma_1^a$	$\gamma_2^a$	$\gamma_3^a$	$\mu$	$\delta$	$R_0$ (meV)	$a_0(\text{\AA})$
Si	11.40 <sup>b</sup>	4.22	0.39	1.44	0.483	0.249	24.8	25.5
Ge	15.36 <sup>b</sup>	13.35	4.25	5.69	0.766	0.108	4.3	108.5
AlSb	12.0 <sup>c</sup>	4.15	1.01	1.75	0.701	0.178	22.8	26.4
GaP	10.75 <sup>d</sup>	4.20	0.98	1.66	0.661	0.162	28.0	23.9
GaAs	12.56 <sup>e</sup>	7.65	2.41	3.28	0.767	0.114	11.3	50.8
GaSb	15.7 <sup>c</sup>	11.80	4.03	5.26	0.808	0.104	4.7	98.0
InP	12.4 <sup>f</sup>	6.28	2.08	2.76	0.792	0.108	14.1	41.2
InAs	14.6 <sup>g</sup>	19.67	8.37	9.29	0.907	0.047	3.2	152.0
InSb	17.9 <sup>c</sup>	35.08	15.64	16.91	0.935	0.036	1.2	332.3
ZnS	8.1 <sup>h</sup>	2.54	0.75	1.09	0.751	0.134	81.6	10.9
ZnSe	9.1 <sup>h</sup>	3.77	1.24	1.67	0.795	0.114	43.6	18.2
ZnTe	10.1 <sup>h</sup>	3.74	1.07	1.64	0.755	0.152	35.7	20.0
CdTe	9.7 <sup>h</sup>	5.29	1.89	2.46	0.844	0.108	27.3	27.2

<sup>a</sup>For valence-band parameters see P. Lawaetz, Phys. Rev. B 4, 3460 (1971).

<sup>b</sup>R. A. Faulkner, Phys. Rev. 184, 713 (1969).

<sup>c</sup>M. Hass and B. W. Henvis, J. Phys. Chem. Solids 23, 1099 (1962).

<sup>d</sup>L. Patrick and P. J. Dean, Phys. Rev. 188, 1254 (1969).

<sup>e</sup>G. E. Stillman, D. M. Larsen, C. M. Wolfe, and R. C. Brandt, Solid State Commun. 9, 2245 (1971).

<sup>f</sup>C. Hilsum, S. Fray, and C. Smith, Solid State Commun. 7, 1057 (1969).

<sup>g</sup>O. G. Lorimor and W. G. Spitzer, J. Appl. Phys. 36, 1841 (1965).

<sup>h</sup>D. Berlincourt, H. Jaffe, and L. R. Shiozawa, Phys. Rev. 129, 1009 (1963).

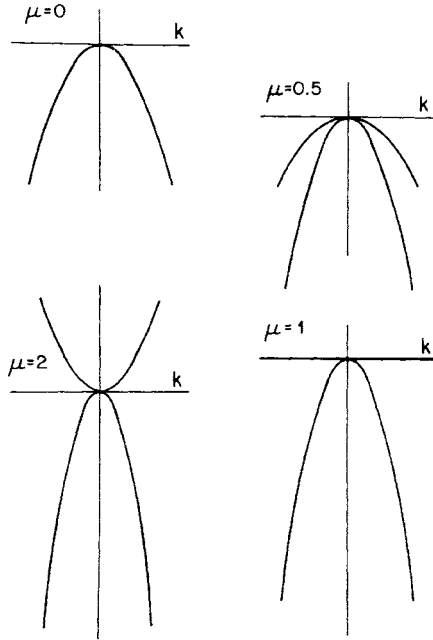


FIG. 1. Energy dispersion relation for the top four valence bands near the center of the Brillouin zone as described by the spherical model. Each band is doubly degenerate. Note that for  $\mu=1$  one valence band becomes flat and that for  $\mu>1$  the spherical model describes the inverted-valence-band structure.

describes the dispersion relation characteristic of narrow-gap semiconductors like  $\alpha$ -Sn and the mercury compounds. The more general dispersion relation corresponding to Hamiltonian (1) and including also the cubic contributions is easily shown to be

$$E'_{\pm} = -(\hbar^2 \gamma_1 / 2m_0) \{ k^2 \pm [(\mu - \frac{8}{5} \delta)^2 k^4 + \frac{12}{5} \delta (5\mu - \delta) (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)]^{1/2} \}, \quad (15)$$

which for  $\delta=0$  reduces to (14). The effects of the approximations involved in the spherical model, i. e., of replacing the dispersion relation (15) with the more simple expression (14), are shown in Fig. 2 for Ge, which represents a typical case as can be seen from the values given in Table I. According to the dispersion relation (15) the curvature of the two parabolic bands depends on the direction of  $\vec{k}$ . From Fig. 2 we see, however, that such dependence is quite small for common values of  $\delta$ , and this is the reason of the soundness of the spherical model.

The spherical-model Hamiltonian (12) is valid in the limit of strong spin-orbit coupling between the valence bands. We also wish to study the opposite limiting case, i. e., the case of vanishing spin-orbit coupling. Even though this latter case occurs less frequently than the former, nevertheless its study will be useful in estimating the effect of the spin-orbit interaction on the acceptor binding

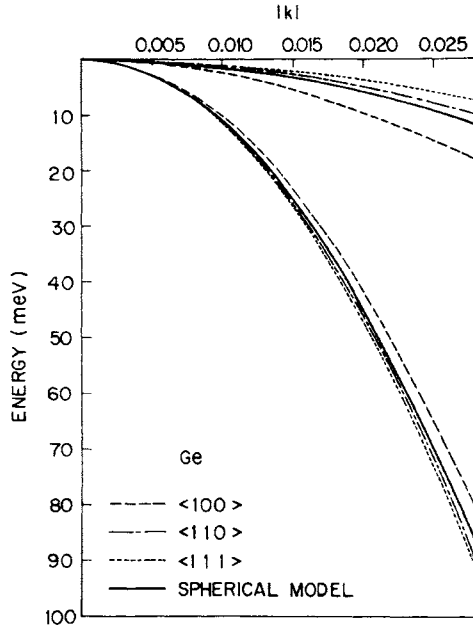


FIG. 2. Actual energy dispersion relation for the valence bands of Ge near the center of the Brillouin zone and along the main symmetry directions  $\Delta$ ,  $\Sigma$ , and  $\Lambda$ . The deviations between the real valence bands and those predicted by the spherical model (also shown) are produced by the cubic term.

energy. Neglecting spin and the spin-orbit interaction, the valence band is threefold degenerate at the center of the Brillouin zone and the acceptor Hamiltonian corresponding to (1) is<sup>14</sup>

$$H' = (\gamma_1 + 4\gamma_2) \frac{p^2}{2m_0} - \frac{3\gamma_2}{m_0} (p_x^2 I_x^2 + p_y^2 I_y^2 + p_z^2 I_z^2) - \frac{6\gamma_3}{m_0} [\{p_x p_y\} \{I_x I_y\} + \{p_y p_z\} \{I_y I_z\} + \{p_z p_x\} \{I_z I_x\}], \quad (16)$$

which is very similar to (1) except for numerical constants and the fact that the operator  $J$  is replaced by  $I$ , the angular momentum operator corresponding to spin 1. We define in analogy with (2b) the Cartesian tensor

$$I_{ik} = \frac{3}{2} (I_i I_k + I_k I_i) - \delta_{ik} I^2, \quad (17)$$

which has the same properties (3) and (4) of the tensor  $J_{ik}$ . Using the second-rank irreducible components  $I_q^{(2)}$  ( $q = -2, -1, 0, 1, 2$ ) of the tensor (17) and using the units (9) and (10) we can write Hamiltonian (16) as follows:

$$H' = \frac{1}{\hbar^2} p^2 - \frac{2}{r} - \frac{1}{3\hbar^2} \mu (P^{(2)} \cdot I^{(2)}) + \frac{1}{3\hbar^2} \delta \{ [P^{(2)} \times I^{(2)}]_4^{(4)} \}$$

$$+ \frac{1}{5} \sqrt{70} [P^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(4)} + [P^{(2)} \times I^{(2)}]_{-4}^{(4)} \}, \quad (18)$$

which is completely analogous to (11). It is evident that also in this case we can apply the spherical approximation, since the relative strength of the cubic term is similar in (11) and (18). The spherical-model acceptor Hamiltonian in the limit of vanishing spin-orbit interaction can therefore be written as follows:

$$H'_{\text{sph}} = (1/\hbar^2) [p^2 - \frac{1}{3} \mu (P^{(2)} \cdot I^{(2)})] - 2/r. \quad (19)$$

Before analyzing the spherical-model Hamiltonians (12) and (19), we wish to discuss analogies and differences between the acceptor problem and the direct exciton problem in crystals with the diamond and zinc-blende structure. The Hamiltonian which describes the relative electron-hole motion of direct excitons<sup>15,17</sup> is

$$H_{\text{ex}} = H + p^2/2m_e, \quad (20)$$

where  $H$  is the acceptor Hamiltonian and  $m_e$  is the electron effective mass at the center of the Brillouin zone. Since the second term on the right-hand side of (20) is easily included into the acceptor Hamiltonian  $H$  by substituting the parameter  $\gamma_1$  with  $\gamma'_1 = \gamma_1 + m_0/m_e$ , we see that the acceptor and the exciton Hamiltonians are formally similar. One would be tempted, therefore, to solve the acceptor problem following the same lines used for the exciton problem.<sup>15</sup> Experimental data, however, show that the two kinds of energy spectra are completely different in that the exciton spectrum resembles very closely that of the hydrogen atom whereas the acceptor spectrum is completely different. The solution of this puzzle is evident after writing Hamiltonian (20) in a dimensionless form analogous to (11). Using the units (9) and (10), where  $\gamma_1$  is replaced by  $\gamma'_1$ , we obtain for the exciton Hamiltonian

$$H_{\text{ex}} = \frac{1}{\hbar^2} p^2 - \frac{2}{r} - \frac{1}{9\hbar^2} \alpha \mu (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) + \frac{1}{9\hbar^2} \alpha \delta \{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} \} + \frac{1}{5} \sqrt{70} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^{(4)} + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_{-4}^{(4)} \}, \quad (21)$$

which is exactly equal to the acceptor Hamiltonian (11) except for the fact that both the spherical and the cubic spin-orbit contributions are scaled by a factor  $\alpha = \gamma_1/\gamma'_1 = \gamma_1/(\gamma_1 + m_0/m_e)$  whose value is typically of the order 0.3, as shown in Table II.

Even though the exciton and the acceptor spectra are described by the same formal Hamiltonian, the two cases differ considerably because of the different strength of the spin-orbit terms. While in the exciton case these terms can be adequately treated by using perturbation theory, a more sophisticated treatment is necessary for the acceptor spectrum.



TABLE II. Values of the scaling parameter  $\alpha$ , which describes the strength ratio of the "spin-orbit" terms in the exciton and in the acceptor Hamiltonians. The scaling parameter is calculated using the values of  $\gamma_1$  given in Table I and the electron masses quoted in Ref. 15.

Ge	0.34	InAs	0.32
AlSb	0.04	InSb	0.34
GaP	0.35	ZnS	0.50
GaAs	0.34	ZnSe	0.49
GaSb	0.36	ZnTe	0.25
InP	0.32	CdTe	0.34

In Sec. IV we will show that the scaling parameter  $\alpha \approx 0.3$  is indeed responsible for the big differences between acceptor and exciton spectra.

### III. ANALYSIS OF SPHERICAL-MODEL HAMILTONIAN

In this section we present a qualitative study of the spherical-model Hamiltonians (12) and (19) which are valid in the limits of strong and weak spin-orbit coupling, respectively. These Hamiltonians can be thought of as describing an hydrogen atom perturbed by a spherical term

$$\alpha \mu (P^{(2)} \cdot S^{(2)}) \quad (22)$$

which can be considered as a kind of "spin-orbit" interaction when the spin operator  $S$  assumes the values  $\frac{3}{2}$  and 1 in the limits of large and small spin-orbit splitting  $\Delta$ , respectively. For  $\mu = 0$ , Hamiltonians (12) and (19) become identical to each other and to the hydrogen-atom Hamiltonian and therefore can be solved exactly. For this case the acceptor energy spectrum is given by

$$E(\mu = 0) = -1/n^2 \quad (23)$$

when the energy unit (9) has been used and  $n$  is the usual hydrogenic principal quantum number. The eigenstates can be classified according to  $n=1, 2, 3, \dots$ , and to the values of the orbital angular momentum  $L$  and its component in any given direction, which we will assume to be the  $z$  direction.

For  $\mu \neq 0$  we have to consider the "spin" operator  $\vec{S}$  and the spin-orbit term (22). The acceptor Hamiltonians (12) and (19) are spherically symmetric in the coupled orbital and spin spaces and the total angular momentum  $\vec{F} = \vec{L} + \vec{S}$  is a constant of the motion. Accordingly the acceptor states can be classified following the  $L$ - $S$  coupling scheme used for atomic systems. Since for practical purposes the only important acceptor states are those with  $L=0$  and  $L=1$ , in what follows we will limit our consideration to them. Furthermore since the  $L$ - $S$  coupling scheme depends on the particular value of  $S$ , we will distinguish the two cases of strong and weak spin-orbit coupling.

#### A. Strong Spin-Orbit Coupling

In this case Hamiltonian (12) is valid and the total angular momentum is  $\vec{F} = \vec{L} + \vec{S}$ . While the hydrogenic  $nS$  states give rise only to  $nS_{3/2}$  states (the numerical lower index representing the value of  $F$ ), the hydrogenic  $nP$  states split into  $nP_{1/2}$ ,  $nP_{3/2}$ , and  $nP_{5/2}$ . Furthermore the spin-orbit term in Hamiltonian (12) couples only hydrogenic states for which  $\Delta L = 0, \pm 2$ . This selection rule, together with the fact that  $F$  is a constant of motion, defines the most general expression for the eigenfunctions of the acceptor Hamiltonian. For the most important acceptor states the most general wave functions can be written as

$$\Phi(S_{3/2}) = f_0(r) |L=0, J=\frac{3}{2}, F=\frac{3}{2}, F_z\rangle + g_0(r) |L=2, J=\frac{3}{2}, F=\frac{3}{2}, F_z\rangle, \quad (24a)$$

$$\Phi(P_{1/2}) = f_1(r) |L=1, J=\frac{3}{2}, F=\frac{1}{2}, F_z\rangle, \quad (24b)$$

$$\Phi(P_{3/2}) = f_2(r) |L=1, J=\frac{3}{2}, F=\frac{3}{2}, F_z\rangle + g_2(r) |L=3, J=\frac{3}{2}, F=\frac{3}{2}, F_z\rangle, \quad (24c)$$

$$\Phi(P_{5/2}) = f_3(r) |L=1, J=\frac{3}{2}, F=\frac{5}{2}, F_z\rangle + g_3(r) |L=3, J=\frac{3}{2}, F=\frac{5}{2}, F_z\rangle, \quad (24d)$$

where the functions  $|L, J, F, F_z\rangle$  are eigenfunctions of the total angular momentum in the  $L$ - $J$  coupled scheme and  $f_i(r)$  and  $g_i(r)$  are general radial functions which are defined by the condition that the functions (24) must be eigenfunctions of the Hamiltonian (12). To calculate the matrix element of the acceptor Hamiltonian between the functions (24), we use the "reduced-matrix-element" technique,<sup>18</sup> which for our purposes can be written

$$\begin{aligned} \langle L', J, F, M | (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) | L, J, F, M \rangle \\ = (-1)^{L+J+F} \begin{Bmatrix} F & J & L \\ 2 & L & J \end{Bmatrix} \times (J || J^{(2)} || J) (L' || P^{(2)} || L), \end{aligned} \quad (25)$$

which expresses the matrix element of the spin-orbit term (22) as a function of a 6- $j$  symbol<sup>18</sup> and of the reduced matrix elements  $(J || J^{(2)} || J)$  and  $(L' || P^{(2)} || L)$  which are explicitly calculated in the Appendix. The matrix element of the hydrogenlike term that appears in (12) is calculated very simply and is

$$\begin{aligned} \langle L', J, F, M | \frac{1}{\hbar^2} p^2 - \frac{2}{r} | L, J, F, M \rangle \\ = \left[ -\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{2}{r} \right] \delta_{LL'}. \end{aligned} \quad (26)$$

As a result we obtain that the radial wave functions  $f_i(r)$  and  $g_i(r)$  must be solutions of the following systems of differential equations:

$$\begin{vmatrix} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2}{r} - E & -\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{5}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) \\ -\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) & \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{6}{r^2} + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_0(r) \\ g_0(r) \end{vmatrix} = 0, \quad (27a)$$

$$\left[ (1 + \mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \right] f_1(r) = 0, \quad (27b)$$

$$\begin{vmatrix} (1 - \frac{4}{5}\mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{3}{5}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) \\ -\frac{3}{5}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) & (1 + \frac{4}{5}\mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_2(r) \\ g_2(r) \end{vmatrix} = 0, \quad (27c)$$

$$\begin{vmatrix} (1 + \frac{1}{5}\mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{2}{5}\sqrt{6}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) \\ -\frac{2}{5}\sqrt{6}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) & (1 - \frac{1}{5}\mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_3(r) \\ g_3(r) \end{vmatrix} = 0, \quad (27d)$$

which are valid for the states  $S_{3/2}$ ,  $P_{1/2}$ ,  $P_{3/2}$ , and  $P_{5/2}$ , respectively. The differential equation for  $P_{1/2}$  states (27b) can be solved exactly because it is similar to a hydrogenlike radial equation for  $p$  states, and we find that its eigenvalues are

$$E(nP_{1/2}) = \frac{1}{(1 + \mu)n^2} \quad (n = 2, 3, \dots). \quad (28)$$

Exact solutions of the Hamiltonians for the  $S_{3/2}$ ,  $P_{3/2}$ , and  $P_{5/2}$  states have not been found. Approximate solutions of these Hamiltonians obtained using the variational method will be discussed in Sec. IV.

#### B. Weak Spin-Orbit Coupling

The acceptor Hamiltonian valid in this limit is (19) and the total angular momentum  $\vec{F} = \vec{L} + \vec{I}$  is again a constant of motion. Also in this case the spin-orbit term couples only hydrogenic states for which  $\Delta L = 0, \pm 2$ . In the  $L$ - $I$  coupling scheme the hydrogenic  $nS$  states give rise only to  $nS_1$  states,

while the hydrogenic  $nP$  states split into  $nP_0$ ,  $nP_1$ , and  $nP_2$ . The most general functions describing these states are

$$\begin{aligned} \Phi(S_1) &= F_0(r) |L=0, I=1, F=1, F_z\rangle \\ &+ G_0(r) |L=2, I=1, F=1, F_z\rangle, \end{aligned} \quad (29a)$$

$$\Phi(P_0) = F_1(r) |L=1, I=1, F=0, F_z\rangle, \quad (29b)$$

$$\Phi(P_1) = F_2(r) |L=1, I=1, F=1, F_z\rangle, \quad (29c)$$

$$\begin{aligned} \Phi(P_2) &= F_3(r) |L=1, I=1, F=2, F_z\rangle \\ &+ G_3(r) |L=3, I=1, F=2, F_z\rangle. \end{aligned} \quad (29d)$$

The matrix elements of the acceptor Hamiltonian (19) between the above functions can be calculated using expressions (25) and (26). The values of the reduced matrix elements appropriate for this case are given in the Appendix. As a result we find the following systems of differential equations for the radial wave functions  $F_i(r)$  and  $G_i(r)$ :

$$\begin{vmatrix} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2}{r} - E & -\sqrt{2}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{5}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) \\ -\sqrt{2}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) & (1 + \mu) \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{6}{r^2} + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F_0(r) \\ G_0(r) \end{vmatrix} = 0, \quad (30a)$$

$$\left[ (1 + 2\mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \right] F_1(r) = 0, \quad (30b)$$

$$\left[ (1 - \mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \right] F_2(r) = 0, \quad (30c)$$

$$\begin{vmatrix} (1+\frac{1}{5}\mu)\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{2}{r^2}\right)+\frac{2}{r}-E & \frac{3}{5}\sqrt{6}\mu\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{7}{r}\frac{d}{dr}+\frac{8}{r^2}\right) \\ \frac{3}{5}\sqrt{6}\mu\left(\frac{d^2}{dr^2}-\frac{3}{r}\frac{d}{dr}+\frac{3}{r^2}\right) & (1+\frac{4}{5}\mu)\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{12}{r^2}\right)+\frac{2}{r}-E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F_3(r) \\ G_3(r) \end{vmatrix} = 0, \quad (30d)$$

which apply to the states  $S_1$ ,  $P_0$ ,  $P_1$ , and  $P_2$ , respectively. The differential equations (30b) for the  $P_0$  states and (30c) for the  $P_1$  states are similar to hydrogenlike radial Hamiltonians for  $p$  states and can be solved exactly. The corresponding eigenvalues are

$$E(nP_0) = \frac{1}{(1+2\mu)n^2} \quad (n=2, 3, \dots) \quad (31)$$

and

$$E(nP_1) = \frac{1}{(1-\mu)n^2} \quad (n=2, 3, \dots). \quad (32)$$

Approximate variational solutions to the Hamiltonians for the  $S_1$  and  $P_2$  states will be discussed in Sec. IV.

#### IV. METHOD OF SOLUTION AND RESULTS

Exact solutions for the eigenvalues and the eigenfunctions of the radial acceptor Hamiltonians (27) and (30) are in general very hard to obtain. Only for the  $P_{1/2}$ ,  $P_0$ , and  $P_1$  states can an exact solution be obtained since, in these cases, the Hamiltonian reduces to that of the hydrogen atom for  $p$  states. For the other states, we have solved each Hamiltonian using the variational technique. We have assumed as trial wave functions, superpositions of Gaussian functions times the lowest possible polynomials which behave correctly at the origin.<sup>9</sup> For the  $S_{3/2}$  state we have used

$$f_0(r) = \sum_{i=1}^{21} A_i e^{-\alpha_i r^2} \quad (33a)$$

and

$$g_0(r) = r \sum_{i=1}^{21} B_i e^{-\alpha_i r^2}. \quad (33b)$$

The same trial wave functions have also been used for the variational solution of the  $S_1$  radial Hamiltonian (30a). Similarly, the trial wave functions used for the  $P_{3/2}$  state,

$$f_2(r) = r \sum_{i=1}^{21} C_i e^{-\alpha_i r^2} \quad (34a)$$

and

$$g_2(r) = r^2 \sum_{i=1}^{21} D_i e^{-\alpha_i r^2}, \quad (34b)$$

have also been used to approximate the radial part of the  $P_{5/2}$  and  $P_2$  eigenfunctions. While the linear

parameters  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$ , and  $D_i$  were used as variational parameters in order to minimize the energy, the same constant set of values for the 21 parameters  $\alpha_i$  was used throughout the calculations. These parameters have been chosen in geometrical progression ( $\alpha_{i+1} = g\alpha_i$ , with  $g$  independent of  $i$ ) and their range of values is wide enough to cover all actual situations met in studying the acceptor spectrum, the smallest value being  $\alpha_1 = 1 \times 10^{-2}$  and the largest  $\alpha_{21} = 5 \times 10^5$ . For example, with this set of Gaussian functions, the lowest-energy eigenvalues of the hydrogen atom for  $s$  and  $p$  symmetries are  $E(1s) = 1.00000$ ,  $E(2s) = 0.24999$ ,  $E(2p) = 0.25000$ , and  $E(3p) = 0.10889$ , in units of  $R_0$ .

The energies of the lowest acceptor states of interest are tabulated as a function of  $\mu$  in Tables III and IV for the cases of strong and weak spin-orbit interaction, respectively. The energy spectrum for the more relevant case of strong spin-orbit coupling is also given in Fig. 3. These results represent the first extensive theoretical investigation of the acceptor energy spectrum as function of the valence-band parameters. An interesting feature of these two energy spectra is the

TABLE III. Acceptor energy spectrum as function of the parameter  $\mu$  in the strong spin-orbit limit ( $\Delta = \infty$ ). The energies are in units of the effective Rydberg  $R_0$ .

$\mu$	$1S_{3/2}$	$2S_{3/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$	$2P_{5/2}$
0.00	1.000	0.250	0.250	0.250	0.250
0.05	1.002	0.251	0.238	0.261	0.248
0.10	1.009	0.254	0.227	0.273	0.248
0.15	1.021	0.258	0.217	0.287	0.249
0.20	1.037	0.264	0.208	0.302	0.251
0.25	1.060	0.273	0.200	0.320	0.256
0.30	1.089	0.284	0.192	0.341	0.262
0.35	1.125	0.297	0.185	0.365	0.270
0.40	1.171	0.313	0.179	0.394	0.281
0.45	1.228	0.333	0.172	0.428	0.295
0.50	1.299	0.358	0.167	0.468	0.322
0.55	1.388	0.388	0.161	0.518	0.336
0.60	1.503	0.426	0.156	0.580	0.366
0.65	1.653	0.476	0.152	0.660	0.406
0.70	1.857	0.542	0.147	0.767	0.461
0.75	2.145	0.635	0.143	0.917	0.539
0.80	2.580	0.773	0.139	1.142	0.657
0.85	3.309	1.003	0.135	1.518	0.857
0.90	4.768	1.460	0.132	2.268	1.259
0.95	9.145	2.820	0.128	4.521	2.470
1.00	$\infty$	$\infty$	0.125	$\infty$	$\infty$

TABLE IV. Acceptor energy spectrum as function of the parameter  $\mu$  in the weak spin-orbit limit ( $\bar{\Delta}=0$ ). The energies are in units of the effective Rydberg  $R_0$ .

$\mu$	$1S_1$	$2P_0$	$2P_1$	$2P_2$
0.00	1.000	0.250	0.250	0.250
0.05	1.004	0.227	0.263	0.249
0.10	1.017	0.208	0.278	0.251
0.15	1.037	0.192	0.294	0.255
0.20	1.064	0.179	0.313	0.261
0.25	1.100	0.167	0.333	0.269
0.30	1.145	0.156	0.357	0.281
0.35	1.201	0.147	0.384	0.295
0.40	1.268	0.139	0.417	0.312
0.45	1.351	0.132	0.455	0.333
0.50	1.453	0.125	0.500	0.360
0.55	1.580	0.119	0.556	0.393
0.60	1.742	0.114	0.625	0.435
0.65	1.952	0.109	0.714	0.490
0.70	2.234	0.104	0.833	0.565
0.75	2.631	0.100	1.000	0.669
0.80	3.228	0.096	1.250	0.827
0.85	4.227	0.093	1.667	1.091
0.90	6.224	0.089	2.500	1.619
0.95	12.213	0.086	5.000	3.207
1.00	$\infty$	0.083	$\infty$	$\infty$

diverging binding energy of a few levels (and the ground state among them) when  $\mu$  approaches 1. This behavior is consistent with the valence-band

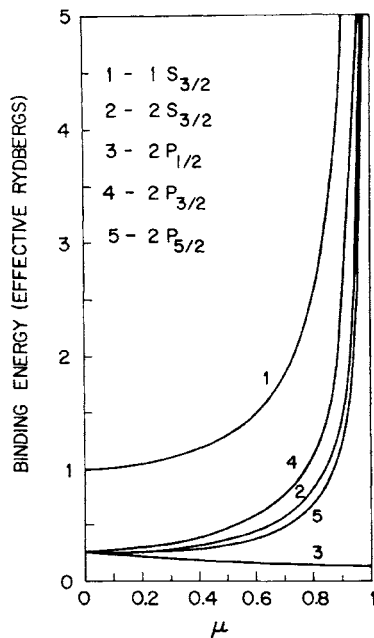


FIG. 3. Calculated acceptor energy spectrum as a function of  $\mu$  in the strong spin-orbit coupling limit ( $\bar{\Delta} = \infty$ ). The cubic term has been neglected ( $\delta=0$ ). The energies are in units of the effective Rydberg  $R_0$ .

dispersion relation (14), which shows that for  $\mu = 1$  one valence band becomes flat and therefore gives rise to infinite binding energy in a Coulomb potential. The same is also valid in the case of weak spin-orbit coupling. Not all levels however have diverging binding energy for  $\mu = 1$ . These levels ( $P_{1/2}$  and  $P_0$ ), which have finite binding energy at  $\mu = 1$ , are associated with those valence bands that maintain their parabolic behavior at  $\mu = 1$  and therefore do not give rise to any extreme localization. These two classes of acceptor states have different behavior not only for  $\mu$  approaching 1 but also over the entire range of  $\mu$ . In fact divergent levels have increasing binding energy for increasing  $\mu$  while the opposite behavior is valid for non-divergent levels.

When  $\mu$  increases, we observe not only an increase in binding energy but also a localization of the wave function. This is evident from Fig. 4, where the radial functions  $f_0(r)$  and  $g_0(r)$  of the ground state  $1S_{3/2}$  are shown for different values of  $\mu$ . A measure of the localization of the wave functions is given by the expectation value  $\langle r \rangle$  over the various acceptor states. This quantity is shown in Fig. 5. As expected, all states become more localized when  $\mu$  increases, with the only exception the state  $P_{1/2}$ , which shows the opposite behavior. From the ground-state radial functions

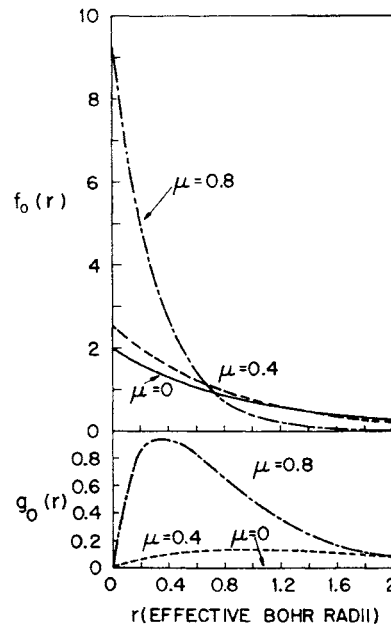


FIG. 4. Radial wave functions  $f_0(r)$  and  $g_0(r)$  of the acceptor ground state for different values of  $\mu$ . Note the increase in localization and the increase in the  $g_0$  component as  $\mu$  increases. The functions are normalized in such a way that  $\int_0^\infty [f_0^2 + g_0^2] r^2 dr = 1$  and are given in units of  $a_0^{-3/2}$ ,  $a_0$  being the effective Bohr radius.

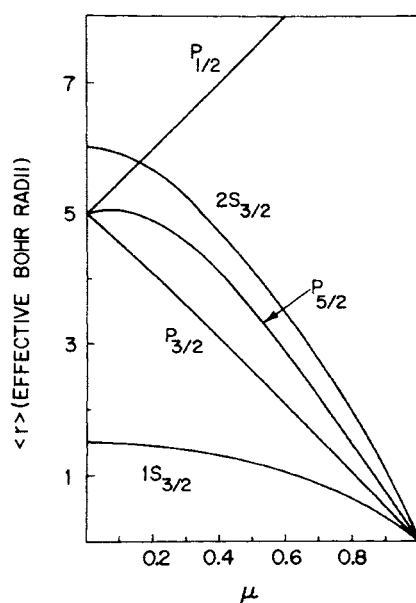


FIG. 5. Expectation value of  $r$  for various acceptor state as a function of  $\mu$ . While  $\langle r \rangle$  increases with  $\mu$  for the state  $P_{1/2}$ , all other states become more localized as  $\mu$  increases and have  $\langle r \rangle = 0$  for  $\mu = 1$ .

given in Fig. 4 we see that localization is not the only effect occurring for increasing  $\mu$ . The admixture of different orbital angular momenta also changes appreciably with  $\mu$ . The change with  $\mu$  of the admixture probabilities is shown in Fig. 6 for the various acceptor states.

A quantity of interest when estimating central-cell corrections is the probability of finding the trapped hole at the impurity site. This probability is given in Table V as a function of  $\mu$  for the two lowest states that do not vanish at the origin, i. e.,  $1S_{3/2}$  and  $2S_{3/2}$ . The result that these probabilities increase with  $\mu$  is rather obvious and is a direct consequence of the localization effect previously mentioned. However, the ratio of the two probabilities for the same value of  $\mu$  is surprisingly nearly constant over the complete range of  $\mu$  and very close to its hydrogenic value of 8. An estimate of the importance of central-cell corrections can also be obtained from Table VI, where we give the theoretical acceptor spectra in the spherical approximation together with available experimental values of the acceptor ionization energies. We note that the comparison between theory and experiment is somewhat doubtful for those crystals, like Si and GaP, where the strength of the cubic term in the acceptor Hamiltonian is relatively high. Furthermore we wish to mention that the spherical-model acceptor spectra in Si and Ge are in satisfactory agreement with previous theoretical

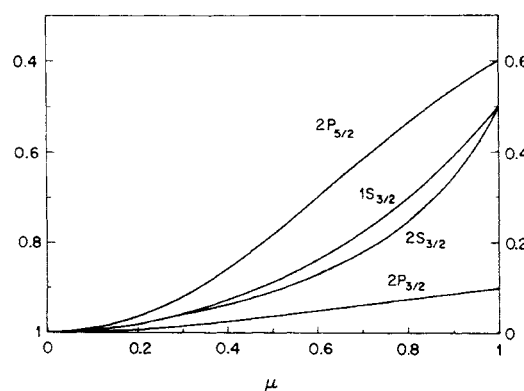


FIG. 6. Admixture coefficients of different orbital angular momenta as function of  $\mu$  for the acceptor states studied in the present paper. The left scale refers to the lower orbital angular momentum ( $f_i$  functions) and the right scale refers to the higher orbital angular momentum ( $g_i$  functions). The  $g$  components increase with  $\mu$  as is also shown for the ground state in Fig. 4. The state  $2P_{1/2}$  is not shown because it has only a single orbital angular momentum component.

energy spectra.<sup>8-11</sup>

Up to now we have considered the acceptor energy spectrum in the two extreme limits of strong ( $\bar{\Delta} = \infty$ ) and weak ( $\bar{\Delta} = 0$ ) spin-orbit coupling, when  $\bar{\Delta}$  is the spin-orbit splitting in the valence bands at the center of the Brillouin zone measured in units of the effective Rydberg, Eq. (9). While in most cases considered in Table VI the acceptor binding energy is much smaller than the spin-orbit splitting and therefore the result for  $\bar{\Delta} = \infty$  are a reasonable approximation, in some cases it may be necessary to evaluate the acceptor energy spectrum for finite values of  $\bar{\Delta}$ . Under these circumstances the acceptor Hamiltonian becomes a  $6 \times 6$  matrix operator and its solution is rather intricate. An approximate way to obtain the effects of a finite value of  $\bar{\Delta}$  is to interpolate between the values obtained

TABLE V. Probability of finding the acceptor hole at the impurity site as a function of the valence-band parameter  $\mu$  for the states  $1S_{3/2}$  and  $2S_{3/2}$  in the strong spin-orbit coupling limit. This probability can be used to estimate central-cell corrections and is given in units of  $(4\pi a_0^3)^{-1}$ ,  $a_0$  being the effective Bohr radius.

$\mu$	$1S_{3/2}$	$2S_{3/2}$	$\mu$	$1S_{3/2}$	$2S_{3/2}$
0.0	4.00	0.50	0.6	15.2	1.9
0.1	4.12	0.51	0.7	30.0	3.9
0.2	4.52	0.56	0.8	85.2	11.3
0.3	5.30	0.66	0.9	576.6	77.7
0.4	6.74	0.84	1.0	$\infty$	$\infty$
0.5	9.46	1.20			



TABLE VI. Theoretical energy spectrum of acceptor impurities in the strong spin-orbit coupling limit as predicted by the spherical model using the parameters given in Table I. Experimental ionization energies are also given. The symbols in parentheses refer to the kind of impurity and the energy unit is meV.

	$E_i(\text{expt.})$	$1S_{3/2}$	$2S_{3/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$	$2P_{5/2}$
Si	68.9 <sup>a</sup> (Al)	31.6	8.6	4.2	11.2	7.6
Ge	10.8 <sup>b</sup> (Ga)	9.8	2.9	0.6	4.2	2.5
AlSb	33 <sup>c</sup> (?)	42.4	12.4	3.3	17.5	10.5
GaP	64.0 <sup>d</sup> (Zn)	47.5	13.7	4.2	19.1	11.7
GaAs	31.0 <sup>e</sup> (Zn)	25.6	7.6	1.6	11.1	6.5
GaSb	13 $\approx$ 15 <sup>f</sup> (Si?)	12.5	3.8	0.65	5.6	3.2
InP	56.3 <sup>g</sup> (Cd)	35.2	10.5	2.0	15.5	8.9
InAs		16.6	5.1	0.4	7.9	4.4
InSb	$\sim 10$ <sup>h</sup> (Cd)	8.6	2.7	0.2	4.2	2.3
ZnS		175.6	52.0	11.7	75.1	44.1
ZnSe	114 <sup>i</sup> (Li)	110.1	33.0	6.1	48.6	28.0
ZnTe		77.7	23.0	5.1	33.4	19.6
CdTe		87.4	26.5	3.7	39.9	22.6

<sup>a</sup>A. Onton, P. Fisher, and A. K. Ramdas, Phys. Rev. **163**, 686 (1967).

<sup>b</sup>R. L. Jones and P. Fisher, J. Phys. Chem. Solids **26**, 1125 (1965).

<sup>c</sup>R. J. Stirn and W. M. Becker, Phys. Rev. **148**, 907 (1966); B. T. Ahlborn and A. K. Ramdas, Phys. Rev. **187**, 932 (1969).

<sup>d</sup>P. J. Dean, R. A. Faulkner, S. Kimura, and M. Ilegems, Phys. Rev. B **4**, 1926 (1971).

<sup>e</sup>W. Schairer and T. O. Yeh, Solid State Commun. **9**, 421 (1971).

<sup>f</sup>I. I. Burdiyan, S. B. Mal'tsev, I. F. Mironov, and Yu. G. Schreter, Fiz. Tekh. Poluprovodn. **5**, 1996 (1971) [Sov. Phys. Semicond. **5**, 1734 (1972)].

<sup>g</sup>A. M. White, P. J. Dean, K. M. Fairhurst, W. Bardsley, E. W. Williams, and B. Day (unpublished).

<sup>h</sup>R. Kaplan (private communication).

<sup>i</sup>J. L. Merz, K. Nassau, and J. W. Shiever (unpublished).

for  $\bar{\Delta} = 0$  and for  $\bar{\Delta} = \infty$ . For the state  $1S_{3/2}$  and  $2S_{3/2}$  such interpolation can be conveniently done with the functions  $S_1(\bar{\Delta})$  and  $S_2(\bar{\Delta})$ , respectively, which we have defined in our investigation of the exciton energy spectrum.<sup>15</sup> The functions  $S_1(\bar{\Delta})$  and  $S_2(\bar{\Delta})$  are the exact interpolating functions for the case in which the terms in  $\mu$ ,  $\delta$ , and  $\bar{\Delta}$  can be handled in perturbation theory, and therefore we expect them to be a reasonable approximation even in our case. The effect of finite  $\bar{\Delta}$  is particularly significant in the case of Si. In this case the interpolation to finite  $\bar{\Delta}$  for the state  $1S_{3/2}$  is shown in Fig. 7. We see that even in the case of Si this effect is relatively small, and therefore we believe that the approximate interpolation scheme here proposed is accurate enough for most practical purposes.

Having studied the energy spectrum of Hamiltonian (12) for all positive values of  $\mu \leq 1$ , we are now in a better position to discuss analogies and

differences between the acceptor problem and the direct exciton problem. We have already seen that the two systems are described by the same Hamiltonian, the only difference being in the strength of the "spin-orbit" terms which for the exciton case are scaled by a factor  $\alpha \approx 0.3$ . This means that the strength of the "spin-orbit" terms is  $\mu \approx 0.7$  for acceptors and  $\mu' = \alpha\mu \approx 0.2$  for excitons. These two values of  $\mu$  correspond to completely different regions as is shown in Fig. 8. In the exciton regime (small  $\mu$ ) the spin-orbit terms can be treated using perturbation theory and the energy spectrum deviates only slightly from that of the hydrogen atom. In the acceptor regime ( $\mu$  close to 1) the spin-orbit terms produce such an extreme localization of the acceptor wave functions that the energy spectrum has no resemblance at all with that of the hydrogen atom. This effect is due to the fact that one of the valence bands becomes flat in the limit  $\mu \rightarrow 1$ .

## V. CONCLUSIONS

We have studied the problem of shallow acceptor states in semiconductors using a spherical model in which the generally small cubic terms that appear in the acceptor Hamiltonian are completely neglected. The model gives a reasonably good approximation to the acceptor energy spectra in most semiconductors and reduces the formidable acceptor Hamiltonian to simple radial differential equations which have been solved with the variational technique. Though the model, as it is, is

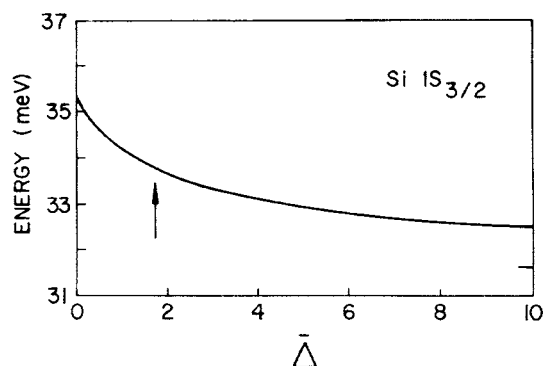


FIG. 7. Variation of the ground-state ionization energy in Si with the valence-band spin-orbit splitting  $\Delta$  (in units of the effective Rydberg  $R_0$ ). The ionization energy for intermediate values of  $\Delta$  has been obtained by interpolating between the limits of strong and weak spin-orbit coupling with the function appropriate for the ground state of the exciton. The arrow corresponds to the actual value of  $\Delta$  in Si and gives an ionization energy of 33.7 meV. The horizontal mark on the right side corresponds to the ionization energy for  $\bar{\Delta} = \infty$ , which is 31.6 meV.

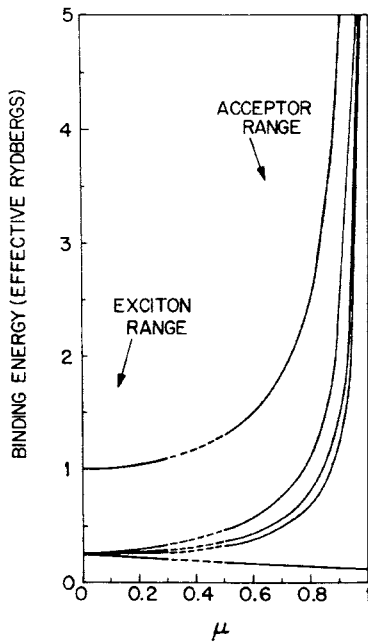


FIG. 8. Exciton problem and acceptor problem are described by the same formal Hamiltonian but have completely different energy spectra. The figure shows the appropriate range of  $\mu$  values for excitons and acceptors. While for excitons the effect of  $\mu$  can be treated by perturbation theory and the energy spectrum is nearly hydrogenic, the situation is completely different for acceptors.

generally satisfactory, various improvements can be made to it. First of all, the cubic terms which are responsible for energy shifts and splittings in the energy spectrum can be included.<sup>13</sup> This improvement is presently under investigation and will be the subject of a future publication.<sup>16</sup> Acceptor energy spectra accurate to  $10^{-3}$  eV will also require a more accurate treatment of the effects of the finite value of the spin-orbit splitting than the approximate interpolation technique proposed in the present paper. Finally, in the case of zinc-blende crystals, one should also consider the corrections to the binding energy produced by the terms which are linear in the hole momentum. The effects of these terms, which we have neglected, can be studied in the framework of the spherical model.

The problem of acceptor states also requires a detailed study of the acceptor potential. In the present paper we have studied the problem using a screened Coulomb potential and we have neglected short-range potentials which are due to the impurity core and which are responsible for the chemical shifts of the acceptor energy levels. A step forward in the understanding of the short-range com-

ponent of the impurity potentials has recently been taken by Baldereschi and Hopfield<sup>19</sup> in connection with the problem of isoelectronic traps, but much work has still to be done in this direction.

Furthermore we wish to mention that the spherical model is an excellent starting point for the study of the effects on the acceptor spectrum due to external perturbations such as magnetic fields and strain fields. Since external perturbations are a powerful tool for the experimental investigation of acceptor states only when a detailed theoretical treatment of their effects is available, work must be done also in this direction and the spherical model will be of valuable help.

#### APPENDIX

In this Appendix we briefly review the results of angular momentum theory which have been used in the present study of the acceptor Hamiltonian. These results will be given without proof, which can be found, for example, in the book by Edmonds.<sup>18</sup>

A given Cartesian tensor of second rank  $T_{ik}$ , where  $i, k = 1, 2, 3$  means  $x, y$ , and  $z$ , respectively, can always be reduced to irreducible spherical tensors of rank 0, 1, and 2 as follows:

$$T_0^{(0)} = T_{11} + T_{22} + T_{33} \quad (\text{rank } 0), \quad (\text{A1})$$

$$\left. \begin{aligned} T_0^{(1)} &= T_{12} - T_{21} \\ T_{\pm 1}^{(1)} &= \mp (1/\sqrt{2}) [T_{23} - T_{32} \pm i(T_{31} - T_{13})] \end{aligned} \right\} (\text{rank } 1), \quad (\text{A2})$$

and

$$\left. \begin{aligned} T_0^{(2)} &= \sqrt{\frac{7}{2}} T_{33} \\ T_{\pm 1}^{(2)} &= \mp (T_{13} \pm i T_{23}) \\ T_{\pm 2}^{(2)} &= \frac{1}{2} (T_{11} - T_{22} \pm 2i T_{12}) \end{aligned} \right\} (\text{rank } 2), \quad (\text{A3})$$

where the quantization axis has been assumed to be the  $z$  axis or 3 axis. From the above definitions, it is evident that our tensors  $P_{ik}$ ,  $J_{ik}$ , and  $I_{ik}$ , which are symmetric tensors with vanishing trace, can be decomposed only into irreducible spherical tensors of rank 2 according to formulas (A3).

Two spherical tensors of rank  $k_1$  and  $k_2$  can be coupled to form other spherical tensors whose rank  $k$  is limited by the condition  $|k_1 - k_2| \leq k \leq (k_1 + k_2)$ . The resulting spherical tensors are defined as

$$\begin{aligned} [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_q^{(k)} &= (-1)^{k_1 - k_2 + q} (2k + 1)^{1/2} \\ &\times \sum_{q_1, q_2} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} T_{q_1}^{(k_1)} U_{q_2}^{(k_2)}. \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

The values of the 3- $j$  symbol  $\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix}$  have been tabulated by Rotenberg *et al.*<sup>20</sup> for the lowest values of the parameters. A special case of the product (A4) is obtained when  $k_1 = k_2$  and  $k = 0$ . This special

case is the scalar product between tensors and is defined as

$$(T^{(k)} \cdot U^{(k)}) = \sum_q (-1)^q T_q^{(k)} U_{-q}^{(k)}. \quad (\text{A5})$$

Products of tensor operators have been used in the present paper to write the acceptor Hamiltonians in more convenient form. In this respect, the following reduction formulas will be useful:

$$\begin{aligned} (p_x^2 J_x^2 + p_y^2 J_y^2 + p_z^2 J_z^2) &= \frac{1}{3} p^2 J^2 + \frac{2}{45} (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) \\ &+ \frac{1}{18} \{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_{-4}^{(4)} \\ &+ \frac{1}{5} \sqrt{70} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^{(4)} + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} \} \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

and

$$\begin{aligned} \{p_x p_y\} \{J_x J_y\} + \{p_y p_z\} \{J_y J_z\} + \{p_z p_x\} \{J_z J_x\} \\ = \frac{1}{30} (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) - \frac{1}{36} \{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_{-4}^{(4)} \\ + \frac{1}{5} \sqrt{70} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^{(4)} + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} \}, \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

where  $\{ab\} = (ab + ba)/2$ . Expressions (A6) and (A7) remain valid if the spin operator  $J$  is replaced by  $I$ .

Finally the matrix elements of the scalar product  $(P^{(2)} \cdot J^{(2)})$  between eigenstates of the total angular momentum  $\vec{F} = \vec{L} + \vec{J}$  are easily evaluated using the "reduced-matrix-element" technique, expression

(25), which expresses the matrix element  $\langle L', J, F, M | (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) | L, J, F, M \rangle$  in terms of a 6- $j$  symbol and of the reduced matrix elements  $\langle J || J^{(2)} || J \rangle$  and  $\langle L' || P^{(2)} || L \rangle$ . The values of the 6- $j$  symbols can be found in the book by Rotenberg *et al.*<sup>20</sup> The reduced matrix elements are given by

$$\begin{aligned} (L-2 || P^{(2)} || L) &= -3\hbar^2 \left( \frac{L(L-1)}{2L-1} \right)^{1/2} \\ &\times \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2L+1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{L^2-1}{r^2} \right), \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

$$\begin{aligned} (L || P^{(2)} || L) &= \sqrt{3} \hbar^2 \left( \frac{L(2L+1)(2L+2)}{(2L-1)(2L+3)} \right)^{1/2} \\ &\times \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right), \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

$$\begin{aligned} (L+2 || P^{(2)} || L) &= -\frac{3}{2} \hbar^2 \left( \frac{(2L+2)(2L+4)}{2L+3} \right)^{1/2} \\ &\times \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{2L+1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{L(L+2)}{r^2} \right), \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

$$(L' || P^{(2)} || L) = 0 \quad \text{if } |L' - L| \neq 0, 2, \quad (\text{A11})$$

$$\begin{aligned} (J || J^{(2)} || J) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}} \\ &\times [(2J-1)(2J)(2J+1)(2J+2)(2J+3)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{A12})$$

\*Present address: Ecole Polytechnique Federale, Laboratoire de Physique Applique, Lausanne, Switzerland.

<sup>1</sup>W. Kohn, *Solid State Physics*, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic, New York, 1957), Vol. 5, p. 257.

<sup>2</sup>C. Kittel and A. H. Mitchell, *Phys. Rev.* **96**, 1488 (1954).

<sup>3</sup>J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).

<sup>4</sup>For a recent review on impurity states see J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors* (Academic, New York, 1973), Chap. 9.

<sup>5</sup>See, for example, M. L. Cohen and T. K. Bergstresser, *Phys. Rev.* **141**, 789 (1966).

<sup>6</sup>W. Kohn and J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **98**, 915 (1955).

<sup>7</sup>R. A. Faulkner, *Phys. Rev.* **184**, 713 (1969).

<sup>8</sup>W. Kohn and D. Schecter, *Phys. Rev.* **99**, 1903 (1955); D. Schecter, *J. Phys. Chem. Solids* **23**, 237 (1962).

<sup>9</sup>K. S. Mendelson and H. M. James, *J. Phys. Chem. Solids* **25**, 729 (1964).

<sup>10</sup>K. Suzuki, M. Okazaki, and H. Hasegawa, *J. Phys.*

*Soc. Japan* **19**, 930 (1964).

<sup>11</sup>K. S. Mendelson and D. R. Schultz, *Phys. Status Solidi* **31**, 59 (1969).

<sup>12</sup>V. I. Sheka and D. I. Sheka, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **51**, 1445 (1966) [*Sov. Phys.-JETP* **24**, 975 (1967)].

<sup>13</sup>N. O. Lipari and A. Baldereschi, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1660 (1970); N. O. Lipari and A. Baldereschi, in *Proceedings of the Eleventh International Conference on the Physics of Semiconductors*, Warsaw, 1972 (Polish Scientific, Warsaw, 1972).

<sup>14</sup>J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).

<sup>15</sup>A. Baldereschi and N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **3**, 439 (1971).

<sup>16</sup>A. Baldereschi and N. O. Lipari (unpublished).

<sup>17</sup>J. Dresselhaus, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 14 (1956).

<sup>18</sup>A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton U. P., Princeton, N. J., 1960).

<sup>19</sup>A. Baldereschi and J. J. Hopfield, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 171 (1972).

<sup>20</sup>M. Rotenberg, R. Bivins, N. Metropolis, and J. K. Wooten, *The 3-j and 6-j Symbols* (Technology Press, Cambridge, Mass., 1959).



# Prediction of Electronic Interlayer States in Graphite and Reinterpretation of Alkali Bands in Graphite Intercalation Compounds

M. Posternak and A. Baldereschi <sup>(a)</sup>

*Institut de Physique Appliquée, Ecole Polytechnique Fédérale, CH-1015 Lausanne, Switzerland*

and

A. J. Freeman, E. Wimmer, <sup>(b)</sup> and M. Weinert

*Department of Physics, Northwestern University, Evanston, Illinois 60201*

(Received 20 July 1982)

The existence of a new kind of electron state in graphite and in alkali graphite intercalation compounds is predicted with use of self-consistent local-density all-electron theory. These interlayer states, which exhibit free-electron character parallel to the layers, form a band close to the Fermi energy and provide for alkali graphite intercalation compounds a new understanding of the origin of bands previously interpreted incorrectly as arising from alkali  $s$  electrons.

PACS numbers: 71.25.Pi, 73.60.Dt

Experimental and theoretical studies of pure graphite and alkali-metal graphite intercalation compounds (AGIC) have provided the following commonly accepted description of their valence energy-band structures.<sup>1</sup> (i) In graphite the sequence of bands with increasing energy is  $\sigma$  and  $\pi$  bonding,  $\pi$  and  $\sigma$  antibonding, with the Fermi energy,  $E_F$ , in the middle of the  $\pi$  bands. (ii) In AGIC's, an additional strongly dispersed band is present close to  $E_F$ . It is called the "alkali band" since it is thought to arise from alkali  $s$  electrons. In  $\text{LiC}_6$  its bottom is  $\sim 1.7$  eV above  $E_F$  while in  $\text{KC}_8$  its location relative to  $E_F$  has not yet been established.<sup>1</sup> We show here that the generally accepted energy-band structure of graphite is incomplete above  $E_F$  and that the interpretation of the "alkali band" in AGIC's is incorrect. We find that the AGIC "additional" band is actually an interlayer free-electron band which preexists above  $E_F$  in pure graphite.

We have studied three model two-dimensional systems: (i) a Li layer sandwiched between two graphite layers ( $\text{C}_6\text{-Li-C}_6$  system) with the same crystallographic arrangement as in bulk  $\text{LiC}_6$ , (ii) the same system but without the alkali atoms ( $\text{C}_6\text{-C}_6$  system) for several interlayer distances, and (iii) a graphite monolayer ( $\text{C}_6$ ). Electronic energies and wave functions were obtained with the all-electron local-density full-potential self-consistent linearized augmented plane-wave (FLAPW) method for thin films.<sup>2</sup>

The  $\text{C}_6\text{-Li-C}_6$  system has  $D_{6h}$  symmetry and its unit cell contains twelve C atoms and one Li atom. Its band structure at the  $\Gamma$  point [Fig. 1(a)] is consistent with existing energy bands for  $\text{LiC}_6$ .<sup>3</sup> The levels below  $E_F$  correspond to the  $\sigma$  and  $\pi$

bonding states of graphite. Because of the presence of two  $\text{C}_6$  layers, these levels appear as pairs of states, one symmetric and one antisymmetric with respect to the Li plane. The energy separations are larger for  $\pi$  states than for  $\sigma$  states. Let us consider the  $\Gamma_1^+ - \Gamma_2^-$  pair of empty states found just below vacuum level.<sup>4</sup> Their charge densities are given in Figs. 2(a) and 2(b). The  $\Gamma_2^-$  state [Fig. 2(a)], which is located 3.2 eV above  $E_F$ , has 97% of its charge in the vacuum region. It corresponds to a surface state of

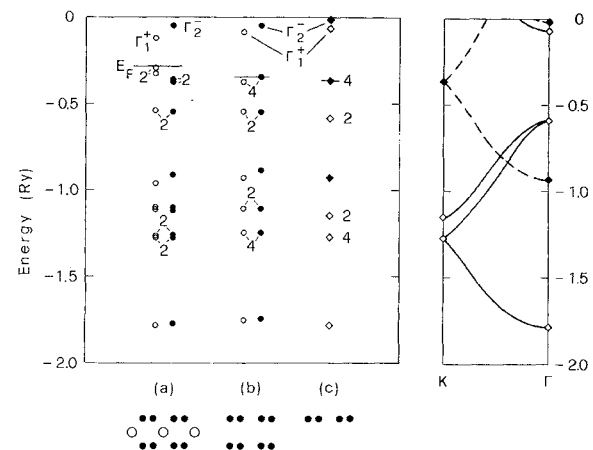


FIG. 1. Band eigenvalues at  $\Gamma$  for (a)  $\text{C}_6\text{-Li-C}_6$ , (b)  $\text{C}_6\text{-C}_6$ , and (c)  $\text{C}_6$  monolayer. Open (solid) symbols represent symmetric (antisymmetric) states with respect to  $z$ -reflection symmetry. Numbers give the degeneracy of the levels. The Fermi energies are indicated by horizontal lines. Crystallographic structures are schematically given at the bottom. The energy bands for a graphite monolayer along the  $\Gamma\text{-K}$  direction are given at the right side.

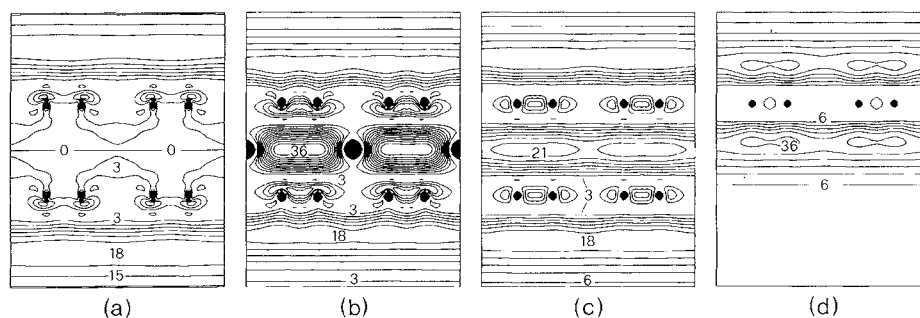


FIG. 2. Charge-density contour plots for the  $\Gamma_2^-$  state of (a)  $C_6$ -Li- $C_6$  and the  $\Gamma_1^+$  state of (b)  $C_6$ -Li- $C_6$ , (c)  $C_6$ - $C_6$ , and (d)  $C_6$ . Contours are given at multiples of  $3 \times 10^{-3}$  electron/ $\text{\AA}^3$  in (a), (b), and (c), and of  $6 \times 10^{-3}$  electron/ $\text{\AA}^3$  in (d).

a  $LiC_6$  crystal with finite thickness and has not been found in bulk calculations. The  $\Gamma_1^+$  state is located 2.2 eV above  $E_F$ , in agreement with the absolute energy of the bottom of the "Li band" of bulk  $LiC_6$ .<sup>5</sup> 38% of its charge is in between the two graphite layers [Fig. 2(b)].

The amount of interlayer charge of the  $\Gamma_1^+$  state is rather low for a state supposed to originate from Li 2s orbitals. Furthermore, this charge is strongly nonspherical around the Li atoms [the s-like charge is less than 1% within the Li augmented plane wave (APW) sphere with radius 1.36 a.u.]. We have therefore inspected the logarithmic derivative of the s radial solution within the Li APW sphere and found that the Li 2s orbital actually gives rise to a resonance at higher energy, above vacuum zero. This high-energy location of Li 2s states is not surprising if one considers that the average radius of the Li 2s orbital (3.9 a.u.) is about half the carbon interlayer distance (3.5 a.u.). Hence, the orthogonality repulsion with lower-lying  $\sigma$  and  $\pi$  graphitic states will raise considerably the energy of Li 2s states and will also reduce their localization. Preliminary FLAPW studies of a  $C_8$ -K- $C_8$  sandwich yielded similar results. The K orbitals give rise to a resonance just above vacuum zero,<sup>6</sup> while the  $\Gamma_1^+$  state is at lower energy, just below  $E_F$ . These results show that the nature of the  $\Gamma_1^+$  state close to  $E_F$  in  $C_8$ -Li- $C_8$  and  $C_8$ -K- $C_8$  is more complex than the generally accepted picture of a predominantly alkali valence state.

As a decisive test, we removed the Li atoms from  $C_6$ -Li- $C_6$ , keeping the carbon sites unchanged, and studied the resulting system consisting of two graphite layers with AA stacking. Its unit cell contains four C atoms, but in order to make the comparison with  $C_6$ -Li- $C_6$  easier, we

consider the three-times-larger unit cell corresponding to a  $C_6$ - $C_6$  double layer. The backfolded energies at  $\Gamma$  [Fig. 1(b)] are very similar to those of the  $C_6$ -Li- $C_6$  sandwich, apart from the fact that some splittings have disappeared because of the higher translational symmetry. The two bands above  $E_F$  are still there. Hence their existence is independent of the Li atoms. The  $\Gamma_1^+$  state now lies somewhat higher in energy than in  $C_6$ -Li- $C_6$ . Its charge density [Fig. 2(c)] shows that it is an interlayer state which is not localized to the carbon atoms but which exhibits free-electron character in the planes parallel to the layers.

A question arises concerning the bonding character of the state in the direction perpendicular to the layers. Is the electron confined between the two layers, or is it already bound to a single graphite layer? We have therefore computed the band structure of a graphite monolayer, keeping the in-plane lattice parameter unchanged. Again, for an easier comparison with  $C_6$ -Li- $C_6$ , we consider a  $C_6$  monolayer whose backfolded energies at  $\Gamma$  are displayed in Fig. 1(c). The bound state is seen to exist for a single graphite layer. Its charge density [Fig. 2(d)] shows again that it is not localized to the C atoms but is rather bound to the neutral graphite monolayer by its attractive short-range potential. Since the potential extends symmetrically from the layer, two states are actually bound to  $C_6$ , one symmetric and one antisymmetric. The  $\Gamma_1^+$  interlayer state found for  $C_6$ - $C_6$  is the bonding combination between the two  $\Gamma_1^+$  single-layer states. The  $\Gamma_2^-$  state of  $C_6$ - $C_6$  (which becomes a surface state when the slab thickness is increased) is simply the antibonding partner of the same  $\Gamma_1^+$  single-layer states. The antisymmetric state bound to the  $C_6$  monolayer

gives rise to resonances of the  $C_6-C_6$  system.

We have also carried out one-dimensional model calculations which show that the bonding and antibonding interlayer states found in  $C_6-C_6$  and  $C_6-Li-C_6$  depend on the strength of the planar averaged attractive electrostatic potential  $V$  [Fig. 3(a)] of the graphite layer, and on the distance  $d$  between carbon planes, but not on the crystallographic structure of the system. Both the electrostatic potential energy of an electron added to one graphite layer and orthogonality repulsions are described through effective potentials  $U^+$  and  $U^-$  for symmetric and antisymmetric states, respectively [Fig. 3(a)].  $U^+$  and  $U^-$  only depend on the electron distance to the layer and are adjusted to fit the  $\Gamma_1^+$  and  $\Gamma_2^-$  FLAPW energies and wave functions in  $C_6$ . These effective potentials are then used to study the higher bound states of a  $C_6-C_6$  system with arbitrary interlayer distance  $d$ . Interlayer polarization effects (i.e., self-consistent readjustment of the layer potentials at large distances) are taken into account by inhibiting superposition of the individual layer potentials. The resulting eigenvalues versus  $d$  are given in Fig. 3(b), together with FLAPW results for  $C_6-C_6$  computed for the  $d$  values found in pure graphite ( $d_1$ ),  $LiC_6$  ( $d_2$ ), and  $KC_8$  ( $d_3$ ). Agreement is satisfactory, apart from some discrepancies at  $d_3$  due to our approximation of the polarization effects. The percentage of interlayer charge for the lowest  $\Gamma_1^+$  state is very sensitive to the interlayer distance. It increases from 23 (17) in pure graphite to 35 (27) in  $LiC_6$

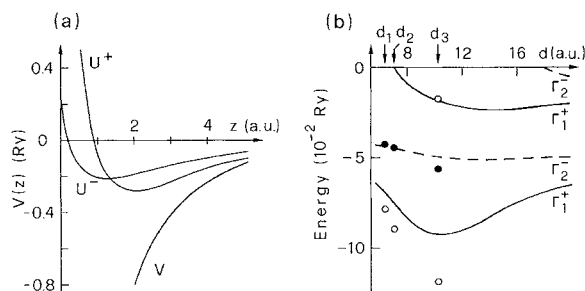


FIG. 3. (a) The planar averaged first-principles electrostatic potential  $V$  of a  $C_6$  monolayer, together with the effective potentials  $U^+$  (symmetric) and  $U^-$  (antisymmetric). (b) Interlayer states at  $\Gamma$  for  $C_6-C_6$ , as functions of the interlayer distance  $d$ . Full (dashed) lines and open (full) circles represent symmetric (antisymmetric) eigenvalues of the model and the FLAPW calculation, respectively. Note the greatly expanded energy scale relative to that of Fig. 1.

and 67 (63) in  $KC_8$  for the FLAPW (model) calculations.

The results of Fig. 3 indicate that interlayer states also exist at the  $d$  value of pure graphite regardless of the particular layer stacking. We therefore predict the existence in graphite of a previously unrecognized band in the range of energies of the  $\pi$  antibonding states. Apparently such an interlayer band could not be detected in previous linear combination of atomic orbitals (LCAO) band-structure calculations since they were based only on  $2s$  and  $2p$  carbon orbitals.<sup>7</sup> We find this band to be clearly present (but not interpreted) in the band structures obtained by pseudopotential<sup>8</sup> and cellular<sup>9</sup> methods. This band has apparently also escaped definite experimental detection. The main reason is that the relevant states are confined to the interlayer region and therefore have small overlap with various kinds of filled levels which are initial states for excitation processes (i.e.,  $1s$  C states for x-ray absorption and  $\sigma$  and  $\pi$  bonding states for uv reflectivity measurements). In addition, dipole selection rules forbid transitions to this interlayer band at several points of the Brillouin zone. However, its existence might be confirmed in experiments which involve transitions to the band from the diffuse conduction states at higher energy, e.g., bremsstrahlung isochromat spectroscopy measurements.<sup>10</sup>

The results presented here demonstrate that (i) a new kind of state is present in pure graphite just above  $E_F$ . It originates from interlayer bonding states which exhibit free-electron character in the planes parallel to the layers. (ii) The so-called "Li band" in  $LiC_6$  actually originates from interlayer bonding electron states orthogonalized to the Li  $1s$  core [see Fig. 2(b)]. The occurrence of this band is not correlated to the presence of the Li atoms. (iii) The Li  $2s$  valence orbitals give rise in  $LiC_6$  to electron states located at higher energy than those resulting from the interlayer bonding states in agreement with earlier LCAO results.<sup>7</sup> (iv) Conclusions similar to (ii) and (iii) also apply to K-intercalated graphite.

Finally, we lay stress on the fact that the existence of interlayer states is not restricted a priori to AGIC's. They might occur in other types of GIC's, as well as in other layered compounds, provided that the layers are sufficiently electro-negative.

We are grateful to H.-J. Güntherodt, Y. Baer, F. Bassani, and G. Harbeke for helpful discussions. This work was supported by the Swiss

National Science Foundation; the U. S. Office of Naval Research, under Grant No. N00014-81-K-0438; and the U. S. National Science Foundation, under Grant No. DMR77-23776.

<sup>(a)</sup>Also at Istituto di Fisica Teorica, Università di Trieste, I-34014 Trieste, Italy.

<sup>(b)</sup>Permanent address: Institut für Physikalische Chemie, University of Vienna, Währingerstrasse 42, A-1090 Vienna, Austria.

<sup>1</sup>P. Pfluger and H. J. Güntherodt, *Festkörperprobleme: Advances in Solid State Physics*, edited by J. Treusch (Vieweg, Braunschweig, 1981), Vol. 21, p. 271 and references therein.

<sup>2</sup>E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).

<sup>3</sup>N. A. W. Holzwarth, S. Rabii, and L. A. Girifalco, Phys. Rev. B **18**, 5190 (1978).

<sup>4</sup>The three systems studied in this work have  $D_{6h}$  symmetry. The irreducible representations of this group are labeled according to the notations of G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, and H. Statz, *Properties of the Thirty-Two Point Groups* (MIT Press, Cambridge, Mass., 1963).

<sup>5</sup>According to Ref. 3, the bottom of the Li band in  $\text{LiC}_6$  is  $\sim 1.7$  eV above  $E_F$ . Notice, however, that, assuming rigid bands, we calculate that  $E_F(\text{LiC}_6) = E_F(\text{C}_6 - \text{Li} - \text{C}_6) + 0.4$  eV since the concentration of Li atoms in  $\text{LiC}_6$  is twice that in  $\text{C}_6 - \text{Li} - \text{C}_6$ .

<sup>6</sup>Observation of K 4s states in  $\text{KC}_6$  at about this energy has been reported by J. J. Ritsko and C. F. Brucker, Bull. Am. Phys. Soc. **27**, 405 (1982).

<sup>7</sup>L. Samuelson and I. P. Batra, J. Phys. C **13**, 5105 (1980), and reference therein.

<sup>8</sup>W. van Haeringen and H. G. Junginger, Solid State Commun. **7**, 1723 (1969).

<sup>9</sup>C. P. Mallet, J. Phys. C **14**, L213 (1981).

<sup>10</sup>Y. Baer, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **24**, 95 (1981).

## Self-consistent Hartree-Fock and screened-exchange calculations in solids: Application to silicon

F. Gygi

*Institut de Physique Appliquée, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland*

A. Baldereschi

*Institut de Physique Appliquée, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland  
and Istituto di Fisica Teorica, University of Trieste, Trieste, Italy*

(Received 3 December 1985; revised manuscript received 7 July 1986)

A simple procedure to perform Hartree-Fock calculations in solids using extended basis functions is proposed. The method also applies when correlation is added with the self-consistent Coulomb-hole-plus-screened-exchange (COHSEX) scheme. Application to silicon in the pseudopotential approach yields excitation energies which agree with recent results by Hybertsen and Louie. We find that the simple diagonal COHSEX approximation does not provide satisfactory indirect excitation energies in silicon but is quite accurate for the direct ones.

The local-density approximation (LDA) to density-functional theory<sup>1</sup> has proved to be a powerful tool for accurate studies of ground-state properties of solids. Excitation energies, however, cannot be investigated on the same footing since, besides the errors due to the use of LDA, the eigenvalues of the Kohn-Sham density-functional equations cannot be interpreted as quasiparticle energies. For semiconductors, for example, the LDA energy gaps are substantially smaller than experimental data. Several extensions of LDA, such as nonlocal-density approximations,<sup>2</sup> or energy-dependent functionals<sup>3</sup> have been proposed for the excitation energies. The best results, however, have been obtained from calculations<sup>4,5</sup> based on many-body perturbation theory which include exchange and correlation with the *GW* approximation of Hedin.<sup>6</sup> The full dynamical character of the many-body interaction is included, and the results compare well with experiment for diamond, Si, and LiCl. These calculations are extremely time consuming and therefore have been limited to a few materials only. An analytical self-energy model has recently been proposed in an attempt to simplify the computations.<sup>7</sup>

In this work, we present a procedure which allows one to calculate *GW* quasiparticle energies with a reduced numerical effort using a plane-wave basis set. The method is particularly simple in the limiting case of the Hartree-Fock approximation where the self-energy reduces to the exchange operator. The soundness of the technique is demonstrated by calculating the quasiparticle energies of silicon with two different approximations: the Hartree-Fock and the diagonal Coulomb-hole-plus-screened-exchange (COHSEX) schemes.

For convenience, we describe the technique for the Hartree-Fock self-energy operator  $\Sigma_{\text{HF}}$ . In this case, the self-consistent band-structure calculation involves exchange matrix elements of the type

$$\langle f | \Sigma_{\text{HF}} | g \rangle = -e^2 \sum_{m,q} \int \frac{f^*(\mathbf{r}) \phi_{mq}^*(\mathbf{r}') \phi_{mq}(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}', \quad (1)$$

where the sum is over all occupied Bloch orbitals  $\phi_{mq}$  and  $f$  and  $g$  are basis functions. Using the decomposition of  $\phi_{mq}$  in plane waves,

$$\phi_{mq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} c_{mq}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}, \quad (2)$$

and plane waves as basis functions, the exchange matrix element becomes

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \Sigma_{\text{HF}} | \mathbf{k} + \mathbf{G}' \rangle \\ = -\frac{4\pi e^2}{\Omega} \sum_{m,q} \sum_{\mathbf{G}''} \frac{c_{mq}^*(\mathbf{G}' + \mathbf{G}'') c_{mq}(\mathbf{G} + \mathbf{G}'')}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{G}''|^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Evaluation of expression (3) is the time-consuming step in the Hartree-Fock computation. The expression contains a sum over occupied states and requires the knowledge of Bloch functions everywhere in the Brillouin zone. Direct summation by the special-point technique does not apply since the summand has an integrable divergence for  $\mathbf{k} - \mathbf{q} = \mathbf{G}_0$  (a reciprocal-lattice vector) of the form

$$\frac{c_{m\mathbf{k}-\mathbf{G}_0}^*(\mathbf{G}' + \mathbf{G}_0) c_{m\mathbf{k}-\mathbf{G}_0}(\mathbf{G} + \mathbf{G}_0)}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{G}_0|^2} = \frac{c_{m\mathbf{k}}^*(\mathbf{G}') c_{m\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{G}_0|^2}, \quad (4)$$

where the equality comes from the fact that Bloch functions at equivalent wave vectors represent the same state.

The difficulty can be removed by adding and subtracting to the right-hand side (rhs) of (3) a reference term which has the same singularities as the exact expression, i.e., by writing the matrix element as



$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \Sigma_{\text{HF}} | \mathbf{k} + \mathbf{G}' \rangle = -\frac{4\pi e^2}{\Omega} \left[ \sum_{m, \mathbf{q}} \left[ \sum_{\mathbf{G}''} \frac{c_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{G}' + \mathbf{G}'') c_{m\mathbf{q}}(\mathbf{G} + \mathbf{G}'')}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{G}''|^2} - c_{m\mathbf{k}}^*(\mathbf{G}') c_{m\mathbf{k}}(\mathbf{G}) F(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \right] + \sum_m c_{m\mathbf{k}}^*(\mathbf{G}') c_{m\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \sum_{\mathbf{q}} F(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \right], \quad (5)$$

where  $F(\mathbf{p})$  is an auxiliary periodic function that diverges like  $1/p^2$  as  $p$  vanishes. The term in large parentheses on the rhs is regular and can be evaluated by the special-point technique, whereas the integral which appears in the last term of the rhs is independent of  $\mathbf{k}$  [since  $F(\mathbf{p})$  is a periodic function] and can be easily evaluated once a convenient auxiliary function  $F(\mathbf{p})$  has been specified. The choice of  $F(\mathbf{p})$  is not critical except for the fact that, away from its divergences, it must be smooth enough for the application of the special-point technique.

Since the matrix elements of the kinetic energy, of the bare potential, and of the Hartree potential are easily calculated in a plane-wave basis set, this technique allows one to compute easily the matrix elements of the Fock operator everywhere in the Brillouin zone and, by iteration, to obtain Hartree-Fock energy bands. The technique, described here for  $\Sigma_{\text{HF}}$ , can also be applied if one uses more elaborate approximations than Hartree-Fock. An application of this kind will be described later in this paper.

$$F(\mathbf{p}) = \frac{(a/2)^2}{3 - \cos(ap_x/2) \cos(ap_y/2) - \cos(ap_y/2) \cos(ap_z/2) - \cos(ap_x/2) \cos(ap_z/2)}, \quad (6)$$

which reflects the fcc periodicity of the lattice. Its mean value in the Brillouin zone (BZ) is

$$\begin{aligned} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3p F(\mathbf{p}) &= \left( \frac{a}{2\pi} \right)^2 \sqrt{3} K^2 \left[ \sin \left( \frac{\pi}{12} \right) \right] \\ &= \left( \frac{a}{2\pi} \right)^2 4.423758, \end{aligned} \quad (7)$$

where  $K(x)$  is the complete elliptic integral of the first kind. The smooth part of the exchange matrix elements, i.e., the term in large parentheses on the rhs of (5), was calculated with the single mean-value point technique. The Hartree-Fock energies of the most important states are given in Table II. Convergence tests with two mean-value points show that the accuracy of these values is

TABLE I. Hartree-Fock pseudopotential of the  $\text{Si}^{4+}$  ion. The notation of the parameters is the same as in Ref. 8. We have used  $a(\text{core}) = 2.00$ ,  $a(\text{core}) = 1.00$ , and  $a(5) = a(6) = 0$  for all angular momenta. All values are in atomic units.

	$l=0$	$l=1$	$l=2$
$a(1)$	1.00000	1.37500	3.70000
$a(2)$	3.47535	2.50100	3.73000
$a(1)$	1.30077518	3.20829776	337682.25781250
$a(2)$	12.26687221	4.41675764	-337686.17187500
$a(3)$	-0.42976021	-0.71499994	-4789.81884766
$a(4)$	30.99871189	3.18848371	-5367.83227539

We have applied the technique to the calculation of the Hartree-Fock and screened-exchange energy bands of silicon, since the excitation energies of this material have recently been discussed in detail within various approximations.<sup>4,5</sup> We use a nonlocal norm-conserving pseudopotential that we have constructed following the procedure of Bachelet, Hamann, and Schlüter.<sup>8</sup> For consistency in the treatment of many-body interactions, the potential was derived from the Hartree-Fock valence energies and orbitals of a  $\text{Si}^{3+}$  ion. The resulting pseudopotential (see Table I) gives LDA energy bands which are similar to those obtained with the pseudopotential of Ref. 8, even though the latter has been derived from the neutral Si atom using the local-density approximation.

The Hartree-Fock calculation was performed including plane waves with energy up to 19.5 Ry. The exchange matrix elements were calculated for a limited part of the Fock matrix corresponding to an energy cutoff of 15 Ry, using the auxiliary function

better than 0.2 eV. We find, for example, that, upon going from one to two mean-value points, the  $E_0$  and  $E'_0$  energy gaps change by +0.07 and -0.06 eV, respectively. Hartree-Fock energy bands of silicon have been previously calculated by Dovesi, Causa, and Angonoa<sup>9</sup> and Ohkoshi.<sup>10</sup>

TABLE II. Principal band energies in Si obtained with different approximations and compared with experimental values. The d-COHSEX values from Hybertsen and Louie have been estimated from Fig. 1 of Ref. 5. Energies are given in eV and measured with respect to the valence-band maximum.

	HF	d-COHSEX		Expt.	LDA
		d-COHSEX	(perturbation)		
$\Gamma_{15c}$	9.27 <sup>a</sup>	3.24	3.20	3.4 <sup>b</sup>	2.55
$\Gamma'_{2'c}$	11.04 <sup>c</sup>	4.41	4.43	4.2 <sup>b</sup>	3.40
$X_{1c}$	6.87	0.83	0.75	1.3 <sup>d</sup>	0.61
$L_{1c}$	8.13	2.14	2.08	2.1 <sup>c</sup> 2.4 <sup>f</sup>	1.54
$L_{3c}$	10.16	3.97	3.93	4.1 <sup>f</sup>	3.33
$E_g$	6.43 <sup>g</sup>	0.68 <sup>h</sup>	0.60	1.17 <sup>b</sup>	0.48
$L_{1c} - L_{3'c}$	9.61	3.48 <sup>i</sup>	3.46	3.5 <sup>b</sup> 3.9 <sup>f</sup>	2.74
$X_{1c} - X_{4c}$	10.71	4.19	4.20	4.2 <sup>d</sup> 4.5 <sup>b</sup>	3.51

<sup>a</sup>8.15 in Ref. 10.

<sup>b</sup>Reference 13.

<sup>c</sup>9.40 in Ref. 9.

<sup>d</sup>Reference 2.

<sup>e</sup>Reference 15.

<sup>f</sup>Reference 14.

<sup>g</sup>5.8 in Ref. 10.

<sup>h</sup>0.52 in Ref. 5.

<sup>i</sup>3.28 in Ref. 5.

Our Hartree-Fock band structure differs appreciably from that by Dovesi *et al.*, and this is probably due to an inadequate convergence of the latter calculation as discussed by the authors themselves. Better agreement exists with the results by Ohkoshi. His valence-band structure agrees with ours within 0.2 eV which is a remarkable result if one considers that the two calculations use different cutoff energies and different pseudopotentials. However, important differences (about 1 eV and therefore well outside our numerical uncertainty) exist for the valence-to-conduction excitation energies, our values being systematically larger. We attribute these differences to a numerical inaccuracy in the Brillouin-zone integration of the exchange divergence in the work by Ohkoshi. With the use of 10 mean-value points, Ohkoshi evaluates accurately the regular part of the exchange matrix elements given in the term in large parentheses in (5), but not the singular part. We have, in fact, integrated over the Brillouin zone the auxiliary function given in (6) using Ohkoshi's smoothing technique and 10 mean-value points, and found only 92% of the exact result given in (7). This result is consistent with Ohkoshi's underestimate of the excitation energies by about 1 eV, since the contribution to the energy gaps from the singular term in (5) amounts to about 15 eV.

We also report in Table II experimental energy-band levels. As usual, Hartree-Fock gaps are larger than experimental values by a factor of 2 or more. However, Hartree-Fock calculations are the reference for a proper evaluation of correlation effects. In this work we include correlation through a simplified version of the *GW* approximation. We use the diagonal COHSEX (d-COHSEX) approximation, which was already used by Brinkman and Goodman<sup>11</sup> in their pioneering work on the effects of correlation on the energy bands of valence semiconductors. It consists of considering only static diagonal screening [i.e.,  $\epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \sim \epsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q})\delta(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ ] in Hedin's formulation. We use the dielectric function

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \frac{q^2 + \alpha^2}{q^2 + \alpha^2/\epsilon_0}, \quad (8)$$

with  $\epsilon_0 = 11.4$  and  $\alpha = 0.93$  a.u., which reproduces the results of RPA calculations.<sup>12</sup> The d-COHSEX approximation neglects local-field and dynamic screening effects which contribute appreciably to the energy gaps in Si.<sup>5</sup> Our goal here is to present a second application of our procedure and to stress that its use is not limited to Hartree-Fock computations. In the d-COHSEX scheme, the Coulomb potential appearing in expression (3) is replaced by a screened potential, and, accordingly, the auxiliary function  $F(\mathbf{p})$  must be scaled by  $\epsilon_0$ .

The results of the d-COHSEX calculation are given in Table II and have an accuracy better than 0.1 eV. All Hartree-Fock gaps are reduced by dielectric screening, but the results show that even this approximation is too crude to describe properly the self-energy of silicon. For example, the lowest indirect gap is now considerably underestimated. However, the lowest direct excitation energies, and, in particular, those at *L* and *X* are in satisfactory agreement with experimental data. The agreement with the diagonal COHSEX results of Ref. 5 is good, considering the fact that different dielectric functions and different

TABLE III. Fourier coefficients of the valence charge density in silicon obtained with the various approximations discussed in the text and using the single mean-value point technique. All values are given in electrons per unit cell.

G	Hartree	LDA	d-COHSEX	HF
(1,1,1)	-1.42	-1.67	-1.59	-1.77
(2,2,0)	0.14	0.13	0.14	0.16
(3,1,1)	0.30	0.36	0.35	0.42
(2,2,2)	0.20	0.31	0.29	0.43
(4,0,0)	0.34	0.40	0.38	0.43

pseudopotentials are used in the two calculations.

In order to compare the d-COHSEX and the local-density approximations, a test LDA calculation was performed using our Hartree-Fock (HF) potential and Wigner's interpolation formula for exchange and correlation. The resulting LDA energy gaps, given in Table II, systematically underestimate the experimental data. The d-COHSEX results are generally in better agreement with experiment than the LDA results even if the two schemes underestimate the fundamental indirect gap by comparable amounts.

To conclude, we compare the wave functions obtained with the various approximations discussed above. For valence states, we give in Table III the Fourier coefficients of the valence charge density obtained in the Hartree, Hartree-Fock, d-COHSEX, and LDA approximations. The d-COHSEX charge density is similar to the LDA result, whereas the Hartree and Hartree-Fock densities are quite different from the others. As expected, the Hartree charge density is more diffuse in the unit cell than the LDA one, while the Hartree-Fock charge density is more concentrated at the bond sites. Analysis of wave functions at several points of the Brillouin zone leads to the same conclusion, i.e., the d-COHSEX and LDA approximations provide similar valence wave functions. As an example, we give in Table IV the overlap integrals between corresponding states at the *L* point obtained with the three approximations. The data reported in the table show that the

TABLE IV. Overlap integrals between corresponding states at the *L* point obtained with the Hartree-Fock, d-COHSEX, and LDA approximations. The table gives the deviation of the overlaps from unity in units of  $10^{-5}$ .

	HF vs LDA	LDA vs d-COHSEX	HF vs d-COHSEX
$L_{2'v}$	20	6	8
$L_{1v}$	72	10	49
$L_{3'v}$	50	11	23
$L_{1c}$	75	81	16
$L_{3c}$	69	66	1
$L_{2'c}$	240	414	5

similarity between LDA and d-COHSEX functions does not hold for conduction states, where the d-COHSEX functions are closer to the Hartree-Fock functions than to the LDA ones. These results are important since they show that self-consistent COHSEX (or d-COHSEX) calculations can be avoided if one performs an LDA calculation, approximates  $\Sigma_{\text{COHSEX}}$  in terms of LDA functions, and then adds the effects of  $(\Sigma_{\text{COHSEX}} - \Sigma_{\text{LDA}})$  in perturbation theory. Results obtained with this perturbation scheme are given in the third column of Table II and show that the deviations in band-gap energies between the fully self-consistent and the perturbation treatment are less than 0.1 eV. Perturbation schemes of this kind have been used in the past by several authors,<sup>4,5,11</sup> and their validity is confirmed by our results. It is worth mentioning, however, that this approach is not applicable to Hartree-Fock calculations since (i) the difference operator  $(\Sigma_{\text{HF}} - \Sigma_{\text{LDA}})$  is not a small perturbation, and (ii)  $\Sigma_{\text{HF}}$  cannot be constructed in terms of LDA functions.

Hartree-Fock and improved Hartree-Fock calculations are common for atoms and molecules, but not for solids, since they are extremely time consuming for infinite periodic systems. They have been performed for a few ma-

terials only and, given the numerical complexity, different authors have found, for a given material, quite different results. Moreover, these computations have usually been carried out using localized basis functions, whereas the most convenient functions in solid-state calculations are plane waves or modified plane waves. In this paper we have proposed a procedure that allows one to perform easily Hartree-Fock and improved Hartree-Fock calculations in solids using a plane-wave basis set. With this technique, fully converged Hartree-Fock and COHSEX calculations become feasible with a numerical effort comparable to that of a LDA calculation. These computations can therefore become a common practice in solid-state theory and can be the first step towards the accurate prediction of excitation energies as recent investigations<sup>5</sup> have demonstrated.

We thank Dr. W. Andreoni, Dr. K. Maschke, and Professor R. Resta for useful comments on the manuscript. This work was supported by the Swiss National Science Foundation, the Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande, and by the Gruppo Nazionale di Struttura della Materia del Consiglio Nazionale delle Ricerche.

- 
- <sup>1</sup>P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964); W. Kohn and L. J. Sham, *ibid.* **140**, A1133 (1965).  
<sup>2</sup>M. S. Hybertsen and S. G. Louie, Solid State Commun. **51**, 451 (1984).  
<sup>3</sup>L. J. Sham and M. Schlüter, Phys. Rev. Lett. **51**, 1888 (1983); C. S. Wang and W. E. Pickett, *ibid.* **51**, 597 (1983).  
<sup>4</sup>G. Strinati, H. J. Mattausch, and W. Hanke, Phys. Rev. B **25**, 2867 (1982); see also, in *Electron Correlations in Solids, Molecules and Atoms*, edited by J. T. Devreese and F. Brosens, NATO Advanced Study Institute, Ser. B, Physics, Vol. 81 (Plenum, New York, 1983).  
<sup>5</sup>M. S. Hybertsen and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **55**, 1418 (1985), for Si; Phys. Rev. B **32**, 7005, (1985), for LiCl.  
<sup>6</sup>L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A796 (1965); L. Hedin and S. Lundqvist, Solid State Phys. **23**, 1 (1969).  
<sup>7</sup>W. Hanke, T. Götzler, and H. J. Mattausch, Solid State Commun. **51**, 23 (1984).  
<sup>8</sup>G. B. Bachelet, D. R. Hamann, and M. Schlüter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982).  
<sup>9</sup>R. Dovesi, M. Causa, and G. Angonoa, Phys. Rev. B **24**, 4177 (1981).  
<sup>10</sup>I. Ohkoshi, J. Phys. C **18**, 5415 (1985).  
<sup>11</sup>W. Brinkman and B. Goodman, Phys. Rev. **149**, 597 (1966); see also, J. C. Phillips, *ibid.* **123**, 420 (1961).  
<sup>12</sup>J. P. Walter and M. L. Cohen, Phys. Rev. B **5**, 3101 (1972); A. Baldereschi and E. Tosatti, *ibid.* **17**, 4710 (1978).  
<sup>13</sup>*Semiconductors*, edited by O. Madelung, M. Schulz, and H. Weiss, Landolt-Börnstein, Group III, Vol. 17a (Springer, Berlin, 1982).  
<sup>14</sup>D. Straub, L. Ley, and F. J. Himpsel, Phys. Rev. Lett. **54**, 142 (1985).  
<sup>15</sup>R. Hulthén and N. G. Nilsson, Solid State Commun. **18**, 1341 (1976).



# Band Offsets in Lattice-Matched Heterojunctions: A Model and First-Principles Calculations for GaAs/AlAs

Alfonso Baldereschi

*Dipartimento di Fisica Teorica, Università di Trieste, I-34014 Trieste, Italy, and  
Institut de Physique Appliquée, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne,  
CH-1015 Lausanne, Switzerland*

Stefano Baroni<sup>(a)</sup>

*Dipartimento di Fisica Teorica, Università di Trieste, I-34014 Trieste, Italy*

and

Raffaele Resta

*Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, I-34014 Trieste, Italy  
(Received 21 December 1987)*

A new model for band offsets in lattice-matched heterojunctions is presented along with a novel definition of the interface dipole which avoids any reference to an ideal interface. The model is derived only from the charge densities of the bulk constituents and naturally predicts the independence of the offsets on interface geometry. It is in excellent agreement with accurate first-principles pseudopotential calculations for  $(\text{GaAs})_3/(\text{AlAs})_3$  grown in the (001), (110), and (111) directions and with available experimental data.

PACS numbers: 73.40.Kp, 71.25.Tn

In recent years much interest<sup>1-8</sup> has been devoted to band offsets at semiconductor heterojunctions. Because of the long-range nature of Coulomb interactions, the offsets depend not only on the properties of the two bulk materials, but also on the electronic distribution at the interface<sup>2</sup> which in principle depends on the interface geometry. For the most studied system, namely GaAs/AlAs, previous first-principles calculations indicate that (001), (110), and (111) interfaces have similar offsets.<sup>2,3</sup> Experiments indicate at most a weak dependence on orientation and growth sequence.<sup>7</sup> The present experimental accuracy, however, is not high: The most reliable data for the valence-band offset in GaAs/AlAs range from 0.40 to 0.55 eV.<sup>8</sup>

The average of the electrostatic potential in an infinite solid is an ill-defined constant.<sup>9</sup> The lineup of the average electrostatic potential across the interface between two semi-infinite solids is, on the contrary, well defined and the band offset is obtained by addition of it to the bulk band-edge difference resulting when the arbitrary average values of the electrostatic potentials in the two materials are aligned. Only the lineup due to the Hartree potential is explicitly considered here, because the ionic potentials give only a short-range contribution to the lineup which is implicitly accounted for in the bulk band-edge difference. We have performed state-of-the-art density-functional-theory (DFT) calculations for  $(\text{GaAs})_3/(\text{AlAs})_3$  superlattices oriented in the (111), (110), and (001) directions. We use the local density approximation (LDA),<sup>10</sup> plane-wave (PW) basis sets up to a kinetic energy of 14 Ry (about 1550 PW's for our

twelve-atom supercells), norm-conserving pseudopotentials,<sup>11</sup> and Ceperley-Adler<sup>12</sup> exchange-correlation data;  $\mathbf{k}$ -space integrations have been performed with the special-point technique: We have used the (444) Monkhorst-Pack cubic mesh<sup>13</sup> appropriately folded for the three geometries. The actual number of special points is 2, 4, and 5 for the (001), (110), and (111) interfaces, respectively. Convergence studies with respect to the number of  $\mathbf{k}$  points and the size of both the basis set and the supercell have been performed in order to guarantee an accuracy of  $\sim 0.01$  eV.

The physical quantities  $f(\mathbf{r})$  we are interested in [such as the electron density  $n(\mathbf{r})$  or the electrostatic potential energy  $V(\mathbf{r})$ ] are periodic in the planes perpendicular to the growth direction ( $z$  axis). As we are mainly interested in the  $z$  dependence of such quantities, it is convenient to define  $\bar{f}(z)$  as the  $xy$  planar average of  $f(\mathbf{r})$ . The function  $\bar{f}(z)$  is nonperiodic in the interface region, and goes asymptotically into two different periodic functions (having the same period for lattice-matched heterojunctions) far from the interface: A typical result for the self-consistent charge density  $\bar{n}(z)$  and potential  $\bar{V}(z)$  of  $(\text{GaAs})_3/(\text{AlAs})_3$  (111) is shown in Fig. 1(a). The strong atomic oscillations are bulklike and hide interface effects, such as the barely visible potential shift across the interface. In order to get rid of bulk effects and to blow up interface features, it has been proposed<sup>3,4</sup> to define a function  $\Delta\bar{f}(z)$  subtracting, on each side of the interface, the appropriate bulk function from  $\bar{f}(z)$ : This is illustrated in Fig. 1(b). The relevant features of this construction are as follows: (i) The interface region cor-

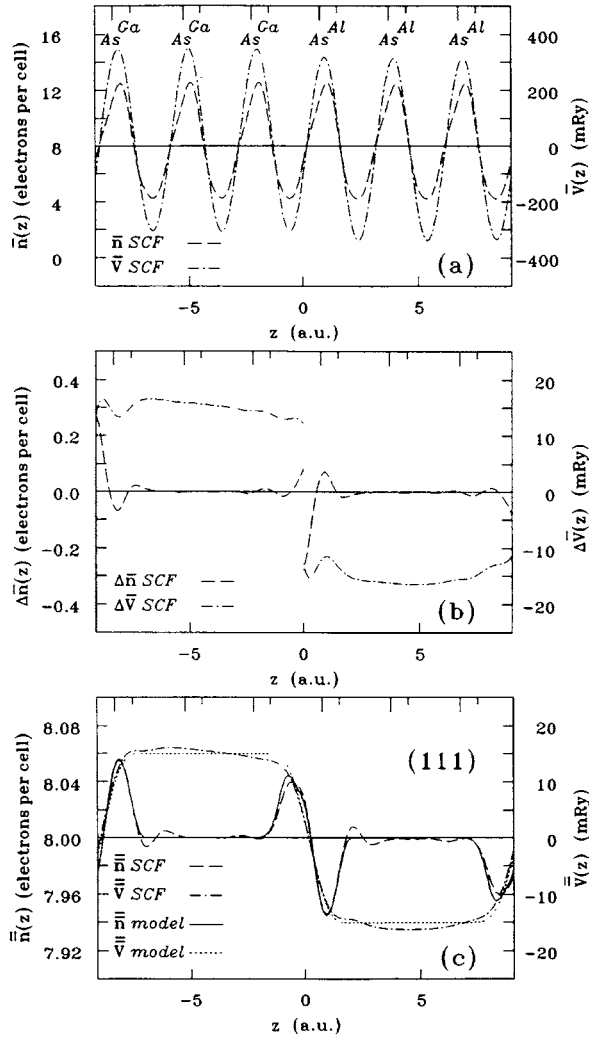


FIG. 1. (a) Planar average of the first-principles (SCF) electron density  $\bar{n}(z)$  and electrostatic potential energy  $\bar{V}(z)$  of  $(\text{GaAs})_3/(\text{AlAs})_3$  oriented along (111). (b) Difference between the planar averages in (a) and the corresponding quantities in the bulk materials [ $\Delta\bar{n}(z)$ ,  $\Delta\bar{V}(z)$ ]. The arbitrary abrupt interface is placed midway between two consecutive heterocationic planes. (c) Macroscopic averages of the electron density [ $\bar{n}(z)$ ] and electrostatic potential energy [ $\bar{V}(z)$ ]; the predictions of our model are also displayed.

responds to  $\Delta\bar{n}(z)$ , significantly different from zero or, equivalently, to nonconstant  $\Delta\bar{V}(z)$ . (ii)  $\Delta\bar{n}(z)$  and  $\Delta\bar{V}(z)$  are discontinuous at the interface and they are not physically linked to each other by a Poisson equation. (iii) The potential drop generated by  $\Delta\bar{n}(z)$  (i.e.,  $\Delta_{\text{dip}}$  in the notation of Refs. 3 and 4) is only part of the total potential lineup  $\Delta$ , the latter being recovered by addition of the difference  $\Delta_{\text{ref}}$  between the average potentials of slabs

of bulk materials. While  $\Delta$  is a physically measurable property of the interface, its decomposition  $\Delta = \Delta_{\text{ref}} + \Delta_{\text{dip}}$  bears no physical meaning since it depends on the arbitrary shape of the reference interface.<sup>9</sup> (iv) On the contrary,  $\Delta\bar{V}(z)$  tends to different constant values on the two sides far from the interface whose difference is the potential lineup  $\Delta$  if the arbitrary average values of the bulk Hartree potentials are aligned.<sup>2</sup>

We propose a new procedure to subtract bulk effects from  $\bar{f}(z)$ , which avoids the definition of an ideal interface and its use as a reference. In fact such a definition is unnecessary, arbitrary, and might lead one to erroneously attribute physical meaning to  $\Delta_{\text{dip}}$ . We define the *macroscopic average*  $\bar{f}(z)$  as the one-dimensional average of  $\bar{f}$  over a period centered at  $z$ :  $\bar{f}(z) = (1/\alpha) \int_{z-\alpha/2}^{z+\alpha/2} \bar{f}(s) ds$ . This is equivalent to the three-dimensional average of  $f(\mathbf{r})$  over a slab-adapted unit cell<sup>9</sup> centered at point  $\mathbf{r}$  and therefore corresponds to the usual definition of macroscopic quantities in electrostatics. When applied to  $\bar{n}(z)$  and to  $\bar{V}(z)$ , the construction gives functions  $\bar{n}(z)$  and  $\bar{V}(z)$  which have the following features: (i) They are continuous functions. (ii) They are derived from a single ground-state calculation and not from differences. (iii) In the two bulk regions,  $\bar{n}(z)$  tends to a constant value  $n_0$  (eight electrons per cell in our case), while  $\bar{V}(z)$  tends to constants differing by  $\Delta$ . (iv) The interface region is unambiguously defined as the region where both  $\bar{n}(z)$  and  $\bar{V}(z)$  significantly deviate from constancy. (v) The density  $\bar{n}(z)$  is related to  $\bar{V}(z)$  by a one-dimensional Poisson equation and is a physically meaningful interface electron distribution, since  $\bar{n}(z) - n_0$  is the finite-range charge distribution which generates the interface macroscopic dipole. The above construction of  $\bar{n}(z)$  and  $\bar{V}(z)$  is based on the assumption that the interface is lattice matched. The concept of macroscopic average can, however, be extended to mismatched interfaces preserving all the above features (i)–(v).

In Fig. 1(c) we display  $\bar{n}(z)$  and  $\bar{V}(z)$  as obtained from first-principles calculations for the (111) interface. An inspection of Figs. 1(b) and 1(c) shows that our lattice is thick enough to satisfactorily reproduce bulk features midway between the two interfaces and that computational noise is small even on such a blown-up scale. Note that  $\bar{n}(z)$  has a typical dipolar shape around  $n_0$  across the interface. The value of  $\bar{V}_{\text{GaAs}} - \bar{V}_{\text{AlAs}}$  produced by this dipolar charge distribution is 0.41 eV. Despite large differences of  $\bar{n}(z)$ , calculations made for the (001) and (110) interfaces give similar shapes for  $\bar{n}(z)$  and  $\bar{V}(z)$  [see Figs. 1(c) and 2] and practically identical values for the lineups (0.41 and 0.43 eV, respectively). The (111) geometry deserves some further comments: While the two interfaces in our supercells are equivalent by symmetry for the (001) and (110) su-

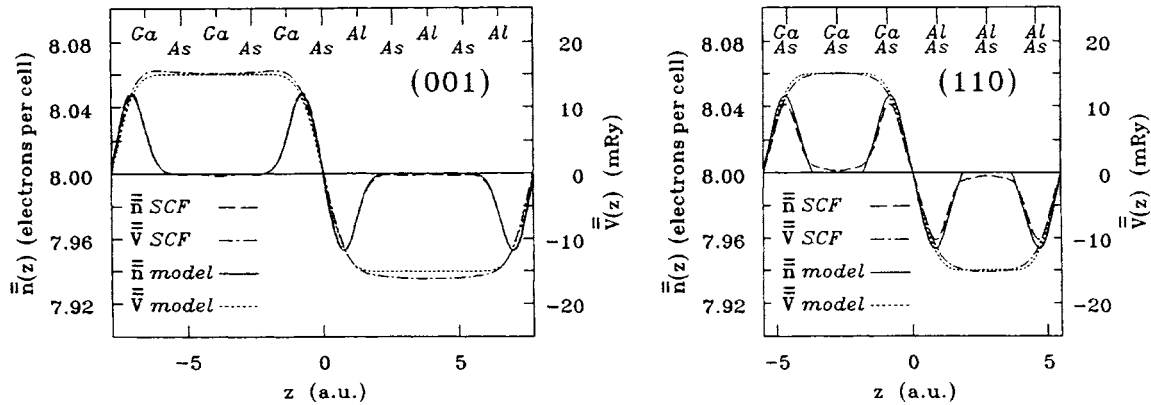


FIG. 2. Macroscopic averages of the first-principles (SCF) electron density [ $\bar{n}(z)$ ] and electrostatic potential energy [ $\bar{V}(z)$ ] of  $(\text{GaAs})_3/(\text{AlAs})_3$  oriented along (001) and (110); the predictions of our model are also displayed.

perlattices, they are not for (111). In fact the two interfaces differ according to whether the interface bond which is parallel to the  $z$  direction is Ga-As or Al-As. The interface in the middle of Fig. 1 is of the former type (type *A*), while those at the figure borders are of the latter (type *B*). Type-*A* and type-*B* lineups can in principle be different ( $\Delta_A \neq \Delta_B$ ), and net interfacial charges  $\sigma_A$  and  $\sigma_B$  can pile up; overall charge neutrality requires  $\sigma_A = -\sigma_B$ . The average electric field in the superlattice is determined by the overall boundary conditions and *not* by the local charge distribution; the use of periodic boundary conditions (as it is done here) amounts to the assumption of a zero average field, which physically corresponds to short circuiting the two free surfaces of a finite sample. The combined effect of  $\Delta_A \neq \Delta_B$ ,  $\sigma_A = -\sigma_B \neq 0$ , and of the periodic boundary conditions results in nonvanishing slopes of the average electrostatic potentials in each of the bulklike regions. Analysis of the data presented in Fig. 1(c) gives  $\Delta_B - \Delta_A = 0.07$  eV, and  $\sigma_B = -\sigma_A = 2.8 \times 10^{-4}$  electrons per surface cell. A similar value (0.06 eV) for the difference in the two (111) lineups has been obtained by Muñoz, Sánchez-Dehesa, and Flores<sup>14</sup> after alignment of suitably defined midgap levels; our results differ from theirs in that they also obtain a sensible difference between the *average* (111) lineup and the lineups for the (001) and (110) interfaces.

The quantities calculated so far are electronic ground-state properties, therefore within the reach of our DFT calculation, the only essential approximation being LDA.<sup>10</sup> In principle, the same does not hold for band offsets, which also depend on bulk quasiparticle energies. However—as recent investigations<sup>15</sup> have shown that corrections to DFT-LDA are about the same for the two materials considered here—we decided to use LDA bulk energy bands to obtain valence-band offsets. The bulk band energies are defined to within the arbitrary constant discussed above<sup>9</sup>; when referring the band struc-

ture of each material to the average of its own electrostatic potential, the top of valence bands in GaAs is 0.05 eV higher than in AlAs. From addition of this quantity and spin-orbit effects (0.03 eV) to the potential lineups calculated above, we obtain for all the interfaces practically the same offset [average offset for (111)], i.e., 0.49–0.51 eV. This is in substantial agreement with the previous calculations for (001) and (110) offsets<sup>3–5</sup> and well within the present experimental error bar.<sup>8</sup>

The finding of an orientation-independent macroscopic dipole suggests the idea that for GaAs/AlAs the lineup is basically a bulk effect. Such independence is in fact obtained under the assumption that each of the two bulk solids is an assembly of elementary building blocks, and that these blocks can also be rigidly assembled to form an ideal reference interface. Starting from this reference, any orientation dependence can only be due to electronic redistributions at the interface. The orientation independence resulting from experimental data<sup>7,8</sup> and from our first-principles results indicates that a reference can be found which makes interface-specific relaxation phenomena negligibly small. A model where the elementary blocks are spherical atoms has been proposed by Van de Walle and Martin (VWM)<sup>2</sup>; it approximates the two bulk charge densities with a reasonable accuracy and gives a potential lineup of 0.60 eV.

We propose here a new model in which the building blocks are derived from the bulk charge densities of the constituents, using crystal symmetry. For lattice-matched common-anion heterojunctions, we decompose the bulk electronic densities into Wigner-Seitz cells (WSC) centered on the cations and with fractions of anions at four of the corners: They are neutral and by symmetry do not have dipole or quadrupole moments, i.e., the potential of WSC's is sufficiently short range not to produce macroscopic effects across the interface. Our model interface electronic density is then obtained simply by rigid juxtaposition of these WSC's; the total elec-

tronic charge is very much different for the four interfaces considered here, because of the geometry of each juxtaposition. Before averaging, the three-dimensional model electron density has small discontinuities at the boundaries of the WSC's at the interface, while the corresponding potential is continuous, showing an orientation-independent lineup of 0.41 eV, in agreement with the *ab initio* values reported above (0.41–0.43 eV).

Besides this single figure, the soundness of the physical picture underlying our model is best judged from an analysis of the predicted interface charge. To this end, we display in Figs. 1(c) and 2 the macroscopic averages of the electronic charge density and the electrostatic potential as predicted by the model for (GaAs)<sub>3</sub>/(AlAs)<sub>3</sub> oriented along (111), (001), and (110). The agreement with first-principles calculations is extremely good. In particular the spatial extent of the interface regions and the shape of the dipolar charge distributions are well reproduced for all four interfaces. Of course, starting from the model, a small electronic rearrangement must occur in order to ensure at least charge continuity. Our results show that this rearrangement does not affect the total lineup for the (001) and (110) geometries, while it is responsible for the small lineup difference and interfacial charges in the case of the (111) orientation.

Our procedure has several advantages over the one of VWM's. It *exactly* reproduces the electronic density in the bulk, it provides a more accurate description of density profiles at the interface, and it yields a 0.49-eV valence-band offset which differs from our first-principles calculations by less than 0.02 eV, whereas VWM's model gives an error which is almost an order of magnitude larger. Of course, our model is less general than VWM in that in its present form it only applies to common-anion (or common-cation) lattice-matched heterojunctions. Extensions of this simple model to more general interfaces are possible and presently under study.<sup>16</sup>

We conclude by summarizing the main goals achieved in the present work. We have shown that an appropriate use of the basic concepts of electrostatics allows one to define an interface dipole at semiconductor interfaces avoiding any unnecessary reference to arbitrary ideal interfaces. Contrary to previous definitions, this dipole is directly related to the electrostatic potential lineup. We suggest that the arbitrariness in the definition of the reference interface can be removed by requesting that electronic relaxation with respect to it be a minimum. To this end we have introduced a new model which does make electronic redistribution at the interface negligibly small. The mere existence of such a model definitely rules out any significant role of interface-specific relaxation phenomena in this system. Finally, evidence has

been given that a small difference exists between the lineups of the two inequivalent (111) interfaces which is associated with net interface charges and internal electric fields.

The present work has been partially supported by the Italian Ministry of Education through the Centro Interuniversitario di Struttura della Materia and is part of the collaborative project between Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati and the Centro di Calcolo Elettronico Interuniversitario dell'Italia Nord-Orientale computing center.

(a)Present address: Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Strada Costiera 11, I-34014 Trieste, Italy.

<sup>1</sup>See, for instance, the issues J. Vac. Sci. Technol. B **4**, No. 4 (1986), and **5**, No. 4 (1987).

<sup>2</sup>C. Van de Walle and R. M. Martin, in *Computer-Based Microscopic Description of the Structure and Properties of Materials*, edited by J. Broughton, W. Krakow, and S. T. Pantelides (Materials Research Society, Pittsburgh, 1986), p. 21, and J. Vac. Sci. Technol. B **4**, 1056 (1986), and Phys. Rev. B **35**, 8154 (1987).

<sup>3</sup>D. M. Bylander and L. Kleinman, Phys. Rev. B **34**, 5280 (1986), and **36**, 3229 (1987), and Phys. Rev. Lett. **59**, 2091 (1987).

<sup>4</sup>S. Massidda, B. I. Min, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **35**, 9871 (1987).

<sup>5</sup>S. H. Wei and A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **59**, 144 (1987).

<sup>6</sup>H. Kroemer, Surf. Sci. **174**, 299 (1986).

<sup>7</sup>W. I. Wang, T. S. Kuan, E. E. Mendez, and L. Esaki, Phys. Rev. B **31**, 6890 (1985); J. R. Waldrop, R. W. Grant, and E. A. Kraut, J. Vac. Sci. Technol. B **5**, 1209 (1987).

<sup>8</sup>W. I. Wang and F. Stern, J. Vac. Sci. Technol. B **3**, 1280 (1985), and references therein; A. D. Katnani and R. S. Bauer, Phys. Rev. B **33**, 1106 (1986); J. Batey and S. L. Wright, J. Appl. Phys. **59**, 1200 (1986).

<sup>9</sup>L. Kleinman, Phys. Rev. B **24**, 7412 (1981).

<sup>10</sup>See, for instance, R. M. Martin, in *Electronic Structure, Dynamics and Quantum Structural Properties of Condensed Matter*, edited by J. T. Devreese and P. Van Camp (Plenum, New York, 1985), p. 175.

<sup>11</sup>G. B. Bachelet, D. R. Hamann, and M. Schlüter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982).

<sup>12</sup>D. M. Ceperley and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980); J. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B **23**, 5048 (1981).

<sup>13</sup>H. J. Monkhorst and J. P. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).

<sup>14</sup>A. Muñoz, J. Sánchez-Dehesa, and F. Flores, Phys. Rev. B **35**, 6468 (1987).

<sup>15</sup>R. W. Godby, M. Schlüter, and L. J. Sham, Phys. Rev. B **35**, 4170 (1987), and **36**, 6497 (1987).

<sup>16</sup>M. Peressi, A. Baldereschi, S. Baroni, and R. Resta, to be published.

# Les premiers pas de géant







Diplôme de l'Université de Pise, 1967.

## NOTIZIARIO DELLA SCUOLA NORMALE SUPERIORE

PER L'ANNO ACCADEMICO 1967/68

### DIPLOMI DI LICENZA ANNO ACCADEMICO 1967-68

Alfonso BALDERESCHI. Fisica. *Regole di selezione. 70/70 e lode.*

Extrait du Notiziario della Scuola Normale Superiore, Annali della Scuola Normale di Pisa, Lettere, Storia e Filosofia, Serie II, Vol. 37, No. 3/4 (1968), p. 313.



# A life with Alfonso

## Une vie avec Alfonso

---

**Erio Tosatti**

---

This is about Alfonso and me, in different periods of our lives. First, and most extensive, in Pisa from 1967 to 1969. Second, less detailed but no less important, in the USA, Lausanne, and Trieste-Lausanne: 1969–1973, 1973–1981, and 1981–today.

### Pisa

I first met Alfonso in April 1967. Thanks to a fellowship, I had just switched from the high energy physics of my degree in Modena, to the promising field of theoretical solid-state physics (then part of the broader area of *Struttura della Materia* in Italian academics), in Franco Bassani's new group in Pisa. Bassani had recently returned from the US where, at the University of Illinois Urbana and at Argonne National Laboratories, he had learned and made significant contributions to the new theories of electronic structure in solids. He was brimming with ideas and drive, and aimed at building not just a group, but a community that would develop that branch of theoretical physics in Italy. The group was tiny, consisting of a single Assistant Professor, Giuseppe (Peppino) Pastori Parravicini, and a few undergraduate students, among which were Emilio Doni and Alfonso

Ce texte parle d'Alfonso et de moi, à différentes périodes de notre vie. La première, et la plus longue, à Pise, de 1967 à 1969. La deuxième, moins détaillée mais non moins importante, aux États-Unis, à Lausanne et à Trieste-Lausanne, de 1969 à 1973, de 1973 à 1981 et de 1981 à aujourd'hui.

### Pise

J'ai rencontré Alfonso pour la première fois en avril 1967. Grâce à une bourse, je venais de passer du domaine de la physique des hautes énergies, objet de mon diplôme à Modène, à celui, prometteur, de la physique théorique du solide (qui faisait alors partie de la *Struttura della Materia* en Italie) dans le nouveau groupe de Franco Bassani, à Pise. Bassani venait de rentrer des États-Unis où, à l'Université de l'Illinois Urbana et aux laboratoires nationaux d'Argonne, il avait appris et contribué de manière importante aux nouvelles théories de la structure électronique dans les solides. Il débordait d'idées et de dynamisme, et avait pour objectif de créer non seulement un groupe, mais une communauté qui développerait cette branche de la physique théorique en Italie. Le groupe initial était minuscule, composé d'un seul professeur assistant, Giuseppe (Peppino)

Baldereschi. Yet that size was only small on the Pisan scale. Nationwide, Bassani wielded a broad influence championing—with others of the Gruppo Nazionale di Struttura della Materia (GNSM), including founder Luigi Giolotto of Pavia, Gianfranco Chiarotti of Rome and others—a plan to relaunch the field of quantum physics of matter and radiation in Italy. This discipline was born before World War II, but its key actors in Italy, including the likes of Fermi, Rasetti, Fano, and others, had mostly emigrated after the 1938 racial laws, creating new schools in North America and impoverishing the Italian scene. The GNSM allowed member groups to support fellowships (*borse*), whose holders were in a similar position to modern PhD students, although there was no proper PhD curriculum in Italy at the time. That became my initial role, and later that of Liana Martinelli, a university mate from Modena, Flavio Toigo from Padova, Raffaello Girlanda from Messina, and others, as well as Alfonso, after his degree in October 1967. Soon afterwards, both Alfonso and I were granted a postgraduate *perfezionando* fellowship at the Scuola Normale Superiore (hereafter referred to as Normale) in Pisa. While remaining very much in Bassani's group, we physically moved just a few hundred meters away from the Physics Institute of Piazza Torricelli.

Although several years younger, Alfonso was scientifically ahead of all of us even before his degree. Born in Legnano, he had moved as an undergraduate from the University of Milano to that of Pisa, where he was immediately admitted as a student at Normale, more or less at the same time as the arrival in Pisa—from the US and the University of Messina, respectively—of Bassani and Pastori. Alfonso thus became Bassani's first fresh Pisan undergraduate student, probably also the brightest. His first paper, "Landau Levels and Magneto-Optic Effects at Saddle

Pastori Parravicini, et de quelques étudiants de premier cycle, dont Emilio Doni et Alfonso Baldereschi. Pourtant, cette taille n'était modeste qu'à l'échelle pisane. Au niveau national, Bassani exerçait une grande influence en défendant, avec d'autres membres du Gruppo Nazionale di Struttura della Materia (GNSM), dont le fondateur Luigi Giolotto à Pavia, Gianfranco Chiarotti à Rome et d'autres, un projet visant à relancer en Italie la physique quantique de la matière et des rayonnements. Une discipline née avant la Seconde

Guerre mondiale, mais dont les principaux acteurs en Italie, parmi lesquels Fermi, Rasetti, Fano et d'autres avaient pour la plupart émigré après les lois raciales de 1938, créant de nouvelles écoles en Amérique du Nord et appauvrissant la scène italienne. Le GNSM permettait aux groupes membres de soutenir des bourses, dont les titulaires se trouvaient dans une situation similaire à celle des doctorants modernes, bien qu'il n'y ait pas eu de véritable programme de doctorat en Italie à l'époque. Ce fut mon rôle initial, puis celui de Liana Martinelli, une camarade d'Université de Modène, de Flavio Toigo de Padoue, de Raffaello

Girlanda de Messine et d'autres, ainsi que d'Alfonso, après son diplôme en octobre 1967. Peu après, Alfonso et moi avons obtenu une bourse de *perfezionando* de troisième cycle à la Scuola Normale Superiore de Pise (ci-après la Normale) de Pise. Tout en restant dans le groupe de Bassani à l'université, nous avons déménagé physiquement, à quelques centaines de mètres de l'Institut de physique situé Piazza Torricelli.

Bien que plus jeune de quelques années, Alfonso était scientifiquement en avance sur nous tous avant même d'avoir obtenu son diplôme. Né à Legnano, il avait quitté l'Université de Milan pour celle de Pise, où il avait été immédiatement admis comme étudiant à la Normale, plus ou moins en même temps



Franco Bassani.

Points,” was published in Physical Review Letters in July 1967, when Alfonso, born on 24 September 1946, was an undergraduate lad of 20; quite a feat. After his degree, he and I spent years in the same makeshift plywood office on the third floor of the Palazzo della Carovana of Normale.

que l’arrivée à Pise de Bassani et Pastori, en provenance des États-Unis et de l’Université de Messine respectivement. Alfonso est ainsi devenu le premier étudiant pisan fraîchement diplômé sous Bassani, et probablement aussi le plus brillant. Son premier article, intitulé « Landau Levels and Magneto-Optic Effects at Saddle Points », a été publié dans Physical Review Letters en juillet 1967, alors qu’Alfonso, né le 24 septembre 1946, était un jeune étudiant de



Scuola Normale Superiore – Palazzo della Carovana.

It overlooked the roof of the Church Santo Stefano dei Cavalieri by Vasari, where while pondering physics we also delved at length into the amazing mating habits of pigeons. Outside of Normale, we did things and went places, along with peers including Riccardo Barbieri, Roberto Vergara Caffarelli, Paolo Viviani, and many others. In Alfonso’s smashing new car, a blue Fiat 124 Spider, we drove to go hiking in the Apuan Alps (with marble caves where we also discovered dynamite deposits), the thorny slopes of Monte Serra, the Livorno swimming pool and the Cecina Calafuria beach, the beautiful San Rossore natural park, and more. We also organised parties and dinners at places such as our favourite *trattoria*, La Cecca in Capannori.

20 ans : un véritable exploit. Après avoir obtenu notre diplôme, lui et moi avons passé des années dans le même bureau de fortune en contreplaqué au troisième étage du Palazzo della Carovana de la Normale.

Il donnait sur le toit de l’église Santo Stefano dei Cavalieri de Vasari, où, tout en réfléchissant à la physique, nous nous sommes longuement penchés sur les étonnantes mœurs sexuelles des pigeons. En dehors de la Normale, nous avons fait bien des activités et voyages, avec des pairs tels que Riccardo Barbieri, Roberto Vergara Caffarelli, Paolo Viviani et d’autres encore. Avec sa toute nouvelle voiture, une Fiat 124 Spider bleue, nous avons fait des randonnées dans





The Fiat 124 Spider. Reproduced with permission from [petrolicious.com](http://petrolicious.com) | La Fiat 124 Spider. Reproduit avec l'autorisation de [petrolicious.com](http://petrolicious.com).

In his magnificence, Bassani largely sent all of us young people to conferences and schools. The earliest was, in 1967, the three-month-long first Winter College on Condensed Matter Physics, in Trieste's newborn International Centre for Theoretical Physics (ICTP) – a place that would become important later for both Alfonso and me. Other schools followed, such as the 1968 GNSM summer school in Perugia, and the 1969 summer school in Chania, Crete, co-organised by Eli Burstein—a distinguished and generous American experimentalist who later became one of our protecting angels.

In September 1968, Alfonso and I drove together from Pisa to Sicily for a conference in Taormina, which we decided to extend into a touring stint. As no motorways were available and Alfonso was very determined to drive through the night, that drive was a nightmare—my stomach is still painfully aware of the tortuous mountain stretch across Vallo della Lucania,

les Alpes apuanes (avec des grottes de marbre où nous avons aussi découvert des dépôts de dynamite), sur les pentes épineuses du Monte Serra, à la piscine de Livourne et sur la plage de Cecina Calafuria, dans le magnifique parc naturel de San Rossore, et bien d'autres endroits. Nous avons également organisé des fêtes et des dîners dans des lieux tels que notre *trattoria* préférée, La Cecca à Caponnori.

Dans sa magnificence, Bassani nous envoyait tous, jeunes gens que nous étions, à des conférences et écoles. La toute première fut, en 1967, le premier collège d'hiver sur la physique de la matière condensée, d'une durée de trois mois, au tout nouveau Centre international de physique théorique (ICTP) à Trieste – un lieu qui deviendrait important plus tard pour Alfonso et moi-même. D'autres écoles ont suivi, comme l'école du GNSM à Pérouse en 1968, et l'école de Chania en Crète en 1969, co-organisée par Eli Burstein, expérimentateur américain distingué

followed, at dawn, by a much welcome open-air sleep on the deserted sandy beach of Maratea. Later during that journey, again because Alfonso would not stop to look for a hostel or some other accommodation, we ended up sleeping another rough night in his car, near a beach by Selinunte. At dawn we were startled awake by nearby gunshots. Luckily, it was not bandits—just hunters.

Under the leadership of Gilberto Bernardini, the position of *perfezionando* at Normale was pure luxury. In line with the institution's glorious tradition, where talent-driven curiosity takes precedence over everything, we weren't so much obliged to sweat over exams, but rather encouraged to attend courses and meet senior scientists who would broaden our horizons beyond our strict field of specialisation. This was how we came to attend Tsung-dao Lee's visiting lectures on fundamental physics; the astrophysics course given by Luigi Radicati, a staunch supporter of Alfonso, from whom we also heard about the newly discovered pulsars; and even arcane geometry colloquia by Ennio De Giorgi. On the other hand, and again unlike stan-

dard Italian university habits at the time, Normale paid great attention to contacts involving learning/teaching among peers. So, Alfonso and I were each assigned as tutors to a group of ten freshmen undergraduates, a mere three or four years younger than ourselves—from both mathematics and physics programmes—, a demanding and yet wonderful task. The job was demanding because we had to invent nontrivial questions and exercises that very clever Normale students would take as a friendly challenge. It was psychologically demanding as well, for many among these students were overstressed by competition and the fear of losing their privileged post. Never before had I appreciated the enormous differences of talent among peers with

et généreux, qui est devenu par la suite l'un de nos anges gardiens.

En septembre 1968, Alfonso et moi avons fait route ensemble de Pise à la Sicile pour une conférence à Taormine, que nous avons décidé de prolonger par du tourisme. En l'absence d'autoroutes, et avec un Alfonso très déterminé à conduire de nuit, ce trajet fut un cauchemar : mon estomac garde un souvenir douloureux de la tortueuse route de montagne traversant le Vallo della Lucania, suivie, à l'aube, d'un

sommeil bienvenu en plein air sur la plage de sable déserte de Maratea. Plus tard, toujours parce qu'Alfonso ne voulait pas s'arrêter pour chercher une auberge ou autre, nous avons fini par passer une autre nuit éprouvante dans sa voiture, près d'une plage de Selinunte. À l'aube, nous avons été réveillés en sursaut par des coups de feu. Heureusement, il ne s'agissait pas de bandits, mais de chasseurs.

Sous la direction de Gilberto Bernardini, le poste de *perfezionando* à la Normale était un véritable luxe. Dans la glorieuse tradition de la Normale, où la curiosité guidée par le talent prime sur tout le reste,

nous n'étions pas vraiment obligés de nous tuer à la tâche pour les examens, mais plutôt encouragés à suivre des cours et à rencontrer des scientifiques de haut niveau qui élargiraient nos horizons au-delà de notre strict domaine de spécialisation. C'est ainsi que nous avons assisté aux conférences de Tsung-dao Lee sur la physique fondamentale, au cours d'astrophysique de Luigi Radicati, un fervent soutien d'Alfonso, qui nous a également parlé des pulsars alors fraîchement découverts, et même aux colloques de géométrie obscure d'Ennio De Giorgi. D'autre part, et contrairement aux habitudes des universités italiennes de l'époque, la Normale accordait une grande attention aux contacts impliquant l'apprentissage et l'enseignement entre pairs. C'est ainsi qu'Alfonso et



Luigi Aialdo Radicati di Brozolo.

qualifications of nominally equal excellence. Some of the students learned on the fly, leading an easy life with very little study—later in life, my own son Valentino enjoyed Normale in exactly that way. Others, less fortunate, imposed a mad amount of work upon themselves just to stay afloat. In this effort, they arrived at a state close to breakdown and needed support. I unfortunately forget most of the students' names. Among mine, I remember only a devout Catholic, Pietro Galbiati, who got himself arrested for trying to stop a clash between students and the police. Among Alfonso's students, I recall Massimo Inguscio.

Bassani and his group soon acquired many other Pisan students who followed in Alfonso's wake. Among them I recall, in no particular order, Raffaele Resta (at Normale), Emilio Doni, Michele Cini, Lorenzo Resca, Giuseppe Grosso. In the broader Pisan physics community, it was a privilege to be surrounded by more experienced colleagues outside Bassani's group. Adriano Gozzini and his quantum optics collaborators were a source of motivation and help, particularly through Paolo Minguzzi, Paolo Violino, Ennio Arimondo, along with colleagues of other areas, such as high-energy physics students Ennio Bertolucci and Aldo Menzione. Inspiring seniors like Elio Fabri and Adriano Di Giacomo exemplified how science and political engagement could and should coexist. Other seniors like Nestore Bernardo Cacciapuoti, director of the Physics Institute, took interest in our individual careers including military service, which was mandatory in Italy at the time. Last but not least, colleagues like Sergio Santucci and Arnaldo Stefanini gave us fundamental advice about life, including which trattorias were good and which ones were not. Political topics, which I must say were dominant in academia at the time, actually never drew a strong interest from Alfonso, who concentrated on hard physics problems.

Bassani's group was very strongly connected, as mentioned, with others outside Pisa. Italian colleagues such as Adalberto (Camillo) Balzarotti and Martino Grandolfo from Rome, Bruno Preziosi and Peppino Iadonisi from Naples, Aldo Cingolani and Antonio Minafra from Bari, Sandro Giuliano from Messina, Giuseppina Vetri from Palermo, Aurelio

moi nous sommes vus confier le tutorat en physique d'un groupe de dix étudiants de première année, à peine trois ou quatre ans plus jeunes que nous – qui étudiaient les mathématiques et la physique –, une tâche à la fois exigeante et merveilleuse. Exigeante parce que nous devons inventer des questions et des exercices non triviaux, que les étudiants très intelligents de la Normale ne dédaigneraient pas et qu'ils prendraient plutôt comme un défi amical. Psychologiquement exigeant aussi, car beaucoup de ces étudiants étaient stressés par la compétition et la peur de perdre leur place privilégiée. Jamais auparavant n'avais-je mesuré les énormes différences de talent entre des camarades ayant des qualifications nominalement égales. Certains étudiants apprenaient à la volée, menant une vie facile avec très peu d'études – des années plus tard, mon propre fils Valentino a suivi la Normale de cette façon. D'autres, moins chanceux, s'astreignaient à un travail forcené pour se maintenir à flot. Dans cet effort, ils arrivaient à un état proche de l'effondrement et avaient besoin de soutien. J'ai malheureusement oublié la plupart des noms des étudiants. Parmi les miens, je me souviens juste d'un fervent catholique, Pietro Galbiati, qui a été arrêté pour avoir tenté d'empêcher un affrontement entre les étudiants et la police. Parmi ceux d'Alfonso, je me souviens de Massimo Inguscio.

Bassani et son groupe ont rapidement attiré de nombreux autres étudiants pisans, qui ont suivi dans le sillage d'Alfonso. Parmi eux, je me souviens, sans ordre chronologique particulier, de Raffaele Resta (à la Normale), d'Emilio Doni, de Michele Cini, de Lorenzo Resca et de Giuseppe Grosso. Dans la communauté de physique pisane au sens large, c'était un privilège d'être entouré de collègues plus expérimentés en dehors du groupe de Bassani. Adriano Gozzini et ses collaborateurs en optique quantique ont été une source de motivation et d'aide, notamment par l'intermédiaire de Paolo Minguzzi, de Paolo Violino, d'Ennio Arimondo, ainsi que des collègues d'autres domaines, tels que les étudiants en physique des hautes énergies Ennio Bertolucci et Aldo Menzione. Des seniors inspirants comme Elio Fabri et Adriano Di Giacomo ont montré comment la science et l'engagement politique pouvaient et devaient coexister. D'autres seniors comme Nestore Bernardo Cacciapuoti, directeur de l'Institut de physique, se sont intéressés à nos



Ascoli and Maria Asdente from the Centro Italiano Studi ed Esperienze (CISE), Lucio Braicovich from Milan, Roberto Fieschi from Parma, and Giuseppe Montalenti from Turin. Along with many others, they formed a virtually incessant procession, from which all of us benefitted. But this also required a lot of time and attention, which Alfonso, like all of us, tried to stem a bit. From the US, in addition, Bassani attracted very distinguished year-long senior sabbatical visitors, Liu Liu from Northwestern University, John R. Robinson from Urbana-Champaign, Truman Woodruff from Michigan State, and Sergio Rodriguez from Purdue, who in part also became our mentors and collaborators. We in turn also paid numerous visits to groups with which Bassani had connections, inside Italy as well as abroad. Günther Harbeke at the Radio Corporation of America (RCA) Laboratories in Zurich was crucial



Emmanuel Mooser.

for me, establishing a lifelong connection. Many visits by both Alfonso and myself were to Emmanuel (Mani) Mooser in Lausanne. Mooser led a small experimental cohort, then based in a modest apartment in front of Lausanne's train station. Thanks to his strong role and personality, the group formed a significant nucleus of what would become EPFL Physics, later an important part of Alfonso's life.

In Pisa, of course, Alfonso—actually “Francisco”, his Normale nickname—and I mainly discussed physics, a lot of it. Ignorant as I was, coming from high-energy physics, I particularly benefitted learning from him about effective mass Hamiltonians, Kohn-style variational methods, and hydrogenic impurity states in semiconductors. I remember for example reading and re-reading with him the 1967 paper by Zhilich and Monozon on hydrogen levels in ultra-high magnetic fields. Conversely, I taught him dispersion relations, graphite and layered materials, and nonlocal dielectric screening in semiconductors. In physics

carrières individuelles, y compris au service militaire, obligatoire en Italie à l'époque. Enfin, des collègues comme Sergio Santucci et Arnaldo Stefanini nous ont donné des conseils fondamentaux sur la vie, notamment sur les *trattorie* qui étaient bonnes et celles qui ne l'étaient pas. Les thèmes politiques, alors dominants dans le monde universitaire, n'ont en fait jamais suscité l'intérêt d'Alfonso, qui se concentrait sur les problèmes de physique.

Le groupe de Bassani était très fortement lié, comme nous l'avons dit, à d'autres groupes en dehors de Pise. Des collègues italiens comme Adalberto (Camillo) Balzarotti et Martino Grandolfo de Rome, Bruno Preziosi et Pepino Iadonisi de Naples, Aldo Cingolani et Antonio Minafra de Bari, Sandro Giuliano de Messine, Giuseppina Vetri de Palerme, Aurelio Ascoli et Maria Asdente du Centro

Italiano Studi ed Esperienze (CISE) de Pise, Lucio Braicovich de Milan, Roberto Fieschi de Parme, ou encore Giuseppe Montalenti de Turin. Avec beaucoup d'autres, ils ont formé un cortège presque incessant dont nous avons tous profité. Mais cela demandait aussi beaucoup de temps et d'attention, qu'Alfonso, comme nous tous, essayait de freiner un peu. En outre, Bassani recevait des visiteurs seniors très distingués en sabbatique de longue durée depuis les États-Unis : Liu Liu de l'Université Northwestern, John R. Robinson d'Urbana Champaign, Truman Woodruff de Michigan State et Sergio Rodriguez de Purdue, qui sont en partie devenus nos mentors et nos collaborateurs. Nous avons à notre tour rendu de nombreuses visites aux groupes avec lesquels Bassani était en relation, en Italie comme à l'étranger. Günther Harbeke, des laboratoires de la Radio Corporation of America (RCA) à Zurich, a joué un rôle crucial pour moi en établissant un lien qui durera toute ma vie. Alfonso et moi-même nous sommes souvent rendus chez



At my wedding, Modena 1980. Sitting opposite Alfonso is Roberto Car | À mon mariage, Modène 1980. Roberto Car est assis en face d'Alfonso.

and outside, our lives became variously intertwined and with mutual lifelong influences.

On a more mundane level, we were both young and not alien to the charm of girls—a game at which he was much more successful than I. With his personality, he attracted the other gender, and that soon had him engaged. This is not to suggest that Alfonso was some sort of gigolo. He was, on the contrary, mostly concentrating on work, harder than most of us, and taking all the time he needed for it. An anecdote illustrates that better than anything. On the morning of his own wedding day in Pisa, all of us, friends and families, convened at the Loggia dei Mercanti in Pisa, where the ceremony was to take place. Alas, no trace of Alfonso. After a while the bride arrived, yet still no Alfonso. In alarm, people wondered whether he might have had some kind of accident. Not I, who knew him better. With a quick walk to via Santa Maria, where the main computer of the Centro Nazionale Universitario di Calcolo Elettronico (CNUCE) was located, I found him there. In order to waste no time, he was feeding the deck of punch cards into the IBM 7040 for a last-minute calculation, which would take several days to run... When on the contrary work would not interfere, Alfonso, ever the good companion, was totally

Emmanuel (Mani) Mooser à Lausanne. Mooser dirigeait une petite cohorte expérimentale, alors installée dans un modeste appartement en face de la gare de Lausanne. Grâce à son rôle et à sa personnalité, ce groupe a constitué un noyau important de ce qui allait devenir la physique de l'EPFL, si importante dans la vie ultérieure d'Alfonso.

À Pise, bien sûr, Alfonso – ou plutôt « Francisco », son surnom à la Normale – et moi avons surtout discuté de physique, de beaucoup de physique. Ignorant comme je l'étais, venant de la physique des hautes énergies, j'ai particulièrement bénéficié de son enseignement sur les hamiltoniens de masse effective, les méthodes variationnelles de Kohn et les états d'impureté hydrogéniques dans les semi-conducteurs. Je me souviens par exemple d'avoir lu et relu avec lui l'article de Zhilich et Monozon de 1967 sur les niveaux d'hydrogène dans des champs magnétiques ultra-élevés. Inversement, je lui ai enseigné les relations de dispersion, le graphite et les matériaux en couches, ainsi que le blindage diélectrique non local dans les semi-conducteurs. En physique et en dehors de ce domaine, nos vies se sont entremêlées de diverses manières et ont été influencées mutuellement tout au long de notre vie.



At my wedding, Modena 1980. I am clapping, Alfonso is smoking | À mon mariage, Modène 1980. J'applaudis, Alfonso fume.

amenable to social and friendly occasions. Such was for example my own wedding party, at Modena's celebrated Restaurant Fini, in October 1980.

Alfonso's scientific fame soon spread to the US, notably to the University of Illinois at Urbana-Champaign, and to Bell Laboratories in Murray Hill, New Jersey, where he was invited, even before completing his *perfezionamento*. So, after getting married he left and joined first Urbana University, and later Bell Labs with a full staff job. His departure put an end to our Pisan coexistence.

## USA, Lausanne, and Trieste

Both Urbana Champaign and Bell Labs in Murray Hill were iconic places, at the forefront of condensed matter physics at the time. Alfonso's sharp mind and hard-working style fit perfectly. He influenced and was influenced by many, including in time Nunzio Lipari, Massimo Altarelli, and Jim Phillips, all of whom saw him as a young master. In his US period, Alfonso published and promoted an impressive body of long-lasting work in electronic condensed

Sur un plan plus ordinaire, nous étions tous deux jeunes et n'étions pas étrangers au charme des filles – un jeu dans lequel il avait beaucoup plus de succès que moi. Grâce à sa personnalité, il attirait le genre opposé, ce qui lui a permis de se fiancer rapidement. Cela ne veut pas dire qu'Alfonso était un coureur de jupons. Au contraire, il se concentrait sur son travail, plus intensément que la plupart d'entre nous, et prenait tout le temps dont il avait besoin pour cela. Une anecdote l'illustre mieux que tout. Le matin de son propre mariage à Pise, nous nous sommes tous retrouvés, amis et familles, à la Loggia dei Mercanti de Pise, où devait se dérouler la cérémonie. Hélas, aucune trace d'Alfonso. Au bout d'un certain temps, la mariée arriva, mais toujours pas d'Alfonso. Inquiets, les gens se demandaient s'il n'avait pas eu un accident. Pas moi, qui le connaissais mieux. En me rendant rapidement à via Santa Maria, où se trouvait l'ordinateur principal du Centro Nazionale Universitario di Calcolo Elettronico (CNUCE), je l'ai trouvé. Pour ne pas perdre de temps, il introduisait des cartes perforées dans l'IBM 7040 pour un calcul de dernière minute, qui prendrait plusieurs jours... Lorsque le travail n'interférait pas, Alfonso, toujours bon compagnon, était tout à fait disposé à participer à des occasions sociales et amicales. C'est le cas par exemple de ma propre fête de mariage, au célèbre restaurant Fini à Modène, en octobre 1980.

La renommée scientifique d'Alfonso s'est rapidement propagée aux États-Unis, notamment à l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign, et aux Laboratoires Bell à Murray Hill, dans le New Jersey, où il a été invité avant même la fin de son *perfezionamento*. Ainsi, après s'être marié, il est parti et a rejoint d'abord Urbana, puis Bell Labs avec un emploi à plein temps. Son départ a mis fin à notre coexistence pisane.

## USA, Lausanne et Trieste

Urbana Champaign et Bell Labs à Murray Hill étaient tous deux des lieux emblématiques, à la pointe de la physique de la matière condensée à l'époque. L'esprit vif et le style travailleur d'Alfonso s'y intégraient parfaitement. Il a influencé et été influencé par de nombreuses personnes, notamment Nunzio Lipari, Massimo Altarelli et Jim Phillips, qui le considéraient tous comme un jeune maître. Pendant sa période





Paolo Budinich. Photo by Andrea Lasorte.

matter theory. Beginning with a key paper, actually conceived by him alone out of nowhere in the office we shared in Normale, showing that burdensome  $k$ -space summations could well be approximated using a single point—the Baldereschi point. Later, with Lipari and Altarelli, he masterminded papers that for the first time unravelled at depth the physics of impurity states in semiconductors.

Soon, however, family forces started to draw Alfonso back to Europe. US colleagues tried their best to convince him to stay, including by helping him partly escape the Italian military service that had unexpectedly drafted him during a visit to his ailing father. In spite of that, Alfonso moved back to Europe in 1973, joining Lausanne's newborn École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). The school of electronic structure he created there is one element that helped EPFL eventually attain the world-class reputation it has today. From the very beginning, Alfonso joined the nascent density functional electronic structure community, showing how many of the properties of solids—as well as important quantities that could previously only be “guesstimated”—could be calculated and predicted. In Lausanne, Alfonso also founded the Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), which fostered fresh collaborations amongst the EPFL and the

américaine, Alfonso a publié et promu un ensemble impressionnant de travaux durables dans le domaine de la théorie de la matière condensée électronique. Il a commencé par un article clé, conçu par lui seul dans le bureau que nous partagions à Normale, montrant que les pénibles sommations sur l'espace  $k$  pouvaient être efficacement approximées en utilisant un seul point : le point de Baldereschi. Plus tard, avec Lipari et Altarelli, il a conçu des articles qui, pour la première fois, ont permis de démêler en profondeur la physique des états d'impureté dans les semi-conducteurs.

Bientôt, cependant, les forces familiales ont commencé à attirer Alfonso vers l'Europe. Ses collègues américains ont fait de leur mieux pour le convaincre de rester, notamment en l'aidant à échapper en partie au service militaire italien qui l'avait enrôlé à l'improviste lors d'une visite à son père malade. Malgré cela, Alfonso est revenu en 1973, rejoignant la toute nouvelle École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). L'école de structure électronique qu'il y a créée est l'un des éléments qui ont permis à l'EPFL d'atteindre au fil du temps le niveau mondial actuel. Dès le début, Alfonso a rejoint la communauté naissante de la structure électronique par la fonctionnelle de densité, montrant comment de nombreuses propriétés des solides, et des quantités importantes qui n'étaient auparavant qu'estimées, pouvaient être calculées et prédites. À Lausanne, Alfonso a également fondé l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), qui a favorisé de nouvelles collaborations entre l'EPFL et les Universités de Genève, Neuchâtel et Fribourg. À l'EPFL même, Alfonso a couvert au fil du temps toute la gamme des rôles importants en matière de recherche, de pédagogie et de direction. Je m'attends à ce que d'autres parlent plus longuement de sa vie lausannoise et de ses nombreuses contributions à l'EPFL.

Lausanne étant fréquemment visitée par de jeunes physiciens de la matière condensée d'Italie – une tradition lancée par Bassani –, la présence centrale d'Alfonso a également contribué à créer une école italienne de théorie de la structure électronique, dont les principaux scientifiques sont aujourd'hui répan- dus et reconnus au niveau international. Malgré

Universities of Geneva, Neuchâtel, and Fribourg. At EPFL, Alfonso eventually came to cover the whole spectrum of important research, pedagogical, and directorial roles. I expect that others will talk more extensively about his life in Lausanne and his many contributions to EPFL.

As Lausanne was frequently visited by young condensed-matter physicists from Italy—a tradition started by Bassani—, Alfonso's central presence also worked to create an Italian school of electronic structure theory, whose key scientists are nowadays spread worldwide and recognised internationally. In spite of that, by the end of the '70s, many of us in Italy felt that we should benefit more from Alfonso's research and mentorship stature. So, when he won (at age 34) a national university chair selection in our group of disciplines, then still called *Struttura della Materia* as in Bassani's time, I managed to convince enlightened colleagues, most notably Paolo Budinich, to designate Alfonso as the Trieste University Chair Professor in that discipline. A feat I remain thoroughly proud of, and which led to a parallel Italian-Swiss school of electronic structure that worked wonders. Alfonso would regularly commute between Trieste and Lausanne, on a stretch of what we thought of as the Orient Express and which we jokingly dubbed the "Baldereschi Express".

Alfonso's presence in Trieste was usually concentrated on the last part of the week, discreetly signalled by his Citroën DS 19 with a Swiss plate from the Canton of Vaud in the Miramare car park, in front of the main building of the International Centre for Theoretical Physics, now called Leonardo building.

This level of engagement in Trieste's teaching and research may appear partial. It was in fact total, owing to Alfonso's larger-than-life personality and style. His approach to students and collaborators was based on discourse. In any argument, he would take his time and reason, mixing hard physics knowledge, intuitive insight, and subtle humour plus wit—a combination that made him impossible to resist. Never in my life have I met anyone, including geniuses and Nobel Prize winners, who would surpass Alfonso on that front. It made him the most successful mentor

cela, à la fin des années 70, nous étions nombreux en Italie à penser que nous devrions bénéficier davantage de la stature d'Alfonso en matière de recherche et de mentorat. Ainsi, lorsqu'il a remporté (à l'âge de 34 ans) une chaire universitaire nationale dans notre groupe de disciplines, encore appelé *Struttura della Materia* comme à l'époque de Bassani, j'ai réussi à convaincre des collègues éclairés, notamment Paolo Budinich, de désigner Alfonso comme professeur à l'Université de Trieste dans cette discipline. Un exploit dont je suis très fier et qui a conduit à la création d'une école de structure électronique italo-suisse parallèle, qui a fonctionné à merveille. Alfonso faisait la navette entre Trieste et Lausanne, sur un tronçon de ce que nous considérions comme l'Orient express et que nous appelions en plaisantant le « Baldereschi express ».

La présence d'Alfonso à Trieste était généralement concentrée sur la dernière partie de la semaine, discrètement signalée par sa Citroën DS 19 avec une plaque suisse « VD » garée sur le parking de Miramare, devant le bâtiment principal du Centre international de physique théorique, aujourd'hui appelé bâtiment Leonardo.

Ce niveau d'engagement dans l'enseignement et la recherche à Trieste peut sembler partiel. En réalité, il était total, en raison de la personnalité et du style plus grands que nature d'Alfonso. Son approche des étudiants et des collaborateurs était basée sur le discours. Dans toute discussion, il prenait son temps et raisonnait, mêlant connaissances physiques approfondies, intuition, humour subtil et esprit – une combinaison qui le rendait impossible à résister. Je n'ai jamais rencontré dans ma vie quelqu'un, y compris des génies et des lauréats du prix Nobel, qui aurait pu surpasser Alfonso sur ce point. Cela a fait de lui le mentor le plus efficace pour tous ceux qui ont eu la chance d'être ses étudiants. Ses discussions et ses conférences, depuis l'époque où il était étudiant à Pise jusqu'à aujourd'hui, étaient aussi passionnantes dans leur contenu qu'elles étaient indéterminées dans le temps et la durée – une sorte de principe d'Heisenberg humain. Chaque aspect devait être décortiqué de fond en comble pour être satisfaisant, peu importe le temps que cela prenait.





The Leonardo building. Alfonso's office was above the Italian flag. Photo by Nicola Seriani | Le bâtiment Leonardo. Le bureau d'Alfonso se trouvait au-dessus du drapeau italien. Photo de Nicola Seriani.

for anybody who had the good fortune to be his student. His discussions and lectures, from his student times in Pisa to this day, were as enthralling in their content as they were undetermined in time and duration—a sort of human Heisenberg principle. Every aspect had to be unravelled inside out to satisfaction, never mind how long it took.

In summary, besides his really fundamental physics contributions, Alfonso and his life stand as a monument to mentorship and scientific discourse. Who knows when another one like him will reappear, if ever.

Farewell, Francisco!

En résumé, outre ses contributions à la physique fondamentale, Alfonso et sa vie sont un monument au mentorat et au discours scientifique. Qui sait quand un autre comme lui réapparaîtra, si jamais il réapparaît.

Adieu, Francisco !



# Alfonso Baldereschi: pensieri di 55 anni fa

## Alfonso Baldereschi: pensées d'il y a 55 ans

Massimo Inguscio

A ripercorrere la lista delle Sue pubblicazioni scientifiche si scopre la leggerezza con cui la mente di Alfonso Baldereschi coglieva gli aspetti cruciali di fenomenologie complesse. La capacità di evidenziare l'essenza delle proprietà elettroniche in un cristallo, degli effetti di impurezze e disordine, della dimensionalità, mostra una chiarezza confrontabile a quella di Franco Bassani, Suo maestro e mio amico di una vita. Queste lucide analisi consentono oggi di simulare sperimentalmente la fenomenologia dei solidi con atomi ultra-freddi intrappolati in cristalli di luce, quasi fosse fisica computazionale. Ma ho accettato commosso l'invito a contribuire al ricordo dello scienziato stimolato piuttosto dal ricordo sempre vivo delle Sue qualità umane, subito evidenti nel 1969. Erano quelli momenti di disordine nelle università e in Normale affidavamo molte speranze al corso di Fisica che avrebbe tenuto il Professor Radicati, cosa che appunto fece agli inizi del 1969, di ritorno dagli Stati Uniti. Il livello del corso era altissimo – molti di noi appena usciti dal liceo ricordano l'incipit formale ed elevato: "sia  $\mathcal{L}$  una funzione di  $q$ ,  $\dot{q}$  e  $t...$ " –, ma per i chiarimenti avevamo come esercitatori tre giovani perfezionandi che si sarebbero rivelati tutti di grosso calibro: Baldereschi, Barbieri e Tosatti. Ricordo la chiarezza e il grande senso fisico con cui Alfonso approfondiva, chiariva e, anche con senso dello *humor*, ci coinvolgeva nell'entusiasmo per la nuova avventura. Da professionista dedicava agli incontri tutto il tempo necessario, organizzando il calendario quasi di volta in volta. Questo lo rendeva ai miei occhi umano e simpatico, dando un messaggio di normalità di vita nel clima della scuola. Non so, i Suoi impegni erano ad esempio una partita di tennis: lo ricordo arrivare in Piazza dei Cavalieri su una spider nera decappottabile, forse una Fiat 124, con una racchetta in evidenza sul sedile posteriore.

En parcourant la liste de ses publications scientifiques, on découvre la légèreté avec laquelle l'esprit d'Alfonso Baldereschi saisissait les aspects cruciaux de phénomènes complexes. Sa capacité à mettre en évidence l'essence des propriétés électroniques dans un cristal, des effets d'impuretés et de désordre, ainsi que de la dimensionnalité, montre une clarté comparable à celle de Franco Bassani, son maître et mon ami de toujours. Ces analyses lucides permettent aujourd'hui de simuler expérimentalement la phénoménologie des solides avec des atomes ultrafroids piégés dans des cristaux de lumière, presque comme s'il s'agissait de physique computationnelle. Mais si j'ai accepté avec émotion l'invitation à contribuer à la mémoire de ce scientifique, c'est plutôt stimulé par le souvenir toujours vivant de ses qualités humaines, immédiatement évidentes dès 1969. C'étaient des moments de désordre dans les universités, et à la Normale, nous nourrissions beaucoup d'espoirs sur le cours de physique que donnerait le Professeur Radicati, ce qu'il fit effectivement début 1969 à son retour des États-Unis. Le niveau du cours était très élevé – beaucoup d'entre nous, à peine sortis du lycée, se souviennent de l'incipit formel et élevé « soit  $\mathcal{L}$  une fonction de  $q$ ,  $\dot{q}$  et  $t...$  » –, mais pour les éclaircissements, nous avions comme assistants trois jeunes chercheurs qui se sont tous révélés d'un grand calibre : Baldereschi, Barbieri et Tosatti. Je me souviens de la clarté et du grand sens physique avec lesquels Alfonso approfondissait, clarifiait et, avec humour, nous impliquait dans l'enthousiasme pour cette nouvelle aventure. En tant que professionnel, il consacrait à nos rencontres tout le temps nécessaire, organisant son emploi du temps presque au fur et à mesure. Cela le rendait à mes yeux humain et sympathique, transmettant un message de normalité dans le climat de l'école. Je ne sais pas, ses engagements étaient par exemple une partie de tennis ; je

Della varietà della Sua vita avevamo una qualche evidenza dal metodo che usava per comunicarci gli orari delle lezioni. Tracciava col gesso il calendario di qualche giorno sulla lavagna del Suo studio, che era ricavato con pareti divisorie in legno al primo o secondo piano della scuola. Si trattava di un piacevole labirinto di cultura giovane e per orientarci a volte ci aiutava la dolce melodia di un flauto dolce. Erano gli "esercizi" di Erio Tosatti, che con Alfonso Baldereschi condivideva lo spazio. Mi è rimasto impresso il giorno in cui sulla lavagna, credo a metà mattinata, era scritto "matrimonio". Più sotto, nel pomeriggio, erano regolarmente segnate le ore di esercitazione. Pensammo quindi che si trattasse del matrimonio di qualche amico... sapemmo poi che era il Suo!

me souviens de lui arrivait sur la Piazza dei Cavalieri dans une Spider noire décapotable, peut-être une Fiat 124, avec une raquette bien en vue sur le siège arrière. De la variété de sa vie, nous avons une certaine idée grâce à la méthode qu'il utilisait pour nous communiquer les horaires de cours. Il traçait à la craie le calendrier de quelques jours sur le tableau noir de son bureau, qui était aménagé avec des cloisons en bois au premier ou au deuxième étage de l'école. C'était un agréable labyrinthe de culture jeune, et pour nous orienter, la douce mélodie d'une flûte à bec nous aidait parfois. C'étaient les « exercices » d'Erio Tosatti, qui partageait l'espace avec Alfonso Baldereschi. Le jour où j'ai vu écrit sur le tableau noir, je crois vers la mi-matinée, le mot « mariage », m'est resté en mémoire. Plus bas, dans l'après-midi, les heures de travaux pratiques étaient régulièrement indiquées. Nous avons donc pensé qu'il s'agissait du mariage d'un ami... nous avons ensuite su que c'était le sien !

## How I remember Alfonso

## Comment je me souviens d'Alfonso

---

Flavio Toigo

---

On the evening of last April 23<sup>rd</sup>, Stefano Baroni's call to inform me that Alfonso had passed away the previous day let me revisit some of the many times our lives had crossed.

I met Alfonso in the summer of 1968, when, with a fellowship from the Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), I entered the newly born group of Franco Bassani in Pisa: Alfonso and Erio Tosatti, both *perfezionandi* at the Scuola Normale, were already engaged in research and I had the chance to attend many meetings with Professor Bassani,

Dans la soirée du 23 avril dernier, l'appel de Stefano Baroni m'informant qu'Alfonso était décédé la veille m'a permis de revisiter quelques-unes des nombreuses fois où nos vies se sont croisées.

J'ai rencontré Alfonso au cours de l'été 1968, lorsque, grâce à une bourse du Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), je suis entré dans le nouveau groupe de Franco Bassani à Pise : Alfonso et Erio Tosatti, tous deux *perfezionandi* à la Scuola Normale, étaient déjà engagés dans la recherche et j'ai eu la chance d'assister à de nombreuses réunions avec le Professeur

where they were exposing the advances in their research projects, receiving approval most of the time and advice when hitting some particularly hard difficulty. In a short time, I established a good friendship with both of them, fascinated by their intellectual stature and by their warm, although different, personalities.

After leaving Pisa, while I was spending two years as a research associate at Michigan State University in East Lansing (MI), Alfonso—then a researcher at Bell Labs—invited me to visit him in Murray Hill (NJ) with my wife and son. While spending a couple of days there, besides his intellectual sharpness which I already knew, I could appreciate his warm kindness. Later, I met Alfonso rather often in Trieste (or in the train from Padua to Trieste), where he had become Chair Professor of *Struttura della Materia* at the very early age of 34, and where I was often a visitor at the International Centre for Theoretical Physics (ICTP) or taught some course at the then newly established Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), which had soon gained the status of an independent institution, evolving from the Advanced School of Physics in 1978.

Although I never collaborated directly with Alfonso, I had the chance to maintain our good friendship and to exchange ideas with him on various subjects, not only on physics. I enjoyed his conversations which, on any subject, followed a strict logical thread accompanied by a subtle sense of humor and were often concluded with the hint of a smile.

All those who have been in touch with Alfonso, students and colleagues as well, testify that his lectures and seminars were delivered with an extremely clear language, spoken in block letters, I would say, taking as long as needed to clarify any tiny aspect of the subject at hand. This was the result of Alfonso's deep knowledge of the subject he was discussing and of the extreme care with which he prepared his talks, conscious that the transmission of his knowledge is one of the important missions of a scientist.

The quality and number of his former students, who contributed to the Italian-Swiss Workshop on High

Bassani, où ils exposaient les avancées de leurs projets de recherche, recevant la plupart du temps une approbation et des conseils lorsqu'ils se heurtaient à des difficultés particulièrement ardues. En peu de temps, j'ai établi une bonne relation d'amitié avec eux deux, fasciné par leur stature intellectuelle et leurs personnalités chaleureuses, bien que différentes.

Après avoir quitté Pise, alors que je passais deux ans en tant qu'associé de recherche à la Michigan State University à East Lansing (MI), Alfonso, alors chercheur aux Bell Labs, m'a invité à lui rendre visite à Murray Hill (NJ) avec ma femme et mon fils. En y passant quelques jours, outre son acuité intellectuelle que je connaissais déjà, j'ai pu apprécier sa chaleureuse gentillesse. Plus tard, j'ai rencontré Alfonso assez souvent à Trieste (ou dans le train de Padoue à Trieste), où il était devenu professeur de *Struttura della Materia* à l'âge très précoce de 34 ans, et où j'étais souvent visiteur au Centre international de physique théorique (ICTP) ou donnais des cours à la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), alors nouvellement créée, qui a rapidement acquis le statut d'institution indépendante, issue de la Scuola Avanzata di Fisica en 1978.

Bien que je n'aie jamais collaboré directement avec Alfonso, j'ai eu la chance d'entretenir notre bonne amitié et d'échanger des idées avec lui sur divers sujets, et pas seulement sur la physique. J'ai apprécié ses conversations qui, sur n'importe quel sujet, suivaient un fil logique strict accompagné d'un sens subtil de l'humour et se terminaient souvent par un sourire.

Tous ceux qui ont été en contact avec Alfonso, qu'ils soient étudiants ou collègues, témoignent que ses cours et séminaires étaient présentés dans un langage extrêmement clair, exprimé en lettres majuscules, dirais-je, prenant le temps nécessaire pour clarifier le moindre aspect du sujet traité. C'était le résultat de la profonde connaissance qu'Alfonso avait du sujet qu'il abordait et du soin extrême avec lequel il préparait ses exposés, conscient que la transmission de son savoir est l'une des missions importantes d'un scientifique.

La qualité et le nombre de ses anciens étudiants, qui ont contribué à l'Italian-Swiss Workshop on High

Performance Computing in Materials Science held in September 2006 in Palau (Sardinia) to celebrate his 60<sup>th</sup> birthday, testify Alfonso's effectiveness as a teacher and success as a mentor, while the logo on the T-shirt of the meeting celebrates one of his first and everlasting scientific contributions: the Baldereschi point.

As a last point enlightening Alfonso's personality, I wish to remember his open-mindedness in the appreciation of good scientific work also in fields not closely connected to his direct investigations. This quality was clear whenever he discussed some newly published result and, as I directly witnessed on more than one occasion, emerged when he was called to be a member of some committee for the evaluation of scientific projects or for some national competition to positions of university professor.

For all the above qualities, both the Swiss and the Italian communities of scientists will miss Alfonso, and much more so those of us who have enjoyed not only his knowledge, but also his friendship.

Performance Computing in Materials Science qui s'est tenue en Sardaigne à Palau en septembre 2006 pour célébrer son 60<sup>e</sup> anniversaire, témoignent de l'efficacité d'Alfonso en tant qu'enseignant et de son succès en tant que mentor, tandis que le logo figurant sur le T-shirt de la réunion célèbre l'une de ses premières et éternelles contributions scientifiques : le point de Baldereschi.

Pour conclure sur la personnalité d'Alfonso, je voudrais rappeler son ouverture d'esprit dans l'appréciation du bon travail scientifique, y compris dans des domaines qui ne sont pas étroitement liés à ses recherches directes. Cette qualité était évidente chaque fois qu'il discutait d'un résultat nouvellement publié et, comme j'en ai été le témoin direct plus d'une fois, elle se manifestait lorsqu'il était appelé à faire partie d'un comité d'évaluation de projets scientifiques ou d'un concours national pour des postes de professeur d'université.

Pour toutes ces qualités, Alfonso manquera aux communautés scientifiques suisse et italienne, et plus encore à ceux d'entre nous qui ont bénéficié non seulement de ses connaissances, mais aussi de son amitié.

## In ricordo di Alfonso (Pisa, Losanna e Messina) En mémoire d'Alfonso (Pise, Lausanne et Messine)

---

**Raffaello Girlanda**

---

Premetto che non dirò di Alfonso scienziato, meglio di me lo farà chi con lui ha collaborato scientificamente, ma cercherò di evocare alcuni tratti di Alfonso persona, che ho avuto occasione di osservare durante soggiorni comuni a Pisa, Losanna e Messina.

Je précise que je ne dirai pas d'Alfonso, le scientifique – ceux qui ont collaboré scientifiquement avec lui le feront mieux que moi – mais j'essaierai d'évoquer quelques traits d'Alfonso la personne, comme j'ai eu l'occasion de l'observer au cours de séjours conjoints à Pise, Lausanne et Messine.

Degli incontri con Alfonso ricordo il suo atteggiamento nei modi e nello sguardo che in prima istanza poteva apparire scostante, ma dopo poco risultava invece manifestazione di interesse per tutto quello che avveniva, cordialità e attenzione verso l'altro. Ora con il tempo mi viene in mente di interpretarlo come una manifestazione di curiosità e attenzione verso la realtà circostante.

Ho conosciuto Alfonso a Pisa quando, dopo la laurea, ho raggiunto il Professor Bassani da Messina e ho frequentato la scuola di specializzazione in Fisica delle Particelle Elementari e Struttura della Materia presso l'università. In quel periodo ho incontrato spesso Alfonso, Erio, Liana, Emilio, Giuseppe, Flavio... e ho condiviso con tutto il gruppo Bassani la vita dell'Istituto di Fisica di Piazza Torricelli. Successivamente le nostre strade si sono divise e io sono tornato a Messina. Comunque, ho continuato a tenere rapporti stretti con il gruppo di Pisa, mantenendo viva la collaborazione scientifica.

Ho incontrato di nuovo Alfonso a Losanna, durante le mie permanenze in Svizzera in occasione della mia collaborazione con Antonio Quattrapani. In quelle occasioni ho avuto modo di apprezzare l'atteggiamento di Alfonso verso ogni tipo di impegno che decideva assumersi. Oltre agli incarichi legati al suo ruolo di docente, svolti sempre con dedizione e precisione, si applicava con zelo anche a mansioni ben lontane dall'insegnamento, come quella di coordinare (se ricordo bene) la sicurezza della struttura in caso di calamità, con relative esercitazioni periodiche.

Ho avuto anche l'occasione di gustare, insieme a colleghi e amici durante alcuni incontri conviviali, l'ottimo rum che riusciva a procurarsi.

Vorrei chiudere questo mio omaggio ad Alfonso ricordando un episodio che è ancora vivo in me e che ho piacere di condividere con chi leggerà queste brevi note. Ho avuto occasione di incontrare Alfonso anche durante alcune sue visite all'Istituto di Struttura della Materia dell'Università di Messina e a convegni a Taormina. Durante uno di questi soggiorni abbiamo fatto una gita su un isolotto della costa di Taormina insieme a un gruppo di "alunni" messinesi e pisani di

Des rencontres avec Alfonso, je me souviens de son attitude, de ses traits et de son regard, qui, au début, pouvait sembler peu amical, mais qui, après un certain temps, s'est avéré être une manifestation d'intérêt pour tout ce qui se passait, d'amabilité et d'attention aux autres. Aujourd'hui, avec le temps, je l'interprète comme une manifestation de curiosité et d'attention à l'égard de la réalité environnante.

J'ai rencontré Alfonso à Pise lorsque j'ai rejoint le Professeur Bassani de Messine après mon diplôme et que j'ai suivi l'école de spécialisation en physique des particules élémentaires et en structure de la matière à l'université. À cette époque, j'ai souvent rencontré Alfonso, Erio, Liana, Emilio, Giuseppe, Flavio... et j'ai partagé avec tout le groupe de Bassani la vie de l'Institut de physique de la place Torricelli. Plus tard, nos chemins se sont séparés et je suis retourné à Messine. Cependant, j'ai continué à entretenir des relations étroites avec le groupe de Pise, en maintenant vivante la collaboration scientifique.

J'ai de nouveau rencontré Alfonso à Lausanne lors de mes séjours en Suisse, lorsque je collaborais avec Antonio Quattrapani. À cette occasion, j'ai pu apprécier l'attitude d'Alfonso face à tout type d'engagement qu'il décidait de prendre. Outre les missions liées à son rôle d'enseignant, qu'il a toujours accomplies avec dévouement et précision, il a également assumé des missions très éloignées de son rôle d'enseignant, telles que la coordination (si je me souviens bien) de la sécurité de l'établissement en cas de catastrophe, avec les exercices périodiques correspondants.

J'ai également eu l'occasion de déguster avec des collègues et des amis, lors de réunions conviviales, l'excellent rhum qu'il parvenait à se procurer.

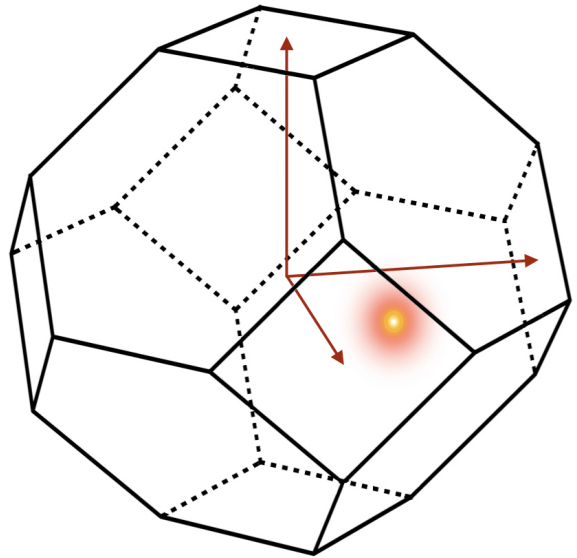
Je voudrais terminer cet hommage à Alfonso en rappelant un épisode qui est toujours vivant en moi et que je suis heureux de partager avec ceux qui vont lire ces brèves notes. Nous avons également eu l'occasion de nous rencontrer lors de certaines de ses visites à l'Istituto di Struttura della Materia de l'Università di Messina et lors de conférences à Taormine. À l'occasion de l'une de ces visites, nous nous sommes rendus sur une petite île de la côte de Taormine avec un groupe d'« élèves » de Franco Bassani de Messine et

Franco Bassani, invitati da una collega messinese che ci ha accolto nella sua casa per una cena. Per raggiungere l'isolotto abbiamo dovuto fare una breve traversata su una barca da pesca condotta da un esperto rematore, che ha curato il trasbordo di noi tutti in più riprese. Ricordo Alfonso molto divertito dalla situazione e attento a ogni evento. La serata ha avuto un prosieguo in un locale di Taormina, dove abbiamo ascoltato dell'ottima musica eseguita da un bravo pianista. Abbiamo concluso la giornata, al ritorno a Messina, ricordando i tempi pisani. In quell'occasione Alfonso mi ha raccontato del suo soggiorno negli Stati Uniti e del suo incontro con Nunzio Lipari (che non spetta a me raccontare), sorseggiando un caffè tonificante, visto che era sopraggiunta l'alba.

de Pise, invités par une collègue de Messine qui nous a accueillis chez elle pour le dîner. Pour atteindre l'îlot, nous avons dû faire une courte traversée sur un bateau de pêche conduit par un rameur expérimenté, qui s'est occupé de notre transfert à plusieurs reprises. Je me souviens d'Alfonso qui était très amusé par la situation et attentif à chaque événement. La soirée s'est poursuivie dans un club de Taormine où nous avons écouté l'excellente musique d'un bon pianiste. Nous avons terminé la journée, de retour à Messine, en évoquant notre séjour à Pise ; à cette occasion, Alfonso m'a parlé de son séjour aux États-Unis et de sa rencontre avec Nunzio Lipari (ce n'est pas à moi de la raconter), tout en sirotant un café revigorant, alors que l'aube venait de se lever.



# Une étoile montante en Amérique





# Alfonso Baldereschi: ingenious scientist, inspiring collaborator, lifetime friend

## Alfonso Baldereschi: scientifique ingénieux, collaborateur inspirant, ami de toute une vie

---

Nunzio O. Lipari

---

The first time I met Alfonso was in March 1970 at the University of Illinois in Urbana-Champaign. I was 25 years old (born 01/01/1945) and Alfonso was not even 24 (born 24/09/1946). It was a life-changing experience that made me a better scientist and a better person. To illustrate these changes, first I will briefly describe my life before meeting Alfonso. Then I will present the most important experiences through which Alfonso significantly improved my life both professional as well as personal.

I was born and raised in Ali Terme, a little town in the province of Messina, Italy. My parents were farmers and I was the youngest of three brothers. As far as I can remember, I always liked to learn new things; I did well in school, especially in the scientific disciplines like math and physics. As a result, after finishing the scientific lyceum, I chose to study physics at the University of Messina. Less than four years later I graduated and was offered and accepted a full grant to pursue a PhD in physics at Lehigh University in Bethlehem, PA, in the group of Professor W. Beall Fowler

La première fois que j'ai rencontré Alfonso, c'était en mars 1970 à l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign. J'avais 25 ans (né le 01/01/1945) et Alfonso n'avait même pas 24 ans (né le 24/09/1946). Cette expérience a changé ma vie et a fait de moi un meilleur scientifique et une meilleure personne. Pour illustrer ces changements, je commencerai par décrire brièvement ma vie avant de rencontrer Alfonso. Ensuite, je présenterai les expériences les plus importantes qui ont permis à Alfonso d'améliorer considérablement ma vie, tant sur le plan professionnel que personnel.

Je suis né et j'ai grandi à Ali Terme, une petite ville de la province de Messine, en Italie. Mes parents étaient agriculteurs et j'étais le plus jeune de trois frères. D'aussi loin que je me souviens, j'ai toujours aimé apprendre de nouvelles choses ; j'avais de bons résultats à l'école, en particulier dans les disciplines scientifiques comme les mathématiques et la physique. Par conséquent, après avoir terminé le lycée scientifique, j'ai choisi la physique à l'Université de



Pictures of Alfonso (left) and Nunzio (right) taken in 1970 | Photos d'Alfonso (à gauche) et de Nunzio (à droite) prises en 1970.

as a research assistant. Despite the many anxieties of my first travel out of Sicily, my poor knowledge of English, my insecurities, and the unknown about the future, on September 5, 1967, I left Italy for the USA. By January of 1970, I had completed all the requirements for the PhD including the thesis on the "Effect of electronic correlation on the energy bands of insulating crystals."

I was offered and accepted a postdoctoral appointment of two years at the Physics Department of the University of Illinois in Urbana-Champaign, one of the best of the country in the solid-state science area at that time. On my first day there, March 1, 1970, I saw the list with pictures of all the members of the faculty and research associates of the department. The faculty was like a who's who of internationally known physicists, starting with John Bardeen, David Pines, and others. In the research associates' list, Alfonso Baldereschi, the only Italian-sounding name, attracted my attention. The next day I went to meet him. We spoke for many hours learning about each other's past. He was the first student of Professor Franco Bassani at the Scuola Normale in Pisa, widely recognized as the best higher learning center in Italy.

Messine. Moins de quatre ans plus tard, j'ai obtenu mon diplôme et on m'a offert une bourse entièrement financée, que j'ai acceptée, pour poursuivre un doctorat en physique à l'Université de Lehigh à Bethlehem, en Pennsylvanie, dans le groupe du Professeur W. Beall Fowler, en tant qu'assistant de recherche. Malgré les nombreuses inquiétudes liées à mon premier voyage hors de Sicile, à ma faible connaissance de l'anglais, à mes doutes et à l'inconnu de l'avenir, j'ai quitté l'Italie pour les États-Unis le 5 septembre 1967. En janvier 1970, j'avais rempli toutes les conditions requises pour le doctorat, y compris une thèse sur « L'effet de la corrélation électronique sur les bandes d'énergie des cristaux isolants ».

On m'a proposé, et j'ai accepté, un poste postdoctoral de deux ans au Département de physique de l'université de l'Illinois à Urbana-Champaign, l'une des meilleures du pays dans le domaine des sciences de l'état solide à l'époque. Le premier jour, le 1<sup>er</sup> mars 1970, j'ai vu une liste avec les photos de tous les membres de la faculté et des chercheurs associés au Département. La faculté était un véritable *who's who* des physiciens de renommée internationale, à commencer par John Bardeen, David Pines, et d'autres.

Bassani was the same charismatic professor that I had during my first year at the University of Messina and that I would have liked to have as my thesis advisor, had he not left to join the University of Pisa.

It was immediately clear to me that Alfonso was an absolutely exceptional person. The depth of his knowledge was amazing. There was considerable overlap in our scientific interests and so we agreed to meet every day in the afternoon and identify specific common opportunities. Our first joint effort was a new method to investigate the exciton spectrum in diamond and zinc-blende semiconductors. Using symmetry considerations and second-order perturbation theory, we obtained a simple analytical expression for the binding energy as a function of the band parameters. The second joint effort was to reformulate the effective mass Hamiltonian for shallow acceptor impurities using tensor operators. In this way, the Hamiltonian can be written as the sum of a spherical term (spherical model) and a cubic correction. Our interaction, resulting in two 1970 publications in *Physical Review Letters*, had been exceptional both scientifically and for us as friends. Alfonso's approach in collaborating was open, selfless and inspiring.

The length of Alfonso's time at the University of Illinois was very short as he was ready to join Bell Labs on January 1, 1971. We made plans to continue our collaboration on various problems still open in our area of interest. An opportunity to spend a few days with Alfonso and work on the writing of a paper came at Easter of 1971. As I mentioned earlier, I did my PhD at Lehigh University in Bethlehem, PA. During that time, I rented a room in a private house. The landlady, Mrs. Letizia Dalmas, of Italian origin, and her family became like a second home for me. As a result, I would be invited, and gladly accept, to spend the major holidays with them. In this case, when I told her that I was going to see Alfonso, his wife Laura and their new baby Davide, Mrs. Dalmas happily extended the invitation to them, since the distance from Bell Labs in Murray Hill, NJ to Bethlehem, PA was not very far. Everybody enjoyed that visit!

In the second half of 1971, I started thinking about what I would be doing and where after my contract

Dans la liste des chercheurs associés, le nom d'Alfonso Baldereschi, le seul à consonance italienne, a attiré mon attention. Le lendemain, je suis allé le rencontrer. Nous avons discuté pendant des heures, apprenant chacun à connaître le passé de l'autre. Il a été le premier étudiant du Professeur Franco Bassani à la Scuola Normale de Pise, largement reconnue comme étant le meilleur centre d'enseignement supérieur d'Italie. Bassani était le même professeur charismatique que j'avais eu pendant ma première année à l'Université de Messine et que j'aurais aimé avoir comme directeur de thèse, s'il n'était pas parti rejoindre l'Université de Pise.

J'ai tout de suite compris qu'Alfonso était une personne absolument exceptionnelle. La profondeur de ses connaissances était stupéfiante. Nos intérêts scientifiques se chevauchaient considérablement et nous avons donc convenu de nous rencontrer tous les jours dans l'après-midi afin d'identifier des opportunités communes spécifiques. Notre premier travail commun a porté sur une nouvelle méthode d'étude du spectre des excitons dans les semi-conducteurs ayant une structure de type diamant et de type zinc-blende. En utilisant des considérations de symétrie et la théorie des perturbations de second ordre, nous avons obtenu une expression analytique simple pour l'énergie de liaison en fonction des paramètres de bande. Le deuxième effort commun a consisté à reformuler l'hamiltonien de masse effective pour les impuretés de type accepteur peu profondes à l'aide d'opérateurs tensoriels. De cette manière, l'hamiltonien peut être écrit comme la somme d'un terme sphérique (modèle sphérique) et d'une correction cubique. Notre interaction, qui a donné lieu à deux publications en 1970 dans *Physical Review Letters*, a été exceptionnelle tant sur le plan scientifique que sur le plan amical. L'approche d'Alfonso en matière de collaboration était ouverte, désintéressée et inspirante.

La durée du séjour d'Alfonso à l'Université de l'Illinois a été très courte, car il était prêt à rejoindre les Laboratoires Bell (Bell Labs) le 1<sup>er</sup> janvier 1971. Nous avons prévu de poursuivre notre collaboration pour divers problèmes encore ouverts dans notre domaine d'intérêt. L'occasion de passer quelques jours avec Alfonso et de travailler à la rédaction d'un article s'est présentée à Pâques 1971. Comme je l'ai déjà



On the left photo Alfonso, his wife Laura and son Davide are shown during the visit to Bethlehem, PA in 1971. On the right photo myself (in front of Alfonso), Mrs. Dalmás (left of Alfonso) and members of her family are also included | Sur la photo de gauche, Alfonso, sa femme Laura et son fils Davide sont représentés lors de leur visite à Bethlehem, en Pennsylvanie, en 1971. Sur la photo de droite, moi-même (devant Alfonso), M<sup>me</sup> Dalmás (à gauche d'Alfonso) et des membres de sa famille sommes également présents.

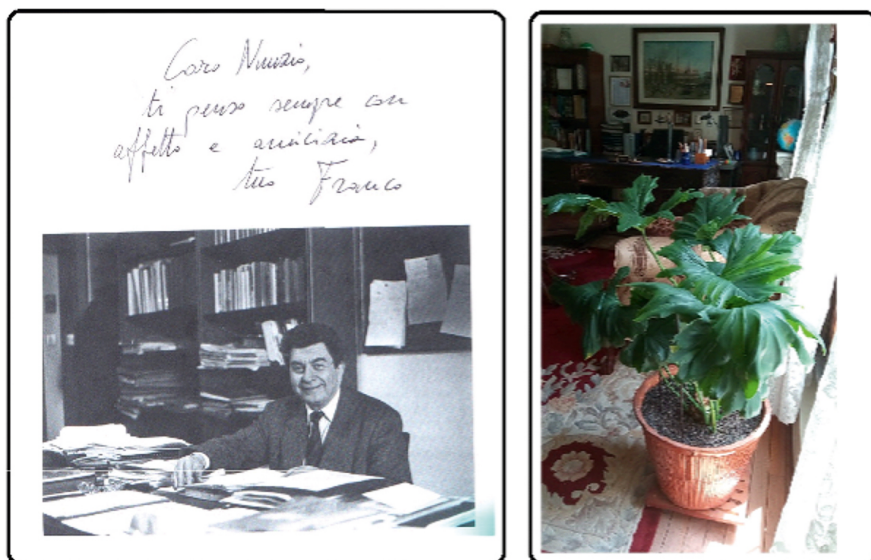
with the University of Illinois would expire in February 1972. Naturally, Alfonso was the first person I asked for and got sound and trusted advice. Given the fact that the opportunities were much more promising for me in the USA, I applied to a number of well-known companies such as Xerox, Bell Labs, RCA, etc. Xerox, at that time considered one of the best companies in the world, was the first to answer. I went to the usual interview, made two visits, and was hired! There is no doubt in my mind that the work done with Alfonso significantly elevated my chances of success.

I joined Xerox in Rochester, NY on March 1, 1972. During a visit to Prof. David Dexter at the Physics Department of the University of Rochester, I was informed that he had a research associate from the University of Rome named Massimo Altarelli. I met Massimo and discovered that he had also graduated under Professor Bassani! Massimo was also very knowledgeable, pleasant, and easy to work with. Before long we started a very fruitful long-term collaboration leading to a comprehensive approach to impurities as well as to excitons in semiconductors.

mentionné, j'ai passé mon doctorat à l'université de Lehigh à Bethlehem, en Pennsylvanie. Pendant cette période, j'avais loué une chambre dans une maison privée. La propriétaire, M<sup>me</sup> Letizia Dalmás, d'origine italienne, et sa famille sont devenues comme une seconde famille pour moi. Par conséquent, j'étais invité, et j'acceptais volontiers, à passer les grandes fêtes avec eux. En l'occurrence, lorsque je lui ai dit que j'allais voir Alfonso, sa femme Laura et leur nouveau bébé Davide, M<sup>me</sup> Dalmás a été heureuse de les inclure également dans l'invitation, car les Bell Labs de Murray Hill (New Jersey) et Bethlehem (Pennsylvanie) n'étaient pas très éloignés l'un de l'autre. Tout le monde a apprécié cette visite !

Au cours du second semestre de 1971, j'ai commencé à réfléchir à ce que je ferais après l'expiration de mon contrat avec l'Université de l'Illinois en février 1972. Naturellement, Alfonso a été la première personne à qui j'ai demandé, et de qui j'ai obtenu, des conseils avisés et fiables. Étant donné que les opportunités étaient beaucoup plus prometteuses aux États-Unis, j'ai posé ma candidature auprès d'un certain nombre





Memories of Franco Bassani. On the left picture, a signed dedication on a book in his honor celebrating his 72<sup>nd</sup> birthday; on the right, a picture taken in 2024 in my home studio in Baldwinsville, NY, of a philodendron plant, still beautiful and healthy, given to me by Franco during a visit to my house in Putnam Valley, NY, back in 1980! | Souvenirs de Franco Bassani. À gauche, une photo d'une dédicace sur un livre en son honneur célébrant son 72<sup>e</sup> anniversaire; à droite, une photo prise en 2024 dans mon studio à Baldwinsville, NY, d'un philodendron, toujours beau et en bonne santé, que Franco m'avait offert lors d'une visite dans ma maison de Putnam Valley, NY, en 1980!

Over the next few years, I met and collaborated with several other members of the "Bassani School" including Erio Tosatti, Luciano Pietronero, and Wanda Andreoni. Finally, I also met Franco Bassani himself, the realization of a very important dream, proud to be "adopted" as a member of the "Bassani School".

In 1977, I left Xerox and joined IBM because it was more in tune with my current and long-term areas of interest. The close scientific collaborations with Alfonso that lasted from 1970 to 1980 had led to profound positive changes in me: less insecure, more comfortable in interacting openly and selflessly. In 1981, I was chosen for a one-year assignment working with the director of IBM Research on the review and evaluation of IBM's scientific activities. Science-technology transfers became my main area of interest. For the next 12 years, I worked in various IBM organizations, from research to development, manufacturing, and marketing in order to identify the key elements that optimize the entire process. During those years, I had several opportunities to

d'entreprises bien connues telles que Xerox, Bell Labs, RCA, etc. Xerox, considérée à l'époque comme l'une des meilleures entreprises au monde, a été la première à répondre. J'ai passé l'entretien habituel, deux visites, et j'ai été embauché ! Il ne fait aucun doute dans mon esprit que le travail effectué avec Alfonso a considérablement augmenté mes chances de réussite.

J'ai rejoint Xerox à Rochester, NY, le 1<sup>er</sup> mars 1972. Lors d'une visite au professeur David Dexter du Département de physique de l'Université de Rochester, on m'a informé qu'il avait un associé de recherche de l'Université de Rome nommé Massimo Altarelli. J'ai rencontré Massimo et j'ai découvert qu'il avait lui aussi obtenu son diplôme avec le Professeur Bassani ! Massimo était également très compétent, agréable et il était facile de travailler avec lui. Nous avons rapidement entamé une collaboration à long terme très fructueuse qui a débouché sur une approche globale des impuretés et des excitons dans les semi-conducteurs. Au cours des années suivantes, j'ai rencontré et collaboré avec plusieurs autres membres de l'« école



Photo taken in 2011 in Lausanne. From the left: Erio, Alfonso, and me | Photo prise en 2011 à Lausanne. De gauche à droite: Erio, Alfonso et moi.

host Alfonso in my home while he was visiting the USA for various work engagements. It was always a real pleasure to discuss with him our current activities, ask for his advice, get updates about our common friends, listen to the music that we both enjoyed (Paolo Conte, Leonard Cohen, Franco Battiato...).

In 1993, I took a bridge to early retirement from IBM and, using my long experience in the academic and industrial worlds, I started a small company, Lipari International Consulting, working with various universities and industries in the USA and in Italy in identifying and developing the skills of scientists necessary to be successful in the industries of the 21<sup>st</sup> century. This activity also gave me many opportunities to continue to see Alfonso in several places around the world and continue to enjoy our friendship. The last time I saw Alfonso was in 2011, in Lausanne, for the celebration of his retirement from his professorship at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), organized by his collaborators.

Bassani », notamment Erio Tosatti, Luciano Pietronero et Wanda Andreoni. Enfin, j'ai également rencontré Franco Bassani, la réalisation d'un rêve très important, fier d'être « adopté » en tant que membre de « l'école Bassani ».

En 1977, j'ai quitté Xerox pour rejoindre IBM, car cela correspondait mieux à mes centres d'intérêt de l'époque et à long terme. Les étroites collaborations scientifiques avec Alfonso, qui ont duré de 1970 à 1980, ont entraîné de profonds changements positifs en moi : plus de confiance en moi, plus à l'aise pour interagir ouvertement et de manière désintéressée. En 1981, j'ai été choisi pour travailler pendant un an avec le directeur d'IBM Research à la révision et à l'évaluation des activités scientifiques d'IBM. Les transferts entre les domaines scientifique et technologique sont devenus mon principal domaine d'intérêt. Au cours des 12 années suivantes, j'ai travaillé dans diverses organisations d'IBM, de la recherche au développement, en passant par la fabrication et le marketing, afin d'identifier les éléments clés qui optimisent l'ensemble du processus. Au cours de ces années, j'ai eu plusieurs fois l'occasion d'accueillir Alfonso chez moi lorsqu'il était en visite aux États-Unis pour divers engagements professionnels. C'était toujours un réel plaisir de discuter avec lui de nos activités en cours, de lui demander des conseils, de prendre des nouvelles de nos amis communs, d'écouter la musique que nous aimions tous les deux (Paolo Conte, Leonard Cohen, Franco Battiato...).

En 1993, j'ai pris une retraite anticipée chez IBM et, fort de ma longue expérience dans le monde universitaire et industriel, j'ai créé une petite entreprise, Lipari International Consulting, qui travaille avec diverses universités et industries aux États-Unis et en Italie pour identifier et développer les compétences des scientifiques nécessaires pour réussir dans les industries du 21<sup>e</sup> siècle. Cette activité m'a également donné de nombreuses occasions de continuer à voir Alfonso dans plusieurs endroits du monde et de continuer à profiter de notre amitié. La dernière fois que j'ai vu Alfonso, c'était en 2011, à Lausanne, à l'occasion de la célébration de son départ à la retraite de son poste de professeur à l'EPFL, organisée par ses collaborateurs.

The news of Alfonso's passing on April 22, 2024, left me and all his colleagues and friends stunned and shocked. It is taking me some time to adjust to this change.

Thank you, Alfonso, for the pleasure of knowing you, being inspired by you, working with you, and becoming your lifelong friend, thus creating a river of life-enriching experiences and memories. You will be highly missed and never forgotten.

La nouvelle du décès d'Alfonso, le 22 avril 2024, m'a laissé, ainsi que tous ses collègues et amis, abasourdi et choqué. Il me faut un certain temps pour m'adapter à ce changement.

Merci Alfonso pour le plaisir de t'avoir connu, d'avoir été inspiré par toi, d'avoir travaillé avec toi et d'être devenu ton ami pour la vie, créant ainsi une rivière d'expériences et de souvenirs enrichissants. Tu nous manqueras beaucoup et nous ne t'oublierons jamais.

## Bell Labs days Les jours à Bell Labs

---

**James C. Phillips**

---

Alfonso Baldereschi was a member of the technical staff at Bell Labs in Murray Hill (NJ) for two years, from 1971 to 1973. Semiconductors have been at the center of modern electronics and optics since the invention of the transistor in 1946 and the successful manufacture of internet lasers after 2000, both at Bell Labs. Baldereschi had very wide interests and he applied his ingenuity to inventing simple models to discuss their opto-electronic structure. While at Bell he invented his mean-value point, which gives a remarkably good approximation to optical properties averaged across the Brillouin zone for a cubic lattice. At that time, sampling the entire Brillouin zone was still computationally expensive. Moreover, no one had thought that such a good average could be obtained from only one point! Today it is known as the Baldereschi point.

While at Bell Labs, Alfonso wrote two more papers on semiconductors. He continued to study semiconductors after he returned to Lausanne and Trieste, and he published many more papers on this complex subject.

Alfonso Baldereschi a été membre du personnel technique des Bell Labs, à Murray Hill (NJ), pendant deux ans, de 1971 à 1973. Les semi-conducteurs sont au cœur de l'électronique et de l'optique modernes depuis l'invention du transistor en 1946 et la fabrication réussie de lasers Internet après 2000, tous deux aux Bell Labs. Baldereschi avait des intérêts très variés et il a appliqué son ingéniosité à l'invention de modèles simples pour discuter de leur structure opto-électronique. Alors qu'il travaillait chez Bell, il a inventé son point de valeur moyenne, qui donne une approximation remarquablement bonne des propriétés optiques moyennées dans la zone de Brillouin pour un réseau cubique. À l'époque, l'échantillonnage de l'ensemble de la zone de Brillouin était encore coûteux sur le plan computationnel. De plus, personne n'avait pensé qu'une moyenne aussi bonne pouvait être obtenue à partir d'un seul point ! Aujourd'hui, ce point est connu sous le nom de point de Baldereschi.

Pendant qu'il travaillait aux Bell Labs, Alfonso a rédigé deux autres articles sur les semi-conducteurs.

In reviewing this subject, I came across a 2024 paper on arXiv by Vladan Stevanović presenting “A Python code for calculating the mean-value (Baldereschi’s) point for any crystal structure”. In 2020, Vladan Stevanović won an NSF CAREER Award for work to discover new metastable materials. Alfonso Baldereschi’s spirit lives on, in this case in Golden, Colorado, USA.

Il a continué à étudier les semi-conducteurs après son retour à Lausanne et à Trieste, et il a publié de nombreux autres articles sur ce sujet complexe.

En examinant ce sujet, je suis tombé sur un article publié en 2024 sur arXiv par Vladan Stevanović, qui présente « Un code Python pour calculer le point de valeur moyenne (point de Baldereschi) pour n’importe quelle structure cristalline ». En 2020, Vladan Stevanović a reçu un prix CAREER de la NSF pour ses travaux visant à découvrir de nouveaux matériaux métastables. L’esprit d’Alfonso Baldereschi continue de vivre, en l’occurrence à Golden, dans le Colorado, aux États-Unis.

## Alfonso Baldereschi, a scientist of great stature

## Alfonso Baldereschi, un scientifique de grande stature

---

Sokrates T. Pantelides

---

The obituary that appeared in *Physics Today* on August 20, 2024 [1], paints a vivid picture of Alfonso’s stature as a scientist who produced world-class science and also built the foundations for computational physics to thrive at the nascent École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) and later did the same thing in Trieste. The papers that are included in this volume further illustrate his diverse accomplishments. The obituary also describes Alfonso as a charismatic teacher who was highly respected and admired by his students and collaborators, a man of great kindness and generosity. I have had the privilege of knowing Alfonso since the early 1970s and I can attest to all of the above and more. In this short note, I will highlight how I got to know Alfonso, my own interactions with him, and how my own professional life was enriched through

La nécrologie parue dans *Physics Today* le 20 août 2024 [1] brosse un tableau saisissant de la stature d’Alfonso en tant que scientifique qui a produit une science de classe mondiale et a également jeté les bases de l’essor de la physique computationnelle à la jeune École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), avant de faire la même chose à Trieste. Les articles inclus dans ce volume illustrent la diversité de ses réalisations. La notice nécrologique décrit également Alfonso comme un professeur charismatique, très respecté et admiré par ses étudiants et ses collaborateurs, un homme d’une grande gentillesse et d’une grande générosité. J’ai eu le privilège de connaître Alfonso depuis le début des années 1970 et je peux attester de tout ce qui précède et de bien d’autres choses encore. Dans cette courte note, j’expliquerai comment j’ai connu Alfonso, mes propres



them. It may be one man's story, but it exemplifies how Alfonso interacted with scientific colleagues around the world.

I started graduate school at the University of Illinois at Urbana-Champaign in 1969. The Physics Department was enormous. I was one of ~80 first-year graduate students! In addition, a large Materials Research Laboratory was attached to the Physics building. I was interested in semiconductors, but there were no theory professors in that area. I spent the summer of 1970 in a large experimental group whose focus was on the Si-SiO<sub>2</sub> interface and on impurities in silicon. We were located in a different building nearby. I learned about pseudopotential theory, which focused on model pseudopotentials at the time, and got the idea to pursue "first principles" pseudopotential calculations for the shallow donors in silicon. I needed to calculate core wavefunctions of atoms and became aware of the existence of the Herman-Skillman code for self-consistent calculations of the electronic structure. Another experimentalist professor suggested that I talk with Nunzio Lipari, who had arrived at Illinois as a postdoc in March of 1970. Nunzio gave me a deck of computer punch cards [2], and thus began a lifelong friendship.

Alfonso was actually at Illinois sometime in the 1969–1970 period, but I actually can't recall whether I met him there through Nunzio or otherwise. It is more likely that by the time I became aware of his 1970 paper "Valley-orbit interactions in semiconductors" he had already left for Bell Laboratories. The paper was an elegant perturbation-theory treatment of the ground-state splittings of donor impurities in silicon and germanium, which related to what I was doing. I reached out to him at Bell Labs, exchanged a few letters, and, when I defended my thesis in March of 1973, I sent him a copy. He was already at EPFL in Lausanne. I informed him that I would be attending a NATO workshop in Antwerp in June 1973. He invited me to visit EPFL.

My wife Mimi and I visited Lausanne for two days. It was my first professional visit to a European university and a distinct honor to present my thesis work and discuss it at length with Alfonso and others.

interactions avec lui et comment elles ont enrichi ma vie professionnelle. Il s'agit peut-être de l'histoire d'un seul homme, mais elle illustre la façon dont Alfonso interagissait avec ses collègues scientifiques dans le monde entier.

J'ai commencé mes études supérieures à l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign en 1969. Le Département de physique était énorme : nous étions 80 étudiants de première année ! En outre, un grand laboratoire de recherche sur les matériaux était rattaché au bâtiment de physique. Je m'intéressais aux semi-conducteurs, mais il n'y avait pas de professeurs de théorie dans ce domaine. J'ai passé l'été 1970 dans un grand groupe expérimental qui se concentrait sur l'interface Si-SiO<sub>2</sub> et sur les impuretés dans le silicium. Nous étions installés dans un autre bâtiment à proximité. J'ai découvert la théorie des pseudopotentiels, qui se concentrait à l'époque sur les pseudopotentiels modèles, et j'ai eu l'idée de poursuivre des calculs de pseudopotentiels *ab initio* pour les donneurs peu profonds dans le silicium. J'avais besoin de calculer les fonctions d'onde de cœur des atomes et j'ai appris l'existence du code Herman-Skillman pour les calculs autocohérents de la structure électronique d'un atome. Un autre professeur expérimentateur m'a suggéré de parler à Nunzio Lipari, qui était arrivé à l'Université de l'Illinois en tant que postdoctorant en mars 1970. Nunzio m'a donné un paquet de cartes perforées pour ordinateur [2], ce qui a marqué le début d'une amitié qui a duré toute une vie.

Alfonso était en fait à l'Université de l'Illinois entre 1969 et 1970, mais ma mémoire ne me permet pas de dire si je l'ai rencontré là-bas par l'intermédiaire de Nunzio ou d'une autre manière. Il est plus probable qu'au moment où j'ai pris connaissance de son article de 1970 intitulé « Valley-orbit interactions in semiconductors », il était déjà parti pour les Laboratoires Bell. Cet article traitait de manière élégante, dans le cadre de la théorie des perturbations, des séparations énergétiques dans l'état fondamental des impuretés donneurs dans le silicium et le germanium, ce qui était lié à ma recherche. Je l'ai contacté aux Laboratoires Bell, j'ai échangé quelques lettres et, lorsque j'ai soutenu ma thèse en mars 1973, je lui en ai envoyé une copie. Il était déjà à l'EPFL à Lausanne.



Furthermore, we got to experience Alfonso's human side as he hosted a dinner for us at his home, where we met his wife and son. These experiences anchored a lifetime of mutual professional respect and friendship. In 1975 I joined the IBM T. J. Watson Research Center in Yorktown Heights, New York. Sometime in late 1975 or early 1976, Alfonso was in the US, and I asked him to stop at the IBM Center for a visit. He did, even accepting our invitation to spend the night at our house. Both Mimi and I recall warmly the morning of his stay with us—when he came down to the kitchen, we had our usual breakfast of fruit, eggs, breads, and coffee already prepared. His idea of breakfast, however, seemed to be a cigarette and coffee. Being polite, he slowly had a small breakfast as the conversation gradually warmed up.

I need to get back to Nunzio, who left Illinois for Xerox in Rochester (NY) in 1972. In 1976 we recruited him to the IBM Center. In fact, I would say that Nunzio and Alfonso were my portal to the other prominent Italians of our generation, all of whom often made me feel that I was Italian myself. Soon after Nunzio arrived in Yorktown, Jerry Bernholc—my first student (PhD granted by Lund University, in Sweden) who stayed on as a postdoc—and I had decided to plunge into first-principles calculations for “deep-level” point defects using the Green's function method that I advocated for in a *Reviews of Modern Physics* paper that was distributed widely as a preprint and published in 1978 [4]. Nunzio was delighted to join us, and we produced our first paper on the vacancy in silicon, which was also published in 1978 [4]. Virtually identical results, based on the same technique, were reported back-to-back in the same issue by Gene Baraff and Michael Schlüter [5]. That same year, Jim Van Vechten invited Alfonso to spend three summer months at the IBM Research Center. By the time I found out, I had agreed to spend six months at Lund University, in Sweden. Alfonso and I did not overlap in Yorktown, but the visit produced a joint paper that was published in 1981 [6] and an abstract/talk at the 1979 APS March meeting [7].

My connections to Alfonso remained strong over the years. In part I often sought his opinion for potential postdocs (IBM Europe and the country's local IBM

Je l'ai informé que je participerais à un workshop de l'OTAN à Anvers en juin 1973. Il m'a invité à visiter l'EPFL.

Mon épouse Mimi et moi nous avons visité Lausanne pendant deux jours. C'était ma première visite professionnelle dans une université européenne et un grand honneur de présenter mon travail de thèse et d'en discuter longuement avec Alfonso et d'autres personnes. En outre, nous avons pu découvrir le côté humain d'Alfonso, puisqu'il nous a invités à dîner chez lui, où nous avons rencontré sa femme et son fils. Ces expériences ont ancré une vie de respect professionnel et d'amitié mutuels. En 1975, j'ai rejoint le centre de recherche IBM T. J. Watson à Yorktown Heights, dans l'État de New York. À la fin de 1975 ou au début de 1976, Alfonso était aux États-Unis et je lui ai demandé de s'arrêter au centre IBM pour une visite. Il l'a fait et a même accepté notre invitation à passer la nuit chez nous. Mimi et moi nous souvenons chaleureusement du matin de son séjour chez nous. Lorsqu'il est descendu dans la cuisine, nous avions déjà préparé notre petit-déjeuner habituel composé de fruits, d'œufs, de pains et de café. Son idée de petit-déjeuner, cependant, semblait être une cigarette et un café. Par politesse, il a lentement pris le petit-déjeuner avec nous tandis que la conversation se réchauffait progressivement.

Je dois revenir à Nunzio, qui a quitté l'Illinois pour Xerox à Rochester (NY), en 1972. En 1976, nous l'avons recruté au Centre IBM. En fait, je dirais que Nunzio et Alfonso ont été mon portail vers les autres Italiens importants de notre génération, qui m'ont souvent fait sentir que j'étais moi-même italien. Peu après l'arrivée de Nunzio à Yorktown, Jerry Bernholc – mon premier doctorant (titulaire d'un doctorat délivré par l'Université de Lund en Suède) qui est resté en tant que postdoctorant – et moi-même avons décidé de nous lancer dans les calculs de défauts ponctuels « profonds » réalisés à partir de premiers principes en utilisant la méthode de la fonction de Green que j'avais préconisée dans un article de *Reviews of Modern Physics* qui a été largement distribué en tant que preprint et publié en 1978 [4]. Nunzio a été ravi de se joindre à nous et nous avons produit notre premier article sur la vacance dans le silicium, qui a également été publié en 1978 [4]. Des résultats

would together cover up to 80% of the cost, so I had to come up only with small amounts of funds). I will only mention one case. During a phone call, Alfonso recommended Roberto Car, who had first started in high-energy physics and then moved to semiconductors in Lausanne. I relied on Alfonso's strong recommendation and offered Roberto a position immediately. That was one of the best decisions I ever made. Roberto spearheaded our second round of Green's-function-based defect calculations that was able to do total energies, i.e., formation energies, migration barriers, etc. Post-docs Atsushi Oshiyama and Paul Kelly were members of the team [8]. By the way, on the human side, when Roberto arrived, Annabella Selloni was already a member of my group. The two of them knew each other and had worked together in Lausanne. Their stay in Yorktown led to their marriage and the two remained lifelong friends of Mimi and mine.

I will close with my last encounter with Alfonso, maybe ten years ago at a workshop in Trieste. We had several chats on physics issues and other topics. On the day of our departure from Trieste, Mimi and I were planning to drive to Lago d'Iseo to spend the night on the way to Zurich over the weekend. We ran into Alfonso and told him about our plan. He immediately went to his car and retrieved a fat paperback guide to travelers in Italy. He looked through it and without hesitation recommended "the" restaurant where we should definitely go for dinner. Unfortunately, these were pre-GPS times. Our directions to the hotel were not clear and we managed to get lost. By the time we found an English speaker to give us good directions, it was too late for restaurants in town, and we barely were able to get dinner at the hotel restaurant, which was actually memorable, at the edge of the lake with the Alps in the distance.

Alfonso is one of those scientists who made powerful contributions to physics, with modesty and humanity, and gained the respect of those who knew him. Let me thus close with the Greek wish on such occasions: *"May his memory be eternal!"*.

[1] W. Andreoni, E. Tosatti, N. O. Lipari, Alfonso Baldereschi, The admired scientist and mentor was a pioneer

pratiquement identiques, basés sur la même technique, ont été rapportés dans le même numéro par Gene Baraff et Michael Schlüter [5]. La même année, Jim Van Vechten a invité Alfonso à passer trois mois d'été au IBM Research Center. Lorsque je l'ai appris, j'avais déjà accepté de passer six mois à l'Université de Lund en Suède. Alfonso et moi ne nous sommes pas croisés à Yorktown, mais la visite a donné lieu à un article commun publié en 1981 [6] et à un résumé/exposé lors de la réunion de mars 1979 de l'American Physical Society [7].

Mes liens avec Alfonso sont restés étroits au fil des ans. En partie, j'ai souvent demandé son avis pour des postdoctorants potentiels (IBM Europe et la branche locale d'IBM du pays couvraient jusqu'à 80 % des frais, de sorte que je n'ai dû trouver que de petites sommes d'argent). Je ne mentionnerai qu'un seul cas. Lors d'un appel téléphonique, Alfonso m'a recommandé Roberto Car, qui avait d'abord débuté dans la physique des hautes énergies avant de passer aux semi-conducteurs à Lausanne. Je me suis fié à la forte recommandation d'Alfonso et j'ai immédiatement proposé un poste à Roberto. Ce fut l'une des meilleures décisions que je n'aie jamais prises. Roberto a été le fer de lance de notre deuxième série de calculs de défauts basés sur la fonction de Green, qui a permis de calculer les énergies totales, c'est-à-dire les énergies de formation, les barrières de migration, etc. Les postdoctorants Atsushi Oshiyama et Paul Kelly étaient membres de l'équipe [8]. D'un point de vue humain, lorsque Roberto est arrivé, Annabella Selloni était déjà membre de mon groupe. Ils se connaissaient les deux et avaient travaillé ensemble à Lausanne. Leur séjour à Yorktown a débouché sur leur mariage et ils sont restés des amis de longue date de Mimi et moi.

Je terminerai par ma dernière rencontre avec Alfonso, il y a peut-être dix ans, lors d'un workshop à Trieste. Nous avons discuté à plusieurs reprises de questions de physique et d'autres sujets. Le jour de notre départ de Trieste, Mimi et moi avions prévu de nous rendre au lac d'Iseo pour y passer la nuit avant de nous rendre à Zurich pendant le week-end. Nous avons croisé Alfonso et lui avons fait part de notre projet. Il s'est immédiatement rendu dans sa voiture et a sorti un gros guide de poche pour les voyageurs

of computational materials science, *Physics Today*, Aug. 20, 2024.

- [2] The Herman-Skillman code is available on the web at: <http://www-troja.fjfi.cvut.cz/~ladi/Hartree/herman.html>
- [3] A. Baldereschi, Valley-orbit interaction in semiconductors, *Phys. Rev. B* **1**, 4673 (1970).
- [4] J. Bernholc, N. O. Lipari, S. T. Pantelides, Self-consistent method for point defects in semiconductors: Application to the vacancy in silicon, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 895 (1978).
- [5] G. A. Baraff, M. Schlüter, Self-consistent Green's-function calculation of the ideal Si vacancy, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 892 (1978).
- [6] J. Bernholc, S. T. Pantelides, N. O. Lipari, A. Baldereschi, The electronic structure of deep *sp*-bonded acceptor impurities in semiconductors, *Solid State Commun.* **37**, 706 (1981).
- [7] A. Baldereschi, N. O. Lipari, J. Bernholc, S. T. Pantelides, Atomic-hydrogen and muonium in Si, *Bull. Amer. Phys. Soc.* **24**, 246 (1979).
- [8] R. Car, P. J. Kelly, A. Oshiyama, S. T. Pantelides, Microscopic theory of atomic diffusion mechanisms in silicon, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1814 (1984).

en Italie. Il l'a feuilleté et nous a recommandé sans hésiter « le » restaurant où nous devrions absolument aller dîner. Malheureusement, nous n'étions pas à l'époque des GPS. Les indications pour se rendre à l'hôtel n'étaient pas claires et nous nous sommes perdus. Le temps de trouver un anglophone pour nous donner de bonnes indications, il était trop tard pour les restaurants en ville et nous avons à peine pu dîner au restaurant de l'hôtel, qui était en fait mémorable, au bord du lac avec les Alpes au loin.

Alfonso fait partie de ces scientifiques qui ont apporté de puissantes contributions à la physique, avec modestie et humanité, et qui ont gagné le respect de ceux qui l'ont connu. Permettez-moi de conclure en formulant le vœu grec en de telles occasions : « *Que sa mémoire soit éternelle !* »

## Alfonso Baldereschi's early career contributions to semiconductor physics

### Alfonso Baldereschi: contributions en début de carrière à la physique des semi-conducteurs

---

**Massimo Altarelli**

---

In this article, I would like to emphasize the very remarkable (and remarked) start of Alfonso Baldereschi in the community of electronic structure of semiconductors during the 1970's. After his studies in the prestigious Scuola Normale Superiore in Pisa, under the leadership of Franco Bassani, he spent the

Dans cet article, je voudrais souligner les débuts très remarquables (et remarqués) d'Alfonso Baldereschi dans la communauté de la structure électronique des semi-conducteurs au cours des années 1970. Après ses études à la prestigieuse Scuola Normale Superiore de Pise, sous la direction de Franco Bassani,

early part of the decade in two of the main “temples” of condensed matter physics in the United States, namely the University of Illinois at Urbana-Champaign and Bell Laboratories in New Jersey. In 1973 he moved back to Europe, to the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL); but he kept the important connection with Nunzio Lipari, whom he had met in Urbana but who later moved to Xerox Research Laboratories in Rochester (NY).

Baldereschi-Lipari soon became a well-known binomial in semiconductor electronic structure theory for their original and very productive approach to the description of acceptor impurity states. Acceptor states arise when one of the atoms of the crystal is replaced by an atom from the column of the periodic table to the left of that of the original atom (e.g., replacing a group IV Ge atom with a group III Ga atom; the Ga atom is like a Ge atom with a missing proton, which tends to reduce the electron density in its surroundings, i.e., to attract a hole). This problem had seen very little progress in the preceding years due to the difficulty of dealing with the degeneracy of the valence bands at the center of the Brillouin zone in cubic semiconductors (Si, Ge, III-V and also II-VI compounds). In a cubic environment, the spin-orbit interaction splits the manifold of  $p$ -like valence state orbitals into an upper  $\Gamma_8$  quartet and a lower  $\Gamma_6$  doublet, analogous to the  $J = 3/2$  and  $J = 1/2$  levels of atomic physics. In crystals composed of heavier elements, the spin-orbit splitting is large compared to the hole binding energy, so it is a good approximation to neglect the  $\Gamma_6$  components (strong spin-orbit approximation).

The structure of the valence bands in the neighborhood of the  $\Gamma_8$  maximum was well known, based on the  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  expansion, and was described by Luttinger [1] in terms of a complete set of  $4\times 4$  matrices constructed by considering the  $J = 3/2$  angular momentum matrices and linear combinations of their products plus the identity matrix. Luttinger’s guiding principle was to identify and insert into the Hamiltonian all terms up to second power in the  $\mathbf{k}$  vector components and in the angular momentum matrices that comply with the diamond ( $O_h$ ) or zincblende ( $T_d$ ) point group symmetry. It turns out that three coefficients (the Luttinger  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ , and  $\gamma_3$  parameters)

il a passé le début de la décennie dans deux des principaux « temples » de la physique de la matière condensée aux États-Unis, à savoir l’Université de l’Illinois à Urbana-Champaign et les Laboratoires Bell dans le New Jersey. En 1973, il est retourné en Europe, à l’École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), mais il a gardé le lien important avec Nunzio Lipari, qu’il avait rencontré à Urbana mais qui a ensuite déménagé aux Xerox Research Laboratories à Rochester, dans l’État de New York.

Le binôme Baldereschi-Lipari est rapidement devenu bien connu dans la théorie de la structure électronique des semi-conducteurs en raison de leur approche originale et très productive de la description des états d’impureté accepteurs. Les états accepteurs apparaissent lorsque l’un des atomes du cristal est remplacé par un atome de la colonne du tableau périodique située à gauche de celle de l’atome d’origine (par exemple, le remplacement d’un atome Ge du groupe IV par un atome Ga du groupe III ; l’atome Ga est comme un atome Ge avec un proton manquant, ce qui tend à réduire la densité électronique dans son environnement, c’est-à-dire à attirer un trou). Ce problème avait très peu progressé au cours des années précédentes en raison de la difficulté de traiter la dégénérescence des bandes de valence au centre de la zone de Brillouin dans les semi-conducteurs cubiques (Si, Ge, composés III-V et aussi II-VI). Dans un environnement cubique, l’interaction spin-orbite sépare l’ensemble des orbitales de l’état de valence de type  $p$  en un quartet supérieur  $\Gamma_8$  et un doublet inférieur  $\Gamma_6$ , analogues aux niveaux  $J = 3/2$  et  $J = 1/2$  de la physique atomique. Dans les cristaux composés d’éléments plus lourds, la séparation spin-orbite est importante par rapport à l’énergie de liaison des trous, de sorte qu’une bonne approximation consiste à négliger les composantes  $\Gamma_6$  (approximation spin-orbite forte).

La structure des bandes de valence dans le voisinage du maximum de  $\Gamma_8$  était bien connue, basée sur l’expansion  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ , et a été décrite par Luttinger [1] en termes d’un ensemble complet de matrices  $4\times 4$  construites en considérant les matrices du moment angulaire  $J = 3/2$  et les combinaisons linéaires de leurs produits additionnés à la matrice identité. Le principe directeur de Luttinger consistait à identifier et insérer dans l’hamiltonien tous les termes jusqu’à la deuxième

are enough to describe the structure of the valence bands near the  $\Gamma_8$  maximum in the strong spin-orbit approximation.

Baldereschi and Lipari's novel intuition [2] was to separate the fully rotation-invariant ( $O_3^+$  group) terms, which are obviously displaying also the point group symmetry, from those that are not rotationally invariant, and to express the latter in terms of the irreducible representations of the rotation group, i.e., as irreducible spherical tensors. The spherically invariant components include not only the hydrogen-like component,  $p^2/2m^* + V(r)$ , where  $V$  is the effective (screened) impurity potential, but also additional kinetic energy terms corresponding to a spherical average of the dispersion of the  $\Gamma_8$  bands near the  $\Gamma$  point. The non-spherical terms describe the warping of the upper valence bands, i.e., their different dispersion in different directions. It turns out that these warping terms are generally small, as could be seen by inspecting the Luttinger parameters of most semiconductors. Neglecting them delivers the "spherical model" of the valence bands which leads to simple systems of differential equations in one variable (the radial coordinate) for each value of the angular momentum quantum numbers [2,3].

The next step was the inclusion of the non-spherical terms via perturbation theory [4]. Writing the Hamiltonian in terms of spherical tensors allows one to apply the well-tested technology based on the Wigner-Eckart theorem and the vector-coupling coefficients to the calculation of matrix elements. It also provides a physically meaningful classification of the energy levels in analogy with the L-S coupling scheme of atomic physics.

These articles about acceptors have been very seminal for all problems involving the valence bands and external fields or geometrical constraints, e.g., excitons in a magnetic field [5,6], quantum dots and quantum wires [7], and received many hundreds of citations. They exemplify the characteristic features of originality and depth of Alfonso Baldereschi's work, which can be found throughout his career: a

puissance dans les composantes du vecteur  $\mathbf{k}$  et dans les matrices du moment angulaire qui sont conformes à la symétrie du groupe ponctuel du diamant ( $O_h$ ) ou de la zinc-blende ( $T_d$ ). Il s'avère que trois coefficients (les paramètres de Luttinger  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ , and  $\gamma_3$ ) suffisent à décrire la structure des bandes de valence près du maximum à  $\Gamma_8$  dans l'approximation spin-orbite forte.

L'intuition originale de Baldereschi et Lipari [2] a été de séparer les termes totalement invariants par rapport à la rotation (groupe  $O_3^+$ ), qui affichent manifestement aussi la symétrie du groupe ponctuel, de ceux qui ne sont pas invariants par rapport à la rotation, et d'exprimer ces derniers en termes de représentations irréductibles du groupe de rotation, c'est-à-dire en tant que tenseurs sphériques irréductibles. Les composantes invariantes sur le plan sphérique comprennent non seulement la composante de type hydrogène,  $p^2/2m^* + V(r)$ , où  $V$  est le potentiel d'impureté effectif (« écranté »), mais aussi des termes d'énergie cinétique supplémentaires correspondant à une moyenne sphérique de la dispersion des bandes  $\Gamma_8$  à proximité du point  $\Gamma$ . Les termes non sphériques décrivent la déformation des bandes de valence supérieures, c'est-à-dire leur dispersion différente dans différentes directions. Il s'avère que ces termes de déformation sont généralement faibles, comme on peut le voir en examinant les paramètres de Luttinger de la plupart des semi-conducteurs. En les négligeant, on obtient le « modèle sphérique » des bandes de valence, qui conduit à des systèmes simples d'équations différentielles en une seule variable (la coordonnée radiale) pour chaque valeur des nombres quantiques du moment angulaire [2,3].

L'étape suivante a été l'inclusion des termes non sphériques par la théorie des perturbations [4]. L'écriture de l'hamiltonien en termes de tenseurs sphériques permet d'appliquer la technologie éprouvée basée sur le théorème de Wigner-Eckart et les coefficients du couplage vectoriel au calcul des éléments de matrice. Elle fournit également une classification physiquement significative des niveaux d'énergie en analogie avec le schéma de couplage L-S de la physique atomique.



problem that had been addressed for quite some years was revisited in depth by him and Nunzio Lipari, and a quite different and original perspective revealed, which opened up not only an unprecedented method of solution, but also a classification of the solutions with an appealing physical meaning.

Another early and very important contribution by Alfonso Baldereschi was the discovery of the “mean-value point”  $\mathbf{k}^*$  in the Brillouin zone, most often referred to as the Baldereschi point. This is a point such that, given any periodic function  $f(\mathbf{k})$ , its average over the Brillouin zone, defined as

$$\bar{f} = \frac{\Omega}{2\pi} \int_{\text{BZ}} f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k},$$

where  $\Omega$  is the volume of the unit cell, is very well approximated by  $f(\mathbf{k}^*)$ ,  $\bar{f} \approx f(\mathbf{k}^*)$ .

Reference [8] contains several key results:

- (a) Baldereschi showed that the point  $\mathbf{k}^*$  is determined by the Bravais lattice of the crystal and does not depend on the particular periodic function  $f$ .
- (b) He also gave a general mathematical procedure to derive the coordinates of  $\mathbf{k}^*$  for a given lattice and provided the numerical value for the cubic lattices; for example, for *fcc* structures he determined that  $\mathbf{k}^* = (2\pi/a) (0.6223, 0.2953, 0)$ , where  $a$  is the lattice parameter.
- (c) For the very important case in which the function  $f$  is the electron density at the point  $\mathbf{r}$  in the unit cell, associated to the Bloch function  $\psi$  at  $\mathbf{k}$ , i.e.,  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \equiv |\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})|^2$ , he showed, as an example, that for Ge the electron density corresponding to the valence bands evaluated by the Baldereschi single-point method agrees throughout the unit cell with the computation using a grid of 3360  $\mathbf{k}$  points in the Brillouin zone to better than 1%.

Some remarkable aspects of these results are that the Baldereschi point (see the case of the *fcc* lattices) does not necessarily correspond to a point of high symmetry or lying along high symmetry directions; that it needs to be calculated only once for each Bravais lattice, and that it is so accurate in predicting charge densities (for semiconductors and insulators with completely full or completely empty

Ces articles sur les accepteurs ont été essentiels pour tous les problèmes impliquant les bandes de valence et les champs externes ou les contraintes géométriques, par exemple les excitons dans un champ magnétique [5,6], les points quantiques et les fils quantiques [7], et ont été cités plusieurs centaines de fois. Ils illustrent les caractéristiques d’originalité et de profondeur du travail d’Alfonso Baldereschi, que l’on retrouve tout au long de sa carrière : un problème qui avait été abordé pendant un certain nombre d’années a été réexaminé en profondeur par lui et Nunzio Lipari, et une perspective tout à fait différente et originale a été révélée, qui a ouvert non seulement une méthode de résolution sans précédent, mais aussi une classification des solutions avec une signification physique attrayante.

Une autre contribution précoce et très importante d’Alfonso Baldereschi a été la découverte du « point de valeur moyenne »  $\mathbf{k}^*$  dans la zone de Brillouin, plus souvent appelé point de Baldereschi. Il s’agit d’un point tel que, étant donné une fonction périodique quelconque  $f(\mathbf{k})$ , la moyenne sur la zone de Brillouin de  $f$ , définie comme :

où  $\Omega$  est le volume de la cellule unitaire, est très bien approximé par  $f(\mathbf{k}^*)$ ,  $\bar{f} \approx f(\mathbf{k}^*)$ .

La référence [8] contient plusieurs résultats clés :

- (a) Baldereschi a montré que le point  $\mathbf{k}^*$  est déterminé par le réseau de Bravais du cristal et ne dépend pas de la fonction périodique particulière  $f$ .
- (b) Il a montré une procédure mathématique générale pour dériver les coordonnées de  $\mathbf{k}^*$  pour un réseau donné et a fourni la valeur numérique pour les réseaux cubiques ; par exemple, pour les structures *fcc*, il a déterminé que  $\mathbf{k}^* = (2\pi/a) (0.6223, 0.2953, 0)$ , où  $a$  est le paramètre de réseau.
- (c) Pour le cas très important où la fonction  $f$  est la densité électronique au point  $\mathbf{r}$  de la cellule unitaire, associée à la fonction de Bloch à  $\mathbf{k}$ , c’est-à-dire  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \equiv |\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})|^2$ , il a montré, à titre d’exemple, que pour Ge, la densité électronique correspondant aux bandes de valence évaluée par la méthode du point unique de Baldereschi est en

bands). Charge densities are fundamental ingredients of self-consistent electronic structure calculations, chemical bonding considerations, and so on. Their importance was really high at a time in which the available computing power was much smaller than today, and order of magnitude reductions in computing time were extremely valuable, shifting the boundary between feasible and unfeasible computations. The paper was therefore a real landmark in the electronic structure theory of non-metallic systems.

How did Baldereschi come to this important and counter-intuitive discovery? I remember a private discussion with him on this topic, many years ago, in which he told me that he had assembled "... a vast collection of wavefunctions..." for diamond and zinc-blende semiconductors, and that he used to spend quite some time looking at them, in search of hints for physical (susceptibilities) and chemical (covalency, ionicity, etc.) trends. During these patient and thorough explorations of the corresponding columns of the periodic table and of the Brillouin zone, he noticed (or perhaps stumbled on?) the remarkable properties of a certain  $k$  point. Given his knowledge of group theory, formidable intuition, and reasoning power, the general properties outlined in the previous paragraph were soon discovered and explained with elegant mathematical arguments.

Interestingly, the corresponding publication [8] in Physical Review B is limited in length to just under four pages and is not divided into sections—these typical style requirements seem to suggest that the article was most probably submitted to Physical Review Letters and eventually diverted to Physical Review B by lukewarm (or worse) referee reports. Considering that the paper received over 1,000 citations, if my suspicion happens to be correct, this would be a less than glorious episode in the history of refereeing.

In conclusion, I hope that these few paragraphs are sufficient to illuminate how, in 1973, at the age of 27, Alfonso Baldereschi had already achieved a position of very high prominence and prestige in the physics of semiconductors, in particular in electronic structure

accord dans toute la cellule unitaire avec le calcul utilisant une grille de 3360 points  $k$  dans la zone de Brillouin [8] à mieux que 1 %.

Certains aspects remarquables de ces résultats sont que le point de Baldereschi (voir le cas des réseaux *fcc*) ne correspond pas nécessairement à un point de haute symétrie ou situé le long de directions de haute symétrie ; qu'il ne doit être calculé qu'une seule fois pour chaque réseau de Bravais, et qu'il est très précis dans la prédiction des densités de charge (pour les semi-conducteurs et les isolants avec des bandes complètement pleines ou complètement vides). Les densités de charge sont des éléments fondamentaux des calculs de structure électronique autocohérents, des considérations sur la liaison chimique, etc. Leur importance était vraiment grande à une époque où la puissance de calcul disponible était beaucoup plus faible qu'aujourd'hui, et où les réductions d'ordre de grandeur du temps de calcul étaient extrêmement précieuses, déplaçant la frontière entre les calculs faisables et les calculs irréalisables. Cet article a donc constitué un véritable jalon dans la théorie de la structure électronique des systèmes non métalliques.

Comment Baldereschi est-il parvenu à cette découverte importante et contre-intuitive ? Je me souviens d'une discussion privée avec lui sur ce sujet, il y a de nombreuses années, au cours de laquelle il m'a dit qu'il avait rassemblé « ... une vaste collection de fonctions d'onde... » pour les semi-conducteurs du diamant et de la zinc-blende, et qu'il passait beaucoup de temps à les examiner, à la recherche d'indices sur les tendances physiques (susceptibilités) et chimiques (covalence, ionicité, etc.). Au cours de ces explorations patientes et approfondies des colonnes correspondantes du tableau périodique et de la zone de Brillouin, il a remarqué (ou peut-être découvert par hasard ?) les propriétés remarquables d'un certain point  $k$ . Grâce à sa connaissance de la théorie des groupes, à son extraordinaire intuition et à sa puissance de raisonnement, les propriétés générales décrites dans le paragraphe précédent ont été rapidement découvertes et expliquées à l'aide d'arguments mathématiques élégants.

Il est intéressant de noter que la publication correspondante [8] dans Physical Review B se limite à un

theory. His trajectory through sites of excellence like the Scuola Normale Superiore in Pisa, the University of Illinois, Bell Laboratories and finally the EPFL was very fast but left an indelible legacy of scientific results.

- [1] J. M. Luttinger, Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [2] N. O. Lipari, A. Baldereschi, Angular momentum theory and localized states in solids. Investigation of shallow acceptor states in semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1660 (1970).
- [3] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- [4] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Cubic contributions to the spherical model of shallow acceptor states, *Phys. Rev. B* **9**, 1525 (1974).
- [5] M. Altarelli, N. O. Lipari, Perturbation theory investigation of the exciton ground state of cubic semiconductors in a magnetic field, *Phys. Rev. B* **7**, 3798 (1973).
- [6] N. O. Lipari, M. Altarelli, Theory of exciton effects in the high-field magnetoabsorption of real semiconductors, *Solid State Commun.* **13**, 1791 (1973).
- [7] K. J. Vahala, P. C. Sercel, Application of a total angular momentum basis to quantum-dot band structure, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 239 (1990).
- [8] A. Baldereschi, Mean-value point in the Brillouin zone, *Phys. Rev. B* **7**, 5212 (1973).

peu moins de quatre pages et n'est pas divisée en sections ; ces exigences de style typiques semblent indiquer que l'article a très probablement été soumis à *Physical Review Letters* et finalement détourné vers *Physical Review B* par des rapports d'arbitrage mitigés (voire pire). Étant donné que l'article a reçu plus de 1 000 citations, si mes soupçons s'avéraient exacts, il s'agirait d'un épisode peu glorieux dans l'histoire du système de révision.

En conclusion, j'espère que ces quelques paragraphes suffiront à expliquer comment, en 1973, à l'âge de 27 ans, Alfonso Baldereschi avait déjà atteint une position de très haut niveau et de prestige dans le domaine de la physique des semi-conducteurs, en particulier dans celui de la théorie de la structure électronique. Sa trajectoire à travers des sites d'excellence comme la Scuola Normale Superiore de Pise, l'Université de l'Illinois, les Laboratoires Bell et finalement l'EPFL a été très rapide, mais a laissé un héritage indélébile de résultats scientifiques.

# Two landmark research contributions of Alfonso Baldereschi: historical perspective

## Deux recherches marquantes par Alfonso Baldereschi: une perspective historique

---

Giorgio Margaritondo

---

### Two fundamental contributions

Two fundamental works [1–3] of the 1970s by Baldereschi played a strong role in the early development of semiconductor science. Regrettably, their great importance is often overlooked today by our younger colleagues. The reason is that to fully appreciate them, one must consider the historical background of the time, within the general evolution of solid-state science. I present here a narration that deals with this issue, based on factual records and on my own personal recollections—including aspects of historical relevance but also some amusing anecdotes.

Alfonso Baldereschi's career was very productive and spanned many decades. One could cite many of his contributions that had a long-lasting impact on solid-state physics. However, in this presentation I specifically focus my attention on references [1–3], illustrating their historical background and making it understandable by junior colleagues.

The first result is the so-called Baldereschi point [1]. As we shall see, its discovery had a fundamental role in the development of the band structure theory of semiconductors. Specifically, it transformed purely theoretical quantum notions into practical methods to calculate electronic properties. Without it, the quantum background of semiconductor physics would have largely remained, at least temporarily, a collection of abstractions with limited practical impact.

### Des contributions fondamentales

Deux travaux fondamentaux [1–3] réalisés par Baldereschi dans les années 1970 ont joué un rôle important dans le développement de la science des semi-conducteurs. Malheureusement, leur grande importance est souvent négligée aujourd'hui par nos jeunes collègues. La raison en est que, pour les apprécier pleinement, il faut tenir compte du contexte historique de l'époque, dans le cadre de l'évolution générale de la science des solides. Je présente ici un texte qui traite de cette question, basé sur des faits et sur mes souvenirs personnels – y compris des aspects d'importance historique, mais aussi quelques anecdotes amusantes.

La carrière d'Alfonso Baldereschi a été très productive et s'est déroulée sur plusieurs décennies. On pourrait citer de nombreuses contributions qui ont eu un impact durable sur la physique du solide. Toutefois, dans cette présentation, je me concentrerai plus particulièrement sur deux résultats [1–3], illustrant leur contexte historique et les rendant compréhensibles pour les jeunes collègues.

Le premier résultat est le point de Baldereschi [1]. Comme nous le verrons, sa découverte a joué un rôle fondamental dans le développement de la théorie de la structure à bandes des semi-conducteurs. Plus précisément, elle a transformé des notions quantiques purement théoriques en méthodes pratiques pour le calcul des propriétés électroniques. Sans elle, le contexte quantique de la physique des

The second result was Baldereschi's theory [2,3] of isoelectronic impurities in elemental and binary semiconductors. This result is less broadly fundamental than the previous one. However, its historical importance is remarkable. It was in the mainstream of research about novel semiconductor processing methods, which contributed to the realization of effective light-emitting diodes (LEDs). And, in broad terms, to the evolution of hypothetical devices like pocket calculators into wonderful realities.

But there was a broader impact of Baldereschi's work of Refs. [2] and [3]. Indeed, it pushed to the limit the capabilities of quantum calculations of semiconductors, showing how much they could achieve even with the very primitive computational resources of the 1970s.

Note that I interpret here the historical background of the two works not from the point of view of a theorist, which I am not. I present it, instead, as seen by all condensed-matter physicists, experimentalists and theorists alike. I trust that this "generalist" point of view will correctly illustrate their historical role in solid-state science.

## The broad historical background

The foundations of quantum mechanics established in the 1920s and 1930s were also the starting point [4-11] towards solid-state physics—and its many practical applications that revolutionized our everyday life. After results like the Schrödinger and Dirac equations and the Fermi-Dirac statistics, the door was open in principle to the use of quantum notions in condensed matter science. But the connection was not easy and required a number of fundamental and progressively advanced achievements.

Among them, we can mention milestones like the Drude-Sommerfeld free electron model [13], the Bloch theorem [14], and the early steps [15] in the use of pseudopotentials and other theoretical methodologies to practically calculate electronic structures. These and several other landmarks prepared the fertile ground that allowed John Bardeen and his colleagues at Bell Laboratories, in the 1940s and

semi-conducteurs serait largement resté, du moins temporairement, une collection d'abstractions avec un impact pratique limité.

Le deuxième résultat est la théorie de Baldereschi [2,3] sur les impuretés isoélectroniques dans les semi-conducteurs élémentaires et binaires. Ce résultat est moins fondamental que le précédent. Cependant, son importance historique est remarquable. Il s'inscrit dans la voie principale de la recherche sur les nouvelles méthodes de traitement des semi-conducteurs, qui ont contribué à la réalisation de diodes électroluminescentes (LED) efficaces et, d'une manière générale, à l'évolution d'appareils hypothétiques tels que les calculatrices de poche qui sont devenues des réalités merveilleuses.

Et les travaux de Baldereschi dans les réf. [2] et [3] ont eu un impact plus large. En effet, il a poussé à leur limite les capacités de calcul quantique des semi-conducteurs, en montrant ce qu'il était possible de réaliser, malgré les ressources informatiques très primitives des années 1970.

Notez que j'interprète ici le contexte historique des deux travaux non pas du point de vue d'un théoricien, ce que je ne suis pas. Je les présente plutôt comme tous les physiciens de la matière condensée les voient, qu'ils soient expérimentateurs ou théoriciens. J'espère que ce point de vue « généraliste » illustrera correctement leur rôle historique dans la science de l'état solide.

## Le contexte historique général

Les fondements de la mécanique quantique établis dans les années 1920 et 1930 ont également été le point de départ [4-11] de la physique de l'état solide – et de ses nombreuses applications pratiques qui ont révolutionné notre vie quotidienne. Après des résultats tels que les équations de Schrödinger et de Dirac et la statistique de Fermi-Dirac, la porte était ouverte en principe à l'utilisation des notions quantiques dans la science de la matière condensée. Mais la connexion n'était pas facile et nécessitait un certain nombre de réalisations fondamentales, de plus en plus avancées.



1950s, to move from fundamental physics to great practical results like transistors [16,17] and integrated circuits.

Within the general picture of condensed-matter physics, semiconductors had emerged [11] as the most promising class of novel materials for technology, opening the door to a huge variety of practical applications. Exploiting their potential could have led, in principle, to the gigantic impact on the economy that was in fact realized in the subsequent decades. But this process faced big obstacles, including many of conceptual nature.

### A magical point in reciprocal space

At the time of Baldereschi's work of Ref. [1], the historical progress in semiconductor science had already established most of its fundamental notions [4,5]. It was clear that the most important practical properties of semiconductors—including electrical conduction and optical phenomena—are related to their electronic structure. And that this structure is dominated by the existence of allowed energy bands and forbidden gaps. This strong background stimulated the theorist to use fundamental quantum equations as the starting point for electronic structure calculations, and in particular for the determination of band structures and defect states.

However, this task faced huge obstacles. In fact, after formulating the Schrödinger equation for the semiconductor system under investigation, finding the solutions was extremely difficult. In particular, calculating band structures and defect states as a tool to predict electronic properties was a most formidable task, the success of which was made possible by several key theoretical results. Among these, Baldereschi's discovery [1] of the point later named after him was a most important one: let us explain its background in simple terms.

Solving the Schrödinger equations for electrons in solids is a very complicated many-body problem. Even the formulation of the equation itself is, in principle, impossible without already knowing the solution, i.e., the electronic wavefunctions and their charge distributions. The problem must be handled

Parmi elles, on peut citer des étapes clés comme le modèle à électrons libres de Drude-Sommerfeld [13], le théorème de Bloch [14] et les premières étapes [15] de l'utilisation des pseudopotentiels, ainsi que d'autres méthodologies théoriques pour calculer concrètement les structures électroniques. Ces étapes et d'autres ont préparé le terrain fertile qui a permis à John Bardeen et à ses collègues des Laboratoires Bell, dans les années 1940 et 1950, de passer de la physique fondamentale à de grands résultats pratiques tels que les transistors [16,17] et les circuits intégrés.

Dans le cadre général de la physique de la matière condensée, les semi-conducteurs se sont imposés [11] comme la classe la plus prometteuse de nouveaux matériaux pour la technologie, ouvrant la porte à une grande variété d'applications pratiques. L'exploitation de leur potentiel aurait pu, en principe, avoir un impact gigantesque sur l'économie, impact qui s'est effectivement concrétisé au cours des décennies suivantes. Mais ce processus s'est heurté à d'importants obstacles, dont beaucoup étaient de nature conceptuelle.

### Un point magique dans l'espace réciproque

À l'époque des travaux de Baldereschi de la réf. [1], les progrès historiques de la science des semi-conducteurs avaient déjà établi la plupart de ses notions fondamentales [4,5]. Il était clair que les propriétés pratiques les plus importantes des semi-conducteurs – y compris la conduction électrique et les phénomènes optiques – sont liées à leur structure électronique, et que cette structure est dominée par l'existence de bandes d'énergie permises et de bandes interdites. Ce contexte fiable a incité les théoriciens à utiliser les équations quantiques fondamentales comme point de départ pour les calculs de la structure électronique, et en particulier pour la détermination des structures à bandes et des états des défauts.

Cependant, cette tâche s'est heurtée à d'énormes obstacles. En effet, après avoir formulé l'équation de Schrödinger pour le système semi-conducteur analysé, il était extrêmement difficile de trouver ses solutions. En particulier, le calcul des structures de bande et des états des défauts pour prédire les

with approximate methods, often implemented with self-consistent iterations. In turn, this demands numerical strategies based on clever tricks and on adequate computational power.

This strategy became increasingly effective over the years, delivering usable approximate solutions. In this progress, computers played a key role, but not an exclusive one: the increase in their capabilities does not constitute the entire picture. In fact, the brute force of computational power was complemented by clever ideas to simplify the task, such as the Baldereschi point [1].

At the present time, this historical perspective is largely unknown: supercomputers have become so incredibly powerful that problems can be solved by brute force. But the situation was drastically different at the beginning of semiconductor science, in particular when Alfonso Baldereschi started his bright career.

To illustrate this point, we could compare computer power in the 1970s and now. The first supercomputers had appeared in the previous decade, including key systems like the CDC 6600 and the IBM 7030 Stretch, whose power reached the megaflop level. And, in the mid-1970s, the CRAY-1 supercomputer climbed up to an almost unbelievable (for the time) level of 160 megaflops.

These figures, however, are largely deceiving as far as electronic structure calculations, and in general the solution of solid-state problems, are concerned. The advanced supercomputers of the 1970s were, in fact, mostly inaccessible by solid-state theorists, whose daily reality was much more sobering.

Solid-state computations were mostly performed with primitive hand-cranked calculators not much better than the cash registers of stores. And pocket calculators or personal computers were, of course, a very distant future dream. Even less imaginable were the present supercomputers reaching the exaflop level *one thousand billion times* faster than their 1970s counterparts.

The very limited computation capabilities of the 1970s caused a serious risk: the practical difficulties

propriétés électroniques était une tâche des plus ardues. Cette tâche a été rendue possible grâce à plusieurs résultats théoriques clés. Parmi ceux-ci, la découverte par Baldereschi [1] du point qui portera plus tard son nom était l'un des plus importants : expliquons son contexte de façon simple.

La résolution des équations de Schrödinger pour les électrons dans les solides est un problème à plusieurs corps très compliqué. Même la formulation de l'équation elle-même est, en principe, impossible sans connaître la solution, c'est-à-dire les fonctions d'onde électroniques et leurs distributions de charge. Le problème doit être traité à l'aide de méthodes approximatives, souvent appliquées avec des itérations autocohérentes. Cela exige des stratégies numériques basées sur des astuces efficaces et sur une puissance de calcul adéquate.

Cette stratégie est devenue de plus en plus performante au fil des ans, fournissant des solutions approximatives utilisables. Dans cette évolution, les ordinateurs ont joué un rôle clé, mais pas exclusif : l'augmentation de leurs capacités n'explique pas tout. En fait, la force brute de la puissance de calcul a été complétée par des idées astucieuses pour simplifier la tâche, comme le point de Baldereschi [1].

À l'heure actuelle, cette perspective historique est largement méconnue : les superordinateurs sont devenus si incroyablement puissants que les problèmes peuvent être résolus par la force brute. Mais la situation était radicalement différente au début de la science des semi-conducteurs, en particulier lorsqu'Alfonso Baldereschi a commencé sa brillante carrière.

Pour illustrer ce point, nous pourrions comparer la puissance des ordinateurs dans les années 1970 et aujourd'hui. Les premiers superordinateurs étaient apparus au cours de la décennie précédente, notamment des systèmes clés comme le CDC 6600 et l'IBM 7030 Stretch, dont la puissance atteignait le niveau du mégaflop. Au milieu des années 1970, le superordinateur CRAY-1 a atteint le niveau presque incroyable (pour l'époque) de 160 mégaflops.

Ces chiffres sont toutefois peu importants en ce qui concerne les calculs de structure électronique

in deriving approximate but usable solutions from fundamental equations could have jeopardized the evolution of the entire domain of microelectronics. And there was also the risk of a “boomerang” effect, since such progress was a key ingredient for the increase of computing power. In this dark scenario, Baldereschi and his point [1] brought a bright ray of hope. Let us see why.

A band structure [4,5] is the collection of energy curves vs the so-called  $\mathbf{k}$  vector—which is the solid-state counterpart of the free-electron vector that defines momentum and kinetic energy. In principle, the knowledge of such curves can be used to calculate the electronic properties and predict or justify, for example, electrical conductivity or optical phenomena. However, performing calculations for many  $\mathbf{k}$  vector directions and values increases computational complexity—and boosts the requirements for computer power and computer time. In the 1970s, meeting this demand was largely impossible.

Luckily, Baldereschi discovered that electronic properties calculated only for one, special  $\mathbf{k}$  vector are very good approximations for the average properties determined by all  $\mathbf{k}$  vectors. In his own words [1]:

*A new special point in the Brillouin zone is introduced. It is defined as the point such that the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone. This special point is termed the “mean-value point,” and is dictated by the crystal symmetry.*

In this description, the term “Brillouin zone” refers [4,5] to the unit cell for the periodic lattice in the “reciprocal” space of the  $\mathbf{k}$  vectors—whose symmetry mirrors the real-space one of crystal. Each one of its points defines a  $\mathbf{k}$  vector. Thanks to Baldereschi’s discovery, calculations of the electronic properties did not need to be performed for many directions and  $\mathbf{k}$  vectors but could be limited to one specific  $\mathbf{k}$  vector—delivering results with a decent and in many cases practically adequate level of accuracy.

Many calculations of the electronic properties became feasible, avoiding a prohibitively extended—and

et, d’une manière générale, la résolution des problèmes des solides. Les superordinateurs avancés des années 1970 étaient en fait, pour la plupart, inaccessibles aux théoriciens de l’état solide. La réalité quotidienne de ces derniers était beaucoup plus décevante.

Les calculs concernant les solides étaient principalement effectués à l’aide de calculatrices primitives à manivelle qui n’étaient guère plus performantes que les caisses des magasins. Les calculatrices de poche ou les ordinateurs personnels n’étaient, bien sûr, qu’un rêve très lointain. Les superordinateurs actuels, qui atteignent le niveau de l’exaflop – mille milliards de fois plus rapides que leurs homologues des années 1970 – étaient encore moins imaginables.

Les capacités de calcul très limitées des années 1970 engendraient un risque sérieux : les difficultés pratiques rencontrées lors de la dérivation d’équations fondamentales à partir de solutions approximatives mais utilisables auraient pu compromettre l’évolution de l’ensemble du domaine de la microélectronique. Et il y avait aussi le risque d’un effet « boomerang », puisqu’un tel progrès était un ingrédient clé pour l’augmentation de la puissance de calcul. Dans ce scénario sombre, Baldereschi et son point [1] ont apporté une lueur d’espoir. Voyons pourquoi.

Une structure à bandes [4,5] est l’ensemble des courbes d’énergie en fonction de ce que l’on appelle le vecteur  $\mathbf{k}$  – qui est la contrepartie dans l’état solide du vecteur de l’électron libre définissant la quantité de mouvement et l’énergie cinétique. En principe, la connaissance de ces courbes peut être utilisée pour calculer les propriétés électroniques et prédire ou justifier, par exemple, la conductivité électrique ou les phénomènes optiques. Cependant, effectuer des calculs pour de nombreuses directions et valeurs du vecteur  $\mathbf{k}$  augmente la complexité des calculs et accroît les besoins en matière de puissance et de temps de calcul des ordinateurs. Dans les années 1970, il était pratiquement impossible de répondre à cette exigence.

Heureusement, Baldereschi a découvert que les propriétés électroniques calculées uniquement pour un vecteur  $\mathbf{k}$  spécifique donné sont de très bonnes

expensive—use of computers. Even with the limited computational resources of that time, connections between fundamental quantum physics and practical semiconductor properties could be established for a number of interesting cases. Therefore, the use of the Baldereschi point and other similar concepts became quite popular.

This approach had its limitations, of course. In the first place, even calculations for a single  $\mathbf{k}$  vector were not trivial. And the solutions were approximations, even though they were quite good for practical applications. More fundamentally, Baldereschi's result [1] only worked for crystalline, highly symmetrical solids, for which, for example, a Brillouin zone can be defined.

This last point actually reflects a more general conceptual issue that characterized the early history of solid-state physics. Much of the theory had been developed for crystalline materials, exploiting their spatial symmetry [8]. The success of this approach, paved by the Bloch theorem [13], was undeniable. For example, it explained the conduction and optical properties of fundamental technological semiconductors like crystalline silicon and germanium. However, this success also raised some puzzling questions. For example, if crystalline silicon is transformed by some kind of processing into amorphous silicon, basic features like its semiconducting behavior or the optical absorption threshold are still present. So, space symmetry appeared as a convenient but not required modeling tool. The alternate approach was a “chemical” one, notably championed by J. C. Phillips [9], which considered for example the valence band as the product of the bonding states due to the formation of chemical bonds.

These conceptual issues notwithstanding, the crystalline-solid approach was very successful and very widely applied. In fact, it practically dominated the early evolution of semiconductor physics. This enhanced, in particular, the impact of the Baldereschi point [1] in the 1970s. And deservedly catapulted its author—still in his twenties—to worldwide fame.

approximations des propriétés moyennes déterminées par tous les vecteurs  $\mathbf{k}$ . Selon ses propres mots [1] :

*Un nouveau point spécial dans la zone de Brillouin est introduit. Il est défini comme le point tel que la valeur que toute fonction périodique du vecteur d'onde prend en ce point est une excellente approximation de la valeur moyenne de la même fonction dans toute la zone de Brillouin. Ce point spécial est appelé « point de valeur moyenne » et est dicté par la symétrie du cristal.*

Dans cette description, le terme « zone de Brillouin » fait référence [4,5] à la cellule unitaire du réseau périodique dans l'espace « réciproque » des vecteurs  $\mathbf{k}$  – dont la symétrie reflète celle du cristal dans l'espace réel. Chacun de ses points définit un vecteur  $\mathbf{k}$ . Grâce à la découverte de Baldereschi, les calculs des propriétés électroniques n'avaient pas besoin d'être effectués pour de nombreuses directions et vecteurs  $\mathbf{k}$ , mais pouvaient être limités à un vecteur  $\mathbf{k}$  spécifique, ce qui permettait d'obtenir des résultats avec un bon niveau de précision, souvent adéquats pour des applications pratiques.

Plusieurs calculs des propriétés électroniques sont ainsi devenus possibles en évitant une utilisation intensive – et coûteuse – des ordinateurs. Même avec les ressources informatiques limitées de l'époque, des liens entre la physique quantique fondamentale et les propriétés pratiques des semi-conducteurs ont pu être établis pour plusieurs cas intéressants. Par conséquent, l'utilisation du point de Baldereschi et d'autres concepts similaires est devenue très populaire.

Cette approche avait bien sûr ses limites. Tout d'abord, même les calculs pour un seul vecteur  $\mathbf{k}$  n'étaient pas triviaux. De plus, les solutions étaient des approximations, même si elles étaient assez bonnes pour les applications pratiques. Plus fondamentalement, le résultat de Baldereschi [1] ne fonctionnait que pour des solides cristallins et hautement symétriques, pour lesquels, par exemple, l'on peut définir une zone de Brillouin.

Ce dernier point reflète en fait un problème conceptuel plus général qui a caractérisé les débuts de la physique du solide. Une grande partie de la théorie





The beautiful Murray Hill site of Bell Laboratories, which hosted some of the important early years of Alfonso Baldereschi's career. Reproduced with permission from Nokia Corporation and AT&T Archives | Le beau site de Murray Hill des Bell Laboratories, qui a accueilli une partie des années importantes du début de la carrière d'Alfonso Baldereschi. Reproduit avec l'autorisation de la Nokia Corporation and AT&T Archives.

## Some funny anecdotes

In the article [1] published in 1973, Baldereschi's affiliation was "Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974". This was a very prestigious institution, the top one in the world for condensed matter physics and many other key areas of science and technology. Bell Labs had been notably the home of the twice Nobel laureate John Bardeen, and was becoming the "result factory" that produced a large portion of the technologies of today—from digital computers to cellular phones and from satellite communications to advanced software [18].

Alfonso arrived at Bell Labs in 1971, after getting his doctoral degree in Pisa in 1967 with Franco Bassani, a legendary world leader in solid-state theory. Before being hired in Murray Hill, Alfonso had briefly worked (1969-70) at the University of Illinois in

avait été développée pour les matériaux cristallins, en exploitant leur symétrie spatiale [8]. Le succès de cette approche, inaugurée par le théorème de Bloch [13], était indéniable. Par exemple, elle a permis d'expliquer les propriétés optiques et de conduction de semi-conducteurs technologiques fondamentaux tels que le silicium cristallin et le germanium. Toutefois, ce succès a également soulevé quelques questions. Par exemple, si le silicium cristallin est transformé par un traitement quelconque en silicium amorphe, ses caractéristiques de base telles que le comportement semi-conducteur ou le seuil d'absorption optique sont toujours présentes. La symétrie spatiale est donc apparue comme un outil de modélisation pratique, mais non nécessaire. Une autre approche, proposée notamment par J. C. Phillips [9], était de nature « chimique » et considérait par exemple la bande de valence comme étant le produit des états électroniques liés causés par la formation de liaisons chimiques.

En dépit de ces problèmes conceptuels, l'approche fondée sur les solides cristallins a connu un grand succès et a été très largement appliquée. En fait, elle a pratiquement dominé l'évolution initiale de la physique des semi-conducteurs. Cela a renforcé, en particulier, l'impact du point de Baldereschi [1] dans les années 1970 et a propulsé, à juste titre, son auteur – encore très jeune – vers une renommée mondiale.

## Quelques anecdotes amusantes

Dans l'article [1] publié en 1973, l'affiliation de Baldereschi était « Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974 ». Il s'agissait d'une institution très prestigieuse, la première au monde pour la physique de la matière condensée et pour d'autres nombreux domaines clés de la science et de la technologie. Les Laboratoires Bell avaient notamment été l'affiliation de John Bardeen, deux fois prix Nobel. Ils étaient en train de devenir la « fabrique de résultats » produisant une grande partie des technologies d'aujourd'hui – des ordinateurs numériques aux téléphones cellulaires et des communications par satellite aux logiciels avancés [18].

Alfonso était arrivé aux Laboratoires Bell en 1971, après avoir obtenu son doctorat à Pise en 1967 sous



Urbana-Champaign, another outstanding hub of that period in condensed-matter science.

Bell Labs was a wonderful institution that allowed bright young scientists to express the best of themselves, without the oppressive limitations of standard academia. I know these facts from personal experience, having worked myself in Murray Hill in 1975-77. Alfonso had left for Europe but was still a frequent visitor. We thus became close friends (we were both born in 1946)—a relationship that over the years also led to excellent research collaborations [19-24].

Alfonso's time at Bell Laboratories had not been immune from problems. He systematically overlooked practicalities. In particular, when moving to the United States he forgot about his military service obligations, which were mandatory in Italy at that time. So, during a visit to Italy he was detained by the military authorities and forced to serve. This could have interrupted his research activities for a year and a half, torpedoing a period of extraordinary productivity. Luckily, Alfonso discovered a clever "escamotage" that avoided this disaster by allowing him to leave the army, later baptized as the "Baldereschi method" for escaping military service while holding an academic job abroad.

Alfonso's relationship with Bell Labs was also complicated by personal issues. The Murray Hill managers did not allow permanent research positions but still wanted to keep their young talents for a reasonably long period of time. Alfonso, however, did not want to stay out of Italy for years. The Murray Hill managers tried to convince him not to leave, using subliminal messages to tell him how much they loved him and appreciated his talents. They notably installed in his office one of the first "touchtone telephones", a very prestigious status symbol in Murray Hill.

In the end, however, the subliminal messages did not work: Alfonso decided to return to Europe in the early 1970s. But Italy, with its archaic baronial academic system, could not offer him a position adequate to his already-high stature. So, he landed at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) in Switzerland.

la direction de Franco Bassani, un leader mondial légendaire de la théorie de l'état solide. Avant d'être engagé à Murray Hill, il avait brièvement travaillé (1969-70) à l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign, un autre site remarquable pendant cette période dans le domaine de la science de la matière condensée.

Les Laboratoires Bell étaient une institution merveilleuse qui permettait à de jeunes scientifiques de talent d'exprimer le meilleur d'eux-mêmes, sans les limites oppressantes du monde universitaire. Je connais ces faits par expérience personnelle, ayant moi-même travaillé à Murray Hill en 1975-77. Alfonso avait quitté les Laboratoires Bell et était parti pour l'Europe, mais restait un visiteur fréquent. Nous sommes ainsi devenus de très bons amis (nous étions tous deux nés en 1946) – une relation qui, au fil des ans, a également conduit à d'excellentes collaborations de recherche [19-24].

La collaboration d'Alfonso avec les Laboratoires Bell n'a pas été exempte de problèmes. Il négligeait systématiquement les aspects pratiques. En particulier, lorsqu'il s'était installé aux États-Unis, il avait oublié son service militaire, obligatoire en Italie à l'époque. C'est ainsi que, lors d'une visite en Italie, il a été interpellé par les autorités de l'armée et contraint de commencer son service. Cela aurait pu interrompre ses activités de recherche pendant un an et demi, torpillant une période de productivité extraordinaire. Heureusement, Alfonso a découvert un escamotage astucieux – plus tard baptisé « méthode Baldereschi » – qui a évité ce désastre en lui permettant de quitter l'armée pour échapper au service militaire en utilisant un poste de recherche à l'étranger.

La relation d'Alfonso avec les Laboratoires Bell a également été compliquée par des problèmes personnels. Les responsables de Murray Hill n'aimaient pas les postes de recherche permanents, mais souhaitaient néanmoins garder leurs jeunes talents pendant une période assez longue. Au contraire, Alfonso ne voulait pas rester en dehors de l'Italie pendant des années. Les dirigeants de Murray Hill ont essayé de le convaincre de ne pas partir, en utilisant des messages subliminaux pour lui communiquer combien ils



The Bell System “touchtone phone”, a prestigious status symbol used (in vain) by the Murray Hill managers to convince Baldereschi not to leave the company | Le «téléphone à touches» de Bell System, un symbole de statut prestigieux utilisé (en vain) par les dirigeants de Murray Hill pour convaincre Baldereschi de ne pas quitter l'entreprise.

There, again, Alfonso's situation was rather complicated. The EPFL was the recently created junior partner of the Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETHZ) and had not yet reached the excellent academic rank it has today. But it already enjoyed an excellent reputation in condensed-matter physics, thanks to experimental superstars like Jean-Pierre Borel and Emanuel Moser. However, it did not immediately offer Alfonso the professorship that he certainly deserved.

One obstacle was the incredible opposition of the EPFL's Laboratoire de physique théorique (LPT) to practical collaborations with experimental groups, which was one of Baldereschi's strengths. As a result, Alfonso was hired at the EPFL not as a professor but as a scientist. This was the result of a revolt of the institutes working in experimental and applied physics against the attitude of the LPT. So other physics

l'aimaient et appréciaient ses talents. Ils ont notamment installé dans son bureau l'un des premiers « téléphones à touches », un symbole très prestigieux à Murray Hill.

En fin de compte, les messages subliminaux n'ont pas fonctionné : Alfonso a décidé de retourner en Europe au début des années 1970. Mais l'Italie, avec son système académique baronnial archaïque, ne pouvait pas lui offrir un poste à la hauteur de sa stature déjà élevée. Il arriva alors à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), en Suisse.

Là encore, la situation d'Alfonso était plutôt compliquée. L'EPFL était le partenaire junior récemment créé de l'Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETHZ), et n'avait pas encore atteint les excellents classements académiques d'aujourd'hui. Mais elle avait déjà une excellente réputation en physique de la matière condensée, grâce à des superstars expérimentales comme Jean-Pierre Borel et Emmanuel Mooser. Cependant, elle n'a pas immédiatement offert à Alfonso le poste de professeur qu'il méritait sans doute.

L'un des obstacles était l'incroyable opposition du Laboratoire de physique théorique (LPT) de l'EPFL aux collaborations pratiques avec les groupes expérimentaux, l'un des points forts de Baldereschi. Alfonso a donc été engagé à l'EPFL non pas en tant que professeur, mais comme chercheur. C'était le résultat d'une révolte des laboratoires de physique expérimentale et appliquée contre l'attitude du LPT. Ainsi, d'autres secteurs de la physique, et non le LPT, ont accueilli plusieurs des activités de physique théorique de pointe de l'EPFL à l'époque, notamment celles de la superstar Baldereschi.

La situation professionnelle frustrante d'Alfonso à l'EPFL a finalement changé en 1989, lorsqu'il a été nommé professeur ordinaire. Entre-temps, il avait joué un rôle clé dans la promotion de ma propre nomination en 1990 comme professeur ordinaire de physique appliquée à l'EPFL, ce dont je lui étais – et suis encore – fortement et personnellement reconnaissant. Je considère l'appréciation d'Alfonso pour mes recherches comme l'un des points les plus forts de ma vie.

teams and not the LPT hosted several top EPFL theoretical physics activities of that time, notably those of superstar Baldereschi.

Alfonso's frustrating job situation at the EPFL finally changed in 1989, when he was nominated full professor. In the meantime, he had played a key role in promoting my own 1990 nomination as full EPFL Professor of Applied Physics, for which I was—and still am—strongly and personally indebted to him. I do consider Alfonso's appreciation of my research to be one of the highlights of my life.

During the long path to EPFL professorship, Alfonso's situation was further complicated by his nomination in 1980 as professor at the University of Trieste. For years, he continuously commuted between Lausanne and Trieste, spending innumerable hours in the precarious trains connecting the two cities.

I once shared with him this awful overnight trip. The train was (in theory) the heir of the legendary Orient Express but had been reduced to a shabby and very slow Zagreb-Geneva connection. During the journey with Alfonso, I discovered his strategy to get a sleeping accommodation – without the required reservations that he systematically forgot to make. The solution was bribing in cash the Croatian train director—who luckily included in the bargain a good bottle of smuggled whisky!

How could Alfonso produce so many outstanding results under these exceedingly difficult circumstances? This is still a mystery for me. And I wonder how much more extensive his contributions of that period could have been with a more normal lifestyle and less time wasted for sterile commuting!

## Isoelectronic impurities

I shall now mention Baldereschi's wonderful work on the theory of isoelectronic impurities [2,3]. Once again, its importance cannot be really appreciated without knowing the essential historical background.

In the 1970s, impurities and other defects in semiconductors were already a major topic of research because of their practical applications, which were

Au cours du long chemin vers le poste de professeur à l'EPFL, la situation d'Alfonso avait été encore plus compliquée par sa nomination en 1980 comme professeur à l'Université de Trieste. Pendant des années, il a continuellement fait la navette entre Lausanne et Trieste, passant d'innombrables heures dans les mauvais trains reliant les deux villes.

Une fois, j'ai partagé avec lui ce terrible voyage de nuit. Le train était (en théorie) l'héritier du légendaire Orient express, mais il avait été réduit à une minable et très lente liaison entre Zagreb et Genève. Au cours du voyage avec Alfonso, j'ai découvert sa stratégie pour obtenir une couchette sans les réservations requises qu'il oubliait systématiquement de faire. La solution consistait à payer en espèces le chef de bord du train croate – qui, heureusement, incluait dans l'affaire une bonne bouteille de whisky de contrebande !

Comment Alfonso a-t-il pu produire autant de résultats exceptionnels dans ces circonstances extrêmement difficiles ? C'est encore un mystère pour moi. Et je me demande à quel point ses contributions de l'époque auraient pu être plus importantes avec un style de vie plus normal, et moins de temps perdu pour ses déplacements !

## Impuretés isoélectroniques

Je vais maintenant aborder le merveilleux travail de Baldereschi sur la théorie des impuretés isoélectroniques [2,3]. Une fois de plus, on ne peut en apprécier l'importance sans en connaître le contexte historique essentiel.

Dans les années 1970, les impuretés et autres défauts dans les semi-conducteurs étaient déjà un sujet de recherche majeur, en raison de leurs applications pratiques, essentielles pour l'explosion de la microélectronique moderne [11]. Les impuretés pouvaient notamment être utilisées comme donneurs ou accepteurs, ouvrant la porte à de nombreuses applications.

La notion de « dopage » – l'introduction artificielle de donneurs ou d'accepteurs pour contrôler les propriétés optiques et de conduction – avait été introduite pendant la Seconde Guerre mondiale, brevetée peu après [25] et affinée [26] au début des années 1950.

essential for the explosion of modern microelectronics [11]. Impurities could be notably used as “donors” or “acceptors”, opening the door to many applications.

The notion of “doping”—the artificial introduction of donors or acceptors to control transport and optical properties—had been introduced during World War II, patented shortly afterwards [25] and refined [26] in the early 1950s. The theoretical background based on quantum mechanics was solidly established for impurities with valence different from the host crystal atoms. But, in the 1970s, the researchers’ attention was shifting to more intriguing and complicated cases.

One key target [2,3,27,28] were the “isoelectronic” impurities, i.e., atoms with the same valence as those they replaced—such as for example nitrogen substituting phosphorous in GaP. The (nonexistent) valence difference could not be invoked to explain donor or acceptor states in the forbidden gap, when they existed. Simplistic explanations like the difference in electronegativity only worked to a limited extent. The actual mechanisms were much more complicated [2,3,27,28] and constituted a challenge for the best theorists of that time.

What stimulated their interest? The primary reason was the realization of efficient LEDs, which are now a gigantic commercial technology but were still very problematic in the 1970s. LEDs were notably needed for the visible displays of pocket calculators. Without efficient LEDs, their batteries would have been big, heavy, and quickly depleted.

LEDs based on semiconductors require materials with forbidden gaps large enough to allow the emission of visible photons. But the gaps of the most popular materials like silicon, germanium or GaAs are much too narrow. Today, visible LEDs are widespread, effective and inexpensive, thanks to the use of GaN, a material with a very wide gap. However, in the 1970s, GaN technology was so primitive that most experts did not believe in its feasibility at all. And, in fact, it took decades and some lucky breakthroughs to finally exploit the potential of this material.

In the 1970s, the semiconductor of preference for LEDs was GaP, whose gap is quite wide and allows

Les fondements théoriques basés sur la mécanique quantique étaient solidement établis pour les impuretés dont la valence est différente de celle des atomes du cristal hôte. Mais, dans les années 1970, l’attention des chercheurs s’est portée sur des cas plus intrigants et plus compliqués.

L’une des principales cibles [2,3,27,28] était les impuretés « isoélectroniques », c’est-à-dire les atomes ayant la même valence que ceux qu’ils remplacent – comme, par exemple, l’azote remplaçant le phosphore dans le GaP. La différence de valence (inexistante) ne pouvait pas être invoquée pour expliquer les états de type donneur ou accepteur dans la bande interdite, lorsqu’ils existaient. Les justifications simplistes telles que la différence d’électronégativité ne fonctionnaient que dans une mesure limitée. Les mécanismes réels étaient beaucoup plus compliqués [2,3,27,28] et constituaient un défi pour les meilleurs théoriciens de l’époque.

Qu’est-ce qui a stimulé leur intérêt ? La première raison a été la réalisation de LED efficaces. Celles-ci représentent aujourd’hui une technologie commerciale gigantesque, mais étaient encore très problématiques dans les années 1970. Les LED étaient notamment nécessaires pour l’affichage des résultats des calculatrices de poche. Sans LED efficaces, leurs batteries auraient été énormes, lourdes et rapidement épuisées.

Les LED basées sur des semi-conducteurs nécessitaient des matériaux avec des bandes interdites suffisantes pour permettre l’émission de photons visibles. Mais les bandes interdites des matériaux les plus courants comme le silicium, le germanium ou le GaAs étaient beaucoup trop étroites. Aujourd’hui, les LED visibles sont très répandues, efficaces et peu coûteuses, grâce à l’utilisation du GaN, un matériau avec une très grande bande interdite. Cependant, dans les années 1970, la technologie GaN était si primitive que la plupart des experts ne croyaient pas du tout à sa faisabilité. Et, en fait, il a fallu des décennies et quelques résultats chanceux pour finalement exploiter le potentiel de ce matériau.

Dans les années 1970, le semi-conducteur de prédilection pour les LED était le GaP, dont la bande interdite

indeed the emission of visible light. But with a big problem: optical transitions involving “excitonic” electronic states near the bottom of the conduction band and empty states close to the top of the valence band require a change in  $\mathbf{k}$  vector, since the forbidden gap is “indirect” in  $\mathbf{k}$  space. In other words, the initial and final states correspond to different  $\mathbf{k}$  vectors in the Brillouin zone.

Optical transitions across an indirect gap imply a change in the (crystal) momentum [27,28]. To satisfy the principle of momentum conservation, they require the intervention of a third entity besides the electron and the emitted photon. This typically is a lattice vibration and its corresponding quasi-particle—the “phonon”.

But there is a price to pay: Three-body phenomena are much less likely to occur than two-body ones. This means that the effectiveness of light emission is sharply decreased. We can indeed see this feature by comparing the intense emission of modern white-emitting LEDs and the feeble GaP-based red LEDs of the old pocket calculators.

This problem stimulated interest in isoelectronic impurities in the 1970s. Indeed, electronic states characterized by particular properties form in the band gap. They are spatially localized, and this corresponds—according to the uncertainty principle—to a delocalization in the reciprocal  $\mathbf{k}$  space. The electrons involved in the optical transitions can automatically provide a wide range of  $\mathbf{k}$  vectors, guaranteeing momentum conservation without the intervention of third parties like the phonons.

The link between isoelectronic impurities, optical properties, and luminescent devices was well understood by Baldereschi. In his own words from reference [3]:

*The host atom to be substituted and the substitutional isoelectronic impurity necessarily differ in their electronic core structure. This core difference may give rise to highly localized impurity states in the bandgap (isoelectronic traps) which are responsible for significant modifications in the optical properties of the host crystal ... In particular, isoelectronic traps have*

est assez grande et permet effectivement l’émission de lumière visible. Mais avec un grand problème : les transitions optiques impliquant des états électroniques du type « exciton » près du minimum de la bande de conduction et des états vides près du maximum de la bande de valence nécessitent un changement du vecteur  $\mathbf{k}$ , puisque la bande interdite est « indirecte » dans l’espace  $\mathbf{k}$ . Autrement dit, les états initiaux et finaux des bandes de conduction et de valence correspondent à des vecteurs  $\mathbf{k}$  différents dans la zone de Brillouin.

Les transitions optiques à travers d’une bande interdite indirecte impliquent un changement de la quantité de mouvement (cristallin) [27,28]. Pour satisfaire au principe de conservation de la quantité de mouvement, elles nécessitent l’intervention d’une troisième entité en plus de l’électron et du photon émis. Il s’agit généralement d’une vibration du réseau cristallin et de la quasi-particule correspondante, le « phonon ».

Mais il y a un prix à payer : les phénomènes à trois corps sont beaucoup moins fréquents que les phénomènes à deux corps. Cela signifie que l’efficacité de l’émission de lumière est fortement diminuée. On peut d’ailleurs s’en rendre compte en comparant l’émission intense des LED blanches modernes et les faibles LED rouges à base de GaP des anciennes calculatrices de poche.

Ce problème a stimulé, dans les années 1970, l’intérêt pour les impuretés isoélectroniques. En effet, des états électroniques caractérisés par des propriétés particulières se forment dans la bande interdite. Ils sont localisés dans l’espace, ce qui correspond – selon le principe d’incertitude – à une délocalisation dans l’espace  $\mathbf{k}$ . Les électrons impliqués dans les transitions optiques peuvent automatiquement fournir une large gamme de vecteurs  $\mathbf{k}$ , garantissant la conservation de la quantité de mouvement sans l’intervention d’autres entités telles que les phonons.

Le lien entre les impuretés isoélectroniques, les propriétés optiques et les dispositifs luminescents a été bien compris par Baldereschi. Selon ses propres mots dans la réf. [3] :

*L’atome hôte à substituer et l’impureté isoélectronique substitutive diffèrent nécessairement dans*



*high radiative recombination efficiency and this is the reason of their importance in the production of electroluminescence devices.*

This concrete interest was, therefore, a motivation for his theoretical work on isoelectronic impurities [2,3] as well as for the efforts of other top solid-state physicists [27,28]. The challenges were formidable, stretching to the limit the conceptual and computational capabilities of the time. With this work [2,3], Alfonso *de facto* demonstrated that a world-class theorist could handle very complex problems even without the brute force of future supercomputers.

This, in my opinion, explains the pivotal and long-lasting importance of Baldereschi's work on isoelectronic impurities [2,3]. The historical perspective has changed and the practical motivations of the 1970s have largely disappeared. As we have seen, GaN technology has solved the technological problems of visible-light LEDs in a most satisfactory way.

But this does not diminish the historical importance of Baldereschi's work [2,3]. In essence, it was a research project that brought the theoretical modeling of semiconductor properties to its limits. Afterwards, the sky was the limit: solid-state theorists dared to tackle very complicated systems even with limited computational resources.

## What is Baldereschi's legacy?

Looking back at the professional history of Alfonso Baldereschi, one question comes to mind. What remains today of his 257 Web of Science publications? Should we focus just on some highlights? Or look at them collectively? In many cases, their importance was initially determined by reasons that are now obsolete. Is there, nevertheless, a long-lasting impact that did not dissipate over the years?

As for many distinguished research careers, the answer is absolutely positive. One wonderful benefit of our profession is that nothing that we do is really lost but remains part of a gigantic construction of mankind.

*leur structure électronique de base. Cette différence fondamentale peut donner lieu à des états d'impureté très localisés dans la bande interdite (pièges isoélectroniques) qui sont responsables de modifications significatives des propriétés optiques du cristal hôte (...). En particulier, les pièges isoélectroniques ont une efficacité de recombinaison radiative élevée, ce qui explique leur importance dans la production de dispositifs à électroluminescence.*

Cet intérêt concret a donc motivé ses travaux théoriques sur les impuretés isoélectroniques [2,3] ainsi que les efforts d'autres physiciens du solide de haut niveau [27,28]. Les défis étaient considérables, poussant à la limite les capacités conceptuelles et de calcul de l'époque. Avec ce travail [2,3], Alfonso a démontré *de facto* qu'un théoricien de classe mondiale pouvait traiter des problèmes très complexes, même sans la force brute des futurs superordinateurs.

Cela explique, à mon avis, l'importance cruciale et durable des travaux de Baldereschi sur les impuretés isoélectroniques [2,3]. La perspective historique a changé et les motivations pratiques des années 1970 ont largement disparu. Comme nous l'avons vu, la technologie GaN a résolu les problèmes technologiques des LED à lumière visible de manière très satisfaisante.

Mais cela ne diminue en rien l'importance historique des travaux de Baldereschi [2,3]. Il s'agit essentiellement d'un projet de recherche qui a repoussé les limites de la modélisation théorique des propriétés des semi-conducteurs. Par la suite, tout est devenu possible : les théoriciens de l'état solide ont osé s'attaquer à des systèmes très compliqués, même avec des ressources de calcul limitées.

## Quel est l'héritage de Baldereschi?

Lorsque l'on se penche sur l'histoire professionnelle d'Alfonso Baldereschi, une question vient à l'esprit. Que reste-t-il aujourd'hui de ses 257 publications sur le Web of Science ? Devrions-nous nous concentrer sur quelques points forts ? Ou les considérer dans leur ensemble ? Dans de nombreux cas, leur importance a été déterminée à l'origine pour des raisons

The problem, however, is how to pass on to our junior colleagues the knowledge about the significance of past contributions. They cannot rely, like us, on memories, in particular about the exciting circumstances surrounding old research developments, and do not have direct experience of their historical background. That is why I decided to honor here the memory of my friend Alfonso Baldereschi by illustrating the history that paved the way to two of his most significant contributions [1–3] and facilitated his success in achieving them.

In principle, many other results by Alfonso could have deserved similar presentations. For example, I could have described [20,22–24] the exciting time when, in Lausanne, he was proposing clever ways to control band discontinuities at semiconductor heterojunction interfaces, a concrete realization of the dream of “bandgap engineering” [29]. We were literally waiting in the corridors for his results, to quickly check them experimentally with our photoemission techniques. This is another wonderful reminiscence for myself and for my experimental collaborators of that time.

So this report of mine is certainly not complete. But “something” is better than “nothing”. I do hope that the facts that I evoked here will enhance Alfonso’s image in the eyes of our younger colleagues and allow them to better appreciate one of the world leaders in the history of solid-state science.

- [1] A. Baldereschi, Mean-value point in the Brillouin zone, *Phys. Rev B* **7**, 5212 (1973).
- [2] A. Baldereschi, J. J. Hopfield, Binding to isoelectronic impurities in semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 171 (1972).
- [3] A. Baldereschi, Theory of isoelectronic traps, *J. Lumin.* **7**, 79 (1973).
- [4] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8<sup>th</sup> edition (Wiley, Hoboken, 2005).
- [5] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (Wiley, Hoboken, 1991).
- [6] A. J. Dekker, *Solid State Physics* (Springer, New York, 1969).

aujourd’hui obsolètes. Y a-t-il néanmoins un impact durable qui ne s’est pas dissipé au fil des ans ?

Comme pour de nombreuses carrières de chercheurs émérites, la réponse est absolument positive. L’un des grands avantages de notre profession est que rien de ce que nous faisons n’est vraiment perdu, mais reste comme un élément d’une gigantesque construction de l’humanité.

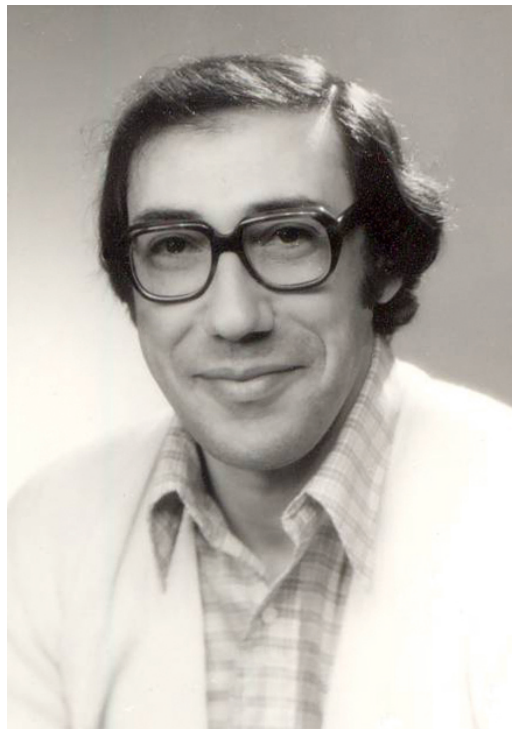
Le problème, cependant, est de savoir comment transmettre à nos jeunes collègues la connaissance de l’importance des contributions passées. Ils ne peuvent pas, comme nous, se baser sur leur mémoire, notamment en ce qui concerne les circonstances passionnantes qui ont entouré les anciens développements de la recherche. Ils n’ont pas non plus d’expérience directe de leur contexte historique. C’est pourquoi j’ai décidé d’honorer ici la mémoire de mon ami Alfonso Baldereschi en illustrant l’histoire qui a ouvert la voie à deux de ses contributions les plus importantes [1–3] et qui lui a permis de les réaliser avec succès.

En principe, de nombreux autres résultats obtenus par Alfonso auraient mérité des présentations similaires. Par exemple, j’aurais pu décrire [20,22–24] l’époque passionnante où, à Lausanne, il proposait des méthodes astucieuses pour contrôler les discontinuités des bandes aux interfaces des hétérojonctions des semi-conducteurs – une réalisation concrète du rêve de « l’ingénierie de la bande interdite » [29]. Nous attendions littéralement ses résultats dans les couloirs, afin de les vérifier rapidement par nos techniques de photoémission. C’est un autre souvenir merveilleux pour moi et pour mes collaborateurs expérimentaux de l’époque.

Mon rapport n’est donc certainement pas complet. Mais « quelque chose » vaut mieux que « rien ». J’espère que les faits que j’ai évoqués ici amélioreront l’image d’Alfonso aux yeux de nos jeunes collègues et leur permettront de mieux apprécier l’un des leaders mondiaux de l’histoire de la science de l’état solide.

- [7] J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge University Press, New York, 1964).
- [8] G. F. Bassani, G. Pastori Parravicini, *Electronic States and Optical Transitions in Solids* (Pergamon, Oxford 1975).
- [9] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors* (Academic Press, Cambridge, Massachussets, 1973).
- [10] G. Grosso, G. Pastori Parravicini, *Solid State Physics* (Elsevier, Amsterdam, 2013).
- [11] S. M. Sze, K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices* (Wiley, Hoboken, 2006).
- [12] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Spectra of Semiconductors* (Springer, Berlin, 1988).
- [13] A. Sommerfeld, Zur Elektronentheorie der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik, *Z. Phys.* **47**, 1 (1928).
- [14] F. Bloch, Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern, *Z. Phys.* **52**, 555 (1959).
- [15] P. Schwerdtfeger, The pseudopotential approximation in electronic structure theory, *ChemPhysChem* **12**, 3143 (2011).
- [16] J. Bardeen, W. H. Brattain, The transistor, a semi-conductor triode, *Phys. Rev.* **74**, 230 (1948).
- [17] W. Shockley, The theory of  $p$ - $n$  junctions in semiconductors and  $p$ - $n$  junction transistors, *Bell System Tech. J.* **28**, 435 (1949).
- [18] G. Margaritondo, Meucci-Bell: present implications of a famous controversy, *Giornale di Fisica* **51**, 57 (2020).
- [19] J. E. Rowe, G. Margaritondo, H. Kaspers, A. Baldereschi, Polarized-light photoelectron spectroscopy of GaSe and GaS with synchrotron radiation, *Solid State Commun.* **20**, 921 (1976).
- [20] M. Marsi, S. La Rosa, Y. Hwu, F. Gozzo, C. Coluzza, A. Baldereschi, G. Margaritondo, J. T. McKinley, S. Baroni, R. Resta, Microscopic manipulation of homojunction band lineups, *J. Appl. Phys.* **71**, 2048 (1992).
- [21] T. dell'Orto, J. Almeida, C. Coluzza, A. Baldereschi, G. Margaritondo, M. Cantile, S. Yildirim, L. Sorba, A. Franciosi, Internal photoemission studies of artificial band discontinuities at buried GaAs(100)/GaAs(100) homojunctions, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2111 (1994).
- [22] G. Papp, C. Coluzza, M. Di Ventra, A. Baldereschi, G. Margaritondo, and Ben-Yuan Gu, The I-V characteristics of double barrier stair-wells, *Superlattice. Microst.* **17**, 117 (1995).
- [23] G. Papp, M. Di Ventra, C. Coluzza, A. Baldereschi, G. Margaritondo, Current rectification through a single-barrier resonant-tunneling quantum structure, *Superlattice. Microst.* **17**, 273 (1995).
- [24] J. Almeida, T. dell'Orto, C. Coluzza, A. Fasso, A. Baldereschi, G. Margaritondo, A. Rudra, H. J. Buhmann, M. Illegems, Inhomogeneous and temperature-dependent  $p$ -InGaAs/ $n$ -InP band offset modification by silicon  $\delta$  doping: An internal photoemission study, *J. Appl. Phys.* **78**, 3258 (1995).
- [25] J. R. Woodyard, Nonlinear circuit device utilizing germanium, *US Patent* 2530110 (1950).
- [26] M. Sparks, G. K. Teal, Method of making  $p$ - $n$  junctions in semiconductor materials, *US Patent* 2631356 (1953).
- [27] R. A. Faulkner, J. J. Hopfield, Isoelectronic impurities in semiconductors, in *Localized Excitations in Solids*, edited by R. F. Wallis (Springer, Boston 1968), pp. 218-238.
- [28] J. W. Allen, Isoelectronic impurities in semiconductors: a survey of binding mechanisms, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **4**, 1936 (1971).
- [29] F. Capasso, G. Margaritondo (Eds.), *Heterojunction Band Discontinuities: Physics and Device Applications* (North-Holland, Amsterdam, 1987).

# Forger Lausanne en pôle d'excellence







# Per Alfonso Pour Alfonso

---

Franco Meloni

---

*Nessuno potrà dimenticare un buon maestro*

Una delle necessità in Fisica è interagire al massimo quando i neuroni funzionano e si deve usare il tempo al meglio. Questo significa che bisogna valutare con cura quanto sacrificare sull'altare della Scienza, per non rischiare, ad esempio, la tenuta della famiglia.

Losanna aveva ottime carte per essere un buon posto per "fare" fisica. Non troppo lontano, molto rassicurante, ideale per vecchi e bambini, ottima scuola di Materia Condensata. Mooser, il fisico più imponente esistente, stazza alla Nero Wolfe, stava cercando di contrastare l'egemonia USA, che vuol dire Bell Labs e IBM. Lo ricordo con impermeabile e borsa che correva alla stazione in direzione Berna in cerca di finanziamenti che permettessero al Laboratorio de physique appliquée dell'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) di avere i migliori ricercatori del momento.

Nel 1975 la mia idea era di andare da Ziman. Contatti vaghi facevano presagire collaborazioni fruttuose. L'incontro in un congresso a Budapest ha modificato, come un battito d'ali di una coloratissima farfalla, la mia vita. Gianni, mio relatore di tesi e testimone

*Personne ne pourra oublier un bon maître*

Une des nécessités en physique est d'interagir au maximum lorsque les neurones fonctionnent, et de profiter au mieux du temps. Cela signifie qu'il faut évaluer soigneusement ce qu'il faut sacrifier sur l'autel de la science, pour ne pas risquer, par exemple, la stabilité de sa famille.

Lausanne a un excellent potentiel pour être un bon endroit où « faire » de la physique. Pas trop loin, très rassurant, idéal pour les anciens et les jeunes, avec une excellente école de matière condensée. Mooser, le physicien le plus imposant, avec une stature à la Nero Wolfe, essaie de contrer l'hégémonie américaine, représentée par les Bell Labs et IBM. Je me souviens de lui en imperméable et avec sa sacoche, courant vers la gare en direction de Berne à la recherche de financements permettant au Laboratoire de physique appliquée de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) d'attirer les meilleurs chercheurs du moment.

En 1975, mon idée était d'aller chez Ziman. Des contacts vagues laissaient présager des collaborations fructueuses. Une rencontre lors d'un congrès à Budapest a modifié ma vie, tel le battement d'ailes d'un papillon coloré. Gianni, mon directeur de thèse et témoin de

di nozze, mi suggerisce dall'Ungheria di cambiare rotta: non Bristol, UK, ma Lausanne, CH. Ha incontrato un giovane fisico molto, molto promettente: Scuola Normale e poi ritorno dalla lontana America. Con l'incoscienza dei giovani anni, imbarco moglie, figlia di due anni, lettino, chili di pasta, proiettore per diapositive, salsiccia, formaggio e limoni per il Lago Lemano. Budget messo a disposizione dall'Unità Gruppo Nazionale di Struttura della Materia (GNSM): un milione di lire, ai tempi fragilmente assottigliate dal cambio col franco svizzero che comunque non arrivava a 200 lire.

Il Laboratorio era di fronte alla stazione. Incredulo, salgo una scala che partiva da un atrio che raccoglieva: un parrucchiere per signora, un distributore di benzina, un bistrot e altri locali non meglio identificati. Ricordare vuol dire, a volte, associare un profumo, o più spesso un odore, al luogo visitato. È comunque molto improbabile collegare un forte odore di lacca per capelli, mischiato a fumi di scarico di motori esausti, a un laboratorio di fisica. Entro in un appartamento stracolmo di tavoli, provette, scaffali, stanze superaffollate, vecchi strumenti, una ciclopica perforatrice di schede, una cucina. Pausa caffè. Tutti, indistintamente strani, attorno a una Moka dell'altezza della Torre di Pisa. Il "ristretto" riempiva tazze da tè. Mi guardo intorno stralunato e vedo uno che mi sorride. Capelli alle spalle, pantaloni rosa e maglione rosa. Benvenuto, sono Alfonso.

Se non sembrasse banale, potrei dire che la mia vita è radicalmente cambiata dal momento in cui ho oltrepassato la soglia di quel posto confusionario, con profumo di *coiffeur pour dame* e puzze di acidi: il Laboratorio era sperimentale, noi teorici, oggetti accolti e ostentatamente mal sopportati. Ho incontrato i migliori fisici del momento, obbligati, nel grande *tour* nella vecchia Europa, a fermarsi a Losanna per la notorietà del Laboratorio. Negli anni, tanti e pochissimi, ho seguito la crescita di quella che è stata definita un'officina molto promettente della Fisica italiana. Scalpitanti scienziati e aspiranti al Nobel hanno fatto seminari, mangiato *raclette*, scritto lavori e scientificamente disossato, al Bavaria, stinchi di maiale con salsa al Madera. Mi sono divertito con ritmi di lavoro quasi disumani. Ma la Fisica chiede e bisogna rispondere.

mariage, me suggère depuis la Hongrie de changer de cap : non pas Bristol, au Royaume-Uni, mais Lausanne, en Suisse. Il a rencontré un jeune physicien très, très prometteur : Scuola Normale Superiore de Pise puis retour de la lointaine Amérique. Avec l'insouciance de mes jeunes années, j'embarque pour le lac Léman avec ma femme, ma fille de deux ans, un lit d'enfant, des kilos de pâtes, un projecteur de diapositives, de la saucisse, du fromage et des citrons. Le budget a été mis à disposition par l'unité Gruppo Nazionale di Struttura della Materia (GNSM) : un million de liras, une devise à l'époque fragilisée par le change avec le franc suisse qui n'atteignait pourtant pas 200 liras.

Le laboratoire était en face de la gare. Incrédule, je monte un escalier partant d'un hall qui abritait un coiffeur pour dames, une station-service, un bistrot et des locaux non identifiés. Se souvenir signifie, parfois, associer un parfum, ou plus souvent une odeur, à un lieu visité. Il est cependant très peu probable de relier une forte odeur de laque pour cheveux, mélangée aux émanations de moteurs fatigués, à un laboratoire de physique. J'entre dans un appartement rempli de tables, de tubes à essai, d'étagères, de pièces surpeuplées, de vieux instruments, d'une perforatrice de cartes d'ordinateur cyclopique, et d'une cuisine. Pause café. Tous, indistinctement étranges, autour d'une Moka haute comme la Tour de Pise. Le « ristretto » remplissait des tasses à thé. Je regarde autour de moi, un peu hébété, et je vois quelqu'un qui me sourit. Cheveux longs, pantalon rose et pull rose. Bienvenue, je suis Alfonso.

Si cela ne semblait pas banal, je peux dire que ma vie a radicalement changé depuis le moment où j'ai franchi le seuil de cet endroit confus, avec le parfum de salon de coiffure pour dame et la puanteur des acides. Le Laboratoire était expérimental, nous, les théoriciens, étions des objets accueillis et ostentatoirement mal supportés. J'ai rencontré les meilleurs physiciens du moment, contraints, lors de leur grand tour dans la vieille Europe, de s'arrêter à Lausanne en raison de la notoriété du Laboratorio. Au fil des ans, très et peu nombreux à la fois, j'ai suivi la croissance de ce qui a été défini comme un atelier très prometteur de la physique italienne. Des scientifiques impatients et des aspirants au prix Nobel ont donné des séminaires, mangé de la raclette, écrit des articles et

Alfonso preferiva procedere nella ricerca tralasciando di documentare il lavoro fatto con pubblicazioni che avrebbero, necessariamente, richiesto tempo, specie quando i censori pretendevano ulteriori chiarimenti. Questo fatto ha comportato alcuni problemi. Una sera, esaminando una mappa che riproduceva la densità di carica in composti allora studiati – era il CsAu, strano semiconduttore con soli due elettroni di valenza, – ho sacrificato un agnello per festeggiare la scoperta del Punto Medio, perché faceva risparmiare di un fattore 3000 il numero di calcoli molto impegnativi in memoria e tempo. Alfonso, con un mezzo sorriso, ha tirato fuori da un classificatore la bozza, scritta a matita, del lavoro annunciato in un congresso negli Stati Uniti. Venivano descritti l'esistenza e il metodo per calcolare le coordinate di quello che poi è diventato noto come il punto di Baldereschi. Il lavoro, particolarmente accurato, non è mai stato pubblicato e sostituito rapidamente con tre pagine di *Physical Review B*, volume 7, stesso numero che contiene un articolo di altri che, sfruttando l'illuminazione avuta al congresso ascoltando la presentazione di Alfonso, definisce alcuni altri *Special Points*.

*A new special point in the Brillouin zone is introduced. It is defined as the point such that the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone. This special point is termed the "mean-value point," and is dictated by the crystal symmetry. The coordinates of the mean-value point for cubic lattices are explicitly given. – A. Baldereschi, Phys. Rev. B 7, 5212 (1973).*

Alfonso, e questa è una caratteristica che mi ha sempre fatto apprezzare il suo stile di vita, non ha commentato la possibilità che gli venisse sottratta la primogenitura, lasciando che il tempo e la storia facessero il loro corso.

Le uscite su carta venivano consegnate ogni 20 minuti. Si facevano i turni per andare a prenderle. Il CDC era in basso, verso il lago. Bisognava attraversare Place de Milan con i fiori e i giochi dei bimbi. D'inverno ghiacciava, e una volta senza guanti stavo per perdere una mano per il freddo. Imparammo in fretta

désossé scientifiquement, dans la brasserie Bavaria, des jarrets de porc sauce Madère. Je me suis amusé avec des rythmes de travail presque inhumains. Mais la Physique exige et il faut répondre.

Alfonso préférait progresser dans la recherche sans documenter le travail effectué par des publications qui auraient, nécessairement, demandé du temps, surtout lorsque les censeurs exigeaient des éclaircissements supplémentaires. Cela a entraîné quelques problèmes. Un soir, en examinant une carte représentant la densité de charge dans des composés alors étudiés, comme le CsAu, un étrange semi-conducteur avec seulement deux électrons de valence, j'ai sacrifié un agneau pour célébrer la découverte du « point moyen », car cela permettait de diviser par 3 000 le nombre de calculs très exigeants en mémoire et en temps. Alfonso, avec un léger sourire, a sorti d'un classeur le brouillon, écrit au crayon, du travail annoncé lors d'un congrès aux États-Unis. Il décrivait l'existence et la méthode pour calculer les coordonnées de ce qui est maintenant appelé le point de Baldereschi. Ce travail, particulièrement minutieux, n'a jamais été publié et a rapidement été remplacé par trois pages dans *Physical Review B*, volume 7, le même numéro contenant un article qui, profitant de l'illumination obtenue lors du congrès en entendant la présentation d'Alfonso, définit certains autres *Special Points*.

*A new special point in the Brillouin zone is introduced. It is defined as the point such that the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone. This special point is termed the "mean-value point," and is dictated by the crystal symmetry. The coordinates of the mean-value point for cubic lattices are explicitly given. – A. Baldereschi, Phys. Rev. B 7, 5212 (1973).*

Alfonso – et c'est une caractéristique que j'ai toujours appréciée dans son style de vie – n'a pas commenté la possibilité qu'on lui enlève la primauté, laissant le temps et l'histoire suivre leur cours.

Les impressions sur papier étaient livrées toutes les 20 minutes. Nous allions les chercher à tour de rôle. Le CDC était en bas, vers le lac. Il fallait traverser la Place de Milan, avec ses fleurs et les jeux des enfants. En hiver, il gelait, et une fois, sans gants, j'ai failli perdre une main à cause du froid. Nous avons vite appris à économiser sur la longueur des impressions.

a risparmiare sulla lunghezza delle stampe. La carta era riciclata, e questo era dovuto alla nostra rieducazione ecologica. L'università era sempre indaffarata nell'autoperpetuarsi con concorsi sfiancanti. I posti pochissimi e sempre nella giungla del precariato. Finanziamenti irrisori. Proprio come adesso.

Ma la Fisica andava bene. Io mi sentivo come un bambino in un negozio di fantastici giocattoli. Avevo portato scatole di schede perforate che significavano programmi di calcolo di materiali con molti componenti. Subito Alfonso ha tracciato la rotta: perfezionare i calcoli e affrontare altri problemi. Il menu era molto nutrito anche per l'interazione con i gruppi sperimentali. Lavorare con Alfonso era gratificante e istruttivo. Nel nostro ambiente la concorrenza, sempre sollecitata, è estremamente pericolosa. Non avendo come risultato il diventare ricchi, il gioco si effettua solo su onore e gloria. Con Alfonso non ci sono mai stati problemi dati dal confronto. Era talmente più bravo di me che non dovevo sforzarmi per crederlo. L'alternativa era di dedicarsi a coltivazioni di pomodori oppure raggomitolarsi nel letto, al buio, con un pigiama a righe e con *La Nausea* vicino a me. È stato interessante verificare la tenuta della mia reale autovalutazione. Credo di essere sopravvissuto.

Il Laboratorio era un porto di mare. All'inizio, quando sembrava che il tempo potesse bastare per fare tutto, andavamo a prendere i nuovi arrivati alla stazione. Ricordo i primi tre: Annabella, stralunata e infredolita che da Roma iniziava la scalata alla gloria; Stefano, capelli, allora esistenti, tagliati stile corpi d'assalto; Roberto, sedotto dalla materia condensata dopo un breve amore nucleare. Tutti e tre, poi estremamente presenti nella mia vita, cercavano di conciliare una esistenza normale con i disagi della sistemazione lontani da casa.

Un incontro notevole è stato quello con Nunzio, mandato all'università con grandi sacrifici. Brillante laureato, ha varcato il mare con una borsa di studio per effettuare un dottorato presso la Lehigh University, in Pennsylvania, diventando poi ricercatore alla Xerox e in seguito alla IBM. Aveva conosciuto Alfonso negli States e nel 1976 aveva fatto un giro in Europa per vedere se fosse possibile tentare il concorso a cattedra. Risposte affettuosamente negative. Come da

Le papier était recyclé, ce qui était lié à notre rééducation écologique. L'université était toujours occupée à s'autoperpétuer avec des concours épuisants. Les postes étaient très rares et toujours dans la jungle de la précarité. Les financements étaient dérisoires. Tout comme maintenant.

Mais la physique se portait bien. Je me sentais comme un enfant dans un magasin de jouets fantastiques. J'avais apporté des boîtes de cartes perforées qui représentaient des programmes de calcul pour des matériaux à plusieurs composants. Rapidement, Alfonso a tracé la voie : perfectionner les calculs et aborder d'autres problèmes. Le menu était très riche, notamment en raison de l'interaction avec les groupes expérimentaux. Travailler avec Alfonso était gratifiant et instructif. Dans notre environnement, la concurrence, toujours sollicitée, est extrêmement dangereuse. Le but n'était pas de devenir riche, le jeu ne se faisait que pour l'honneur et la gloire. Avec Alfonso, il n'y a jamais eu de problèmes dus à la comparaison. Il était tellement meilleur que moi que je n'avais pas à m'efforcer de le croire. L'alternative était de se consacrer à la culture de tomates ou de se recroqueviller dans son lit, dans le noir, avec un pyjama rayé et *La Nausée* à portée de main. Il a été intéressant de vérifier la solidité de mon auto-évaluation réelle. Je crois avoir survécu.

Le laboratoire était un véritable port d'attache. Au début, quand il semblait que le temps était suffisant pour tout faire, nous allions chercher les nouvelles recrues à la gare. Je me souviens des trois premières : Annabella, éblouie et frigorifiée, qui venait de Rome pour commencer son ascension vers la gloire. Stefano, avec ses cheveux (à l'époque encore présents), coupés à la façon des corps d'assaut. Roberto, séduit par la matière condensée après un bref amour pour la physique nucléaire. Tous les trois, par la suite extrêmement présents dans ma vie, cherchaient à concilier une existence normale avec les désagréments de leur installation loin de chez eux.

Une rencontre marquante a été celle avec Nunzio, envoyé à l'université avec de grands sacrifices. Diplômé brillant, il avait traversé l'océan avec une bourse d'études pour effectuer un doctorat à la Lehigh University, en Pennsylvanie. Devenu ensuite chercheur

manuale. Chi parte e ha successo viene visto spesso come uno che non ha il diritto di intromettersi nelle sequenze gerarchiche composte da bravi, molti, e locali compiacenti, moltissimi. Aveva una classifica personale, tutti noi l'abbiamo, della qualità dei fisici. Luciano forte e affidabile, Massimo geniale e creativo, altri bravi ma, su tutti, Alfonso per l'insieme di conoscenza e di umanità. Ricordo che mi aveva colpito l'associazione inusuale in un ambiente di sgomitatori. Aveva un rapporto privilegiato con Alfonso, al punto di chiamare Alfie il suo amatissimo cane San Bernardo. Ora è in pensione a Syracuse, nello stato di New York. È serenamente soddisfatto ma ha negli occhi l'Etna visto da Taormina.

La sequenza continuava ininterrotta. Losanna sembrava la sala transiti di un aeroporto molto affollato. Ricordo Erio che, con un enorme zaino, partiva per le ex Colonie Britanniche, IBM e Bell Labs come obiettivi primari. Giovanni, con il quale abbiamo provato vicinanza e dolore per la tragica scomparsa del padre, quando l'Italia era sconvolta dalla follia delle Brigate Rosse. Raffaele, dinamico e sempre in cerca di avventure, sia con il Laser, sul lago, sia con i ferroelettrici o le fasi di Berry. Frova, con la passione per i pianoforti e per J.S. Bach, aveva un carattere apparentemente spigoloso con una ben riposta dose di intelligente umanità. *Lo Zen e l'arte della manutenzione della motocicletta*, da lui consigliato, è stato un esempio di contatto forte e resta legato a un'esperienza di lettura, e quindi di vita, indimenticabile.

Nel bene e nel male, Losanna rappresenta una parte della vita dove le sensazioni sono state sempre amplificate dal fatto che, volenti o no, eravamo all'estero e legati da un comune corso del tempo. La gloriosa colonia italiana raggruppava interessi, contrasti, amicizie, rancori e amori. Come in una famiglia. In più era come se fossimo su un'isola. Ci ritrovavamo sulle rive del lago come se fosse un luogo di raccolta naturale. L'incanto, per qualcuno l'incubo, si rompe quando, nei primi anni '80 si cerca di istituire a Trieste un centro che miri all'eccellenza: la SISSA (Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati). L'attrattiva è forte e deve essere bilanciata da una chiara valutazione del futuro, in termini di carriera. Dovevo scegliere tra un posto potenzialmente prestigioso o lavorare nella *Cagliari State University*. Insegnare

chez Xerox, puis chez IBM, il avait rencontré Alfonso aux États-Unis et, en 1976, fait un tour d'Europe pour voir s'il était possible de tenter le concours pour un poste. Les réponses étaient affectueusement négatives. Comme on pouvait s'y attendre. Celui qui part et réussit est souvent vu comme un intrus dans les hiérarchies composées de personnes compétentes, nombreuses, et de locaux complaisants, très nombreux. Il avait un classement personnel – nous en avons tous un – de la qualité des physiciens. Luciano, fort et fiable ; Massimo, génial et créatif ; d'autres étaient bons, mais par-dessus tout, Alfonso pour son ensemble de connaissances et son humanité. Je me souviens que l'association inhabituelle dans un milieu de arrivistes m'avait frappé. Nunzio entretenait une relation privilégiée avec Alfonso, au point d'appeler son cher chien Saint-Bernard « Alfie ». Il est maintenant à la retraite à Syracuse, dans l'État de New York. Il est sereinement satisfait mais a dans les yeux l'Etna vu de Taormine.

La séquence continuait sans interruption. Lausanne semblait être la salle de transit d'un aéroport très fréquenté. Je me souviens d'Erio, qui partait avec un énorme sac à dos pour les anciennes colonies britanniques, IBM et Bell Labs comme objectifs principaux. Giovanni, avec qui nous avons partagé proximité et douleur lors de la tragique disparition de son père, alors que l'Italie était bouleversée par la folie des Brigades rouges. Raffaele, dynamique et toujours à la recherche d'aventures, que ce soit avec le Laser sur le lac ou avec les ferroélectriques ou les phases de Berry. Frova, passionné de pianos et de J. S. Bach, avait un caractère apparemment difficile, mais une humanité intelligemment dosée. *Le Traité du zen et de l'entretien des motocyclettes*, qu'il m'avait conseillé, reste un exemple de contact fort et est lié à une expérience de lecture, et donc de vie, inoubliable.

Dans le bon comme dans le mauvais, Lausanne représente une partie de ma vie où les sensations étaient toujours amplifiées par le fait que, qu'on le veuille ou non, nous étions à l'étranger et liés par un cours de temps commun. La glorieuse colonie italienne regroupait intérêts, contrastes, amitiés, rancœurs et amours. Comme dans une famille. De plus, c'était comme si nous étions sur une île. Nous nous retrouvions sur les rives du lac, comme si c'était un lieu de rassemblement naturel. L'enchantement, pour certains un



all'estero non mi ha mai affascinato, mancanza totale di interesse. Insegnare a Trieste, e viverci, non mi sembrava molto meglio. Il dubbio è stato risolto da Alfonso, che mi ha ricordato che le mie radici erano saldamente avviluppate alla Sardegna. È stato facile lasciarmi convincere. E credo di aver fatto bene.

Dopo il periodo a Losanna, la collaborazione si è mantenuta e, in particolare, ha prodotto una serie di conferenze che, con ritmo annuale, hanno portato i migliori fisici della materia in Sardegna. I Flamingo Workshops hanno permesso incontri e contatti per i nostri studenti un po' relegati ai confini dell'impero. Contatti molto fruttuosi che, come effetti collaterali, hanno facilitato diversi matrimoni. In quelle occasioni Alfonso era particolarmente sereno in un ambiente dove si sentiva circondato da un affetto sincero.

Qualche anno dopo, all'inizio del nuovo secolo... Arrivare al valico del Gran San Bernardo è bello. Sembra di avvicinarsi al cielo, salendo per tornanti verso un alto che si immagina. Passare sotto una montagna mi dà sensazioni strane. Sapere che quantità enormi di roccia si trovano sopra, e di lato, e sotto di te, è inimmaginabile. Ho sempre la tentazione di seguire la via naturale, quella del colle. Curve e dislivelli che riportano all'antica fatica e avventura del viaggio. Voglio credere a un racconto di Raffaele su Casanova, illustre studioso di arti e di scienze, oltre che di rapporti con l'altro sesso, che fece smontare e caricare su una slitta la carrozza facendola scivolare a valle per proseguire il viaggio, probabilmente una fuga, verso la libera Francia. Poi è Svizzera. L'aria è più pulita, i prati più verdi, i servizi più igienici, le banconote meno accartocciate. Un paradiso, insomma, secondo copione. Ma quando, molto più in basso, il lago appare, una esclamazione è spontanea.

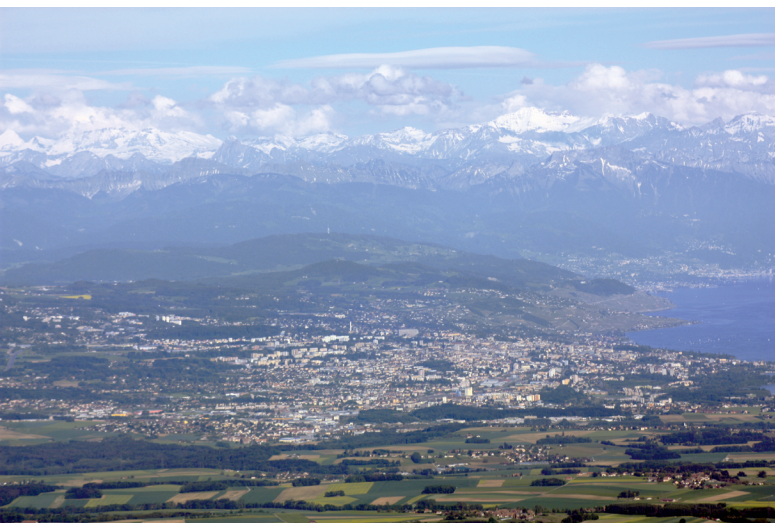
Se mi chiedessero cosa ho visto a Losanna, direi squarci di passato e analisi del presente tra ampie volute di fumo: Alfonso fuma. Ma si va anche al lago, al mercato e a ripercorrere le strade del centro. Le ricordo nei giorni peggiori: le domeniche da solo. Tutti erano via: sui monti d'inverno, sui monti d'estate, comunque, sempre via. La città si riempiva di emigranti con la camicia nuova. I locali chiusi e il rifugio dato da ristoranti sul lago, carissimi, pieni di stranieri,

cauchemar, se brise lorsque, au début des années 80, on tente d'établir à Trieste un centre qui vise l'excellence: la SISSA, Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati. L'attrait est fort et doit être équilibré par une évaluation claire de l'avenir en termes de carrière. Je devais choisir entre un poste potentiellement prestigieux ou travailler à *Cagliari State University*. Enseigner à l'étranger ne m'a jamais fasciné, je n'avais aucun intérêt pour cela. Enseigner à Trieste et y vivre ne me semblait pas beaucoup mieux. Le doute a été résolu par Alfonso, qui m'a rappelé que mes racines étaient solidement ancrées en Sardaigne. Il a été facile de me laisser convaincre. Et je pense avoir bien fait.

Après mon séjour à Lausanne, la collaboration s'est poursuivie et, en particulier, a produit une série de conférences qui, sur un rythme annuel, ont amené les meilleurs physiciens de la matière en Sardaigne. Les Flamingo Workshops ont permis des rencontres et des contacts pour nos étudiants, quelque peu relégués aux confins de l'empire. Des contacts très fructueux qui, en guise d'effets collatéraux, ont facilité plusieurs mariages. Lors de ces occasions, Alfonso était particulièrement serein, dans un environnement où il se sentait entouré d'affection sincère.

Quelques années plus tard, au début du nouveau siècle... Arriver au col du Grand-Saint-Bernard est un véritable plaisir. On a l'impression de s'approcher du ciel, en montant par des virages en épingles vers une altitude que l'on imagine. Passer sous une montagne me procure des sensations étranges. Savoir qu'une énorme quantité de roches se trouve au-dessus, à côté et en dessous de soi est inimaginable. J'ai toujours la tentation de suivre le chemin naturel, celui du col. Les courbes et les dénivelés rappellent l'ancienne fatigue et l'aventure du voyage. Je veux croire au récit de Raffaele sur Casanova, illustre érudit des arts et des sciences, ainsi que des relations avec l'autre sexe, qui aurait fait démonter et charger sa voiture sur un traîneau pour la faire glisser en bas afin de poursuivre son voyage, probablement une fuite, vers la France libre. Puis c'est la Suisse. L'air est plus pur, les prairies plus vertes, les services plus hygiéniques, les billets moins froissés. Un paradis, en somme, selon le scénario. Mais lorsque, beaucoup plus bas, le lac apparaît, on ne peut retenir une exclamation.

Si l'on me demandait ce que j'ai vu à Lausanne, je dirais des éclats du passé et des analyses du présent



Vue aérienne de la ville de Lausanne.

cioè più stranieri di noi, lavoratori a termine. Il posto più ospitale era il Laboratorio con qualche cosa da fare, quella per fortuna non mancava mai. La città è costruita su fiumi prosciugati che mantengono i tagli effettuati sulla collina. È un susseguirsi di salite, e di discese, con ponti e passaggi segreti. Orientarsi non è facile. Ora hanno rivoluzionato il centro rendendo pedonali zone prima di traffico. I piccoli e caratteristici negozi sono spariti. Pizza Hut in Piazza St. François! Di antico restano i prezzi, altissimi. La toponomastica dei ricordi è sconvolta. Sembra una normale città di Ovunque, solo più pulita. Anni intensi, con futuri da definire.

Alfonso è stanco. troppo lavoro, troppi impegni tra due università lontanissime, non solo geograficamente. Il rigore calvinista impone che il prodotto – lezioni, esami, conferenze, cure dei problemi di gestione – sia sempre perfetto. Si continua un discorso mai interrotto. Sembra impossibile che due persone così diverse trovino con grande naturalezza il modo di comunicare con una profondità impensabile. Nei lunghi anni passati insieme c'è stata quasi una leggera compensazione: Alfonso è diventato più estroverso e io più pensoso. Facile da dire, difficile da capire veramente. Ma il senso è questo. La cosa più chiara è la grande fiducia reciproca. La certezza di essere ascoltati e di andare oltre le parole. Consolante.

Losanna ha significato moltissimo ed è stata quello che più si avvicina al mio concetto di casa. Abitabile.

au milieu de larges volutes de fumée : Alfonso est un fumeur. Mais on va aussi au lac, au marché et à parcourir les rues du centre. Je m'en souviens lors des pires jours : les dimanches passés seul. Tout le monde était parti : à la montagne en hiver, à la montagne en été, de toute façon, toujours parti. La ville se remplissait d'émigrants en chemise neuve. Les établissements étaient fermés et le refuge venait de restaurants au bord du lac, très chers, remplis d'étrangers – c'est-à-dire plus étrangers que nous – et de travailleurs temporaires. L'endroit le plus accueillant était le Laboratoire, où il y avait toujours quelque chose à faire, ce qui, heureusement, ne manquait jamais. La ville est construite sur des rivières asséchées qui maintiennent les découpes réalisées sur la colline. C'est un enchaînement de montées et de descentes, avec des ponts et des passages secrets. S'orienter n'est pas facile. Aujourd'hui, on a révolutionné le centre en rendant piétonnes des zones auparavant réservées à la circulation. Les petits magasins charmants ont disparu. Pizza Hut sur la Place St. François ! Il reste de l'ancien les prix, très élevés. La toponymie des souvenirs est bouleversée. Cela ressemble à une ville normale de Partout, juste plus propre. Des années intenses, avec des futurs à définir.

Alfonso est fatigué. Trop de travail, trop d'engagements entre deux universités très éloignées, et pas seulement géographiquement. Le rigorisme calviniste impose que le produit, qu'il s'agisse de cours, d'examens, de conférences ou de la gestion des problèmes, soit toujours parfait. La conversation ne s'interrompt jamais. Il semble impossible que deux personnes si différentes parviennent à trouver avec une telle facilité un moyen de communiquer avec une profondeur insoupçonnée. Au fil des longues années passées ensemble, il y a presque eu une légère compensation : Alfonso est devenu plus extraverti et moi plus pensif. Facile à dire, difficile à comprendre vraiment. Mais le sens est celui-ci. La chose la plus claire est la grande confiance mutuelle. La certitude d'être écouté et d'aller au-delà des mots. Réconfortant.

Lausanne a beaucoup compté pour moi et a été ce qui se rapproche le plus de mon concept de maison. Habitable. En forte concurrence avec ma Cagliari enracinée. Non pas pour la beauté stéréotypée des jardins, la vue sur le lac ou les couleurs changeantes

In forte concorrenza con la mia radicata Cagliari. Non per la piacevolezza stereotipata dei giardini, della vista del lago, dei colori variabili del cielo, ma per la certezza che, più nel bene che nel male, ha assistito alla realizzazione di tanti miei sogni e alla maturazione, quasi sempre in modo doloroso, di tante realtà. E siccome non si ottiene nulla senza fatica, mai, è entrata a far parte del bagaglio di esperienze che mi rendono quello che sono. C'è sempre voglia di tornarvi per guardare un altro po' dentro di me anche se ora, senza Alfonso, vedrei un film muto in bianco e nero.

du ciel, mais pour la certitude qu'elle a, plus pour le meilleur que pour le pire, assisté à la réalisation de nombreux de mes rêves et à la maturation, presque toujours de manière douloureuse, de nombreuses réalités. Et puisque rien ne s'obtient sans effort – jamais ! –, Lausanne est devenue une partie de ce bagage d'expériences qui fait de moi ce que je suis. J'ai toujours envie d'y retourner pour regarder un peu plus en moi, même si désormais, sans Alfonso, je verrais un film muet en noir et blanc.

## Coffee and cigarettes

### Café et cigarettes

---

**Annabella Selloni**

---

I first met Alfonso at the beginning of my graduate studies at the Laboratoire de physique théorique of the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) under the supervision of Antonio Quattronani in 1976. Alfonso was working at the Laboratoire de physique appliquée, which he joined after leaving the prestigious Bell Laboratories, and was already well known in the scientific community for his work in solid-state electronic structure theory. At that time, I could not even imagine that he actually was only five years older than me!

I met again Alfonso a few months later through Franco Meloni, a visiting researcher in Alfonso's group with whom I had become friends. Franco was very fascinated by Alfonso and was often talking about how incredibly smart and "cool" Alfonso was and how well he could explain physics. Slowly, and encouraged also by Erio Tosatti, my undergraduate advisor in Rome and a good friend of Alfonso's, I started thinking how nice it would be if I could work on a side project with Alfonso, in addition to my PhD thesis work with Antonio.

J'ai rencontré Alfonso pour la première fois au début de mes études doctorales au Laboratoire de physique théorique de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) sous la direction d'Antonio Quattronani en 1976. Alfonso travaillait au Laboratoire de physique appliquée, qu'il avait rejoint après avoir quitté les prestigieux Bell Laboratories, et il était déjà reconnu dans le milieu scientifique pour ses travaux sur la théorie de la structure électronique des solides. À cette époque, je ne pouvais même pas imaginer qu'il n'avait en réalité que cinq ans de plus que moi !

J'ai revu Alfonso quelques mois plus tard grâce à Franco Meloni, un chercheur invité dans le groupe d'Alfonso avec qui je m'étais lié d'amitié. Franco était très fasciné par Alfonso et parlait souvent de son incroyable intelligence et de sa capacité à expliquer la physique de manière très accessible. Progressivement, et encouragé également par Erio Tosatti, mon directeur de recherche de *laurea* à Rome et un bon ami d'Alfonso, j'ai commencé à me dire qu'il serait bien de travailler sur un projet secondaire avec Alfonso, en plus de mon travail de thèse avec Antonio.

When I mentioned this possibility to Alfonso, he looked perplexed. I had not informed Antonio about my intentions, which was thoughtless and inappropriate, but I kept insisting. After a while, Alfonso suggested that I work on modeling local field effects in the dielectric screening of silicon using harmonic oscillators at appropriate locations in the material. My first attempts to work on this project were totally awkward. In particular, I cannot forget Alfonso's bewildered (but also somewhat amused) expression when I once told him about some "strange results" I had found! Nonetheless, with his guide, the project finally took off and started progressing slowly but steadily.

The project progressed much faster after the arrival of Roberto as a postdoc in Alfonso's group in early 1977. After about a year, Roberto and I realized that we had some nice results that we could submit for publication. We submitted our work to Physical Review Letters and were lucky enough to get accepted. My big regret is, however, that we published alone, Roberto and I, without the name of Alfonso, who had actually proposed and planned much of the project. The name of Alfonso appears only at the end of the paper, where he is acknowledged together with Massimo Altarelli, Klaus Maschke, and Erio Tosatti. Every time this story comes to my mind, I still wonder how we could be so arrogant and stupid.

This short contribution in Alfonso's honor would still miss an essential part if it did not include the memory of the dozens of evenings spent together at cafés, restaurants, and Alfonso's home. We usually were small groups, often including colleagues visiting from Italy, and we would eat, drink coffee or wine and smoke cigarettes (especially Alfonso) but mostly talk. These conversations could last for hours, with topics ranging from "serious", such as physics and politics, to light, e.g., movies and books, and even to frivolous, like gossip. On those occasions, Alfonso would finally lose his notorious coolness, relax, and often have a good laugh.

Lorsque j'ai mentionné cette possibilité à Alfonso, il a eu l'air perplexe. Je n'avais pas informé Antonio de mes intentions, ce qui était imprudent et inapproprié, mais j'ai continué d'insister. Au bout d'un moment, Alfonso a suggéré que je travaille sur la modélisation des effets de champ local dans l'écrantage diélectrique du silicium en utilisant des oscillateurs harmoniques à des emplacements appropriés dans le matériau. Mes premières tentatives de travail sur ce projet étaient totalement maladroites. En particulier, je ne peux pas oublier l'expression perplexe (mais aussi quelque peu amusée) d'Alfonso lorsque je lui ai parlé une fois de certains « résultats étranges » que j'avais trouvés ! Néanmoins, avec son aide, le projet a enfin décollé et a commencé à progresser lentement mais sûrement.

Le projet a progressé beaucoup plus rapidement après l'arrivée de Roberto en tant que postdoctorant dans le groupe d'Alfonso au début de 1977. Après environ un an, Roberto et moi avons réalisé que nous avions de bons résultats que nous pouvions soumettre pour publication. Nous avons soumis notre travail à Physical Review Letters et avons eu la chance qu'il soit accepté. Mon grand regret est cependant que nous avons publié seuls, Roberto et moi, sans inclure le nom d'Alfonso, qui avait en réalité proposé et planifié une grande partie du projet. Le nom d'Alfonso n'apparaît qu'à la fin de l'article, où il est remercié avec Massimo Altarelli, Klaus Maschke et Erio Tosatti. Chaque fois que cette histoire me vient à l'esprit, je me demande encore comment nous avons pu être si arrogants et stupides.

Cette courte contribution en l'honneur d'Alfonso manquerait encore d'un élément essentiel si elle n'incluait pas le souvenir des nombreuses soirées passées ensemble dans des cafés, des restaurants et chez Alfonso. Nous étions généralement de petits groupes, incluant souvent des collègues venus d'Italie. Nous mangions, buvions du café ou du vin et fumions des cigarettes (surtout Alfonso), mais surtout, nous parlions. Ces conversations pouvaient durer des heures, abordant des sujets allant du « sérieux », comme la physique et la politique, au léger, comme les films et les livres, et même au futile, comme les ragots. Lors de ces occasions, Alfonso perdait enfin sa célèbre retenue, se détendait et riait souvent de bon cœur.

# Remembering Alfonso

## En mémoire d'Alfonso

---

Roberto Car

---

I first met Alfonso at the Laboratoire de physique appliquée of the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) in February 1977. I was a recipient of a fellowship from the Fondazione Angelo Della Riccia, and went to Lausanne following the advice of Lucio Braicovich, one of my professors at the Politecnico di Milano, to do research in theoretical solid-state physics under the mentorship of Alfonso—a rising star in the discipline—who had just come back to Europe from Bell Laboratories in the US. At the time, I could not have imagined how momentous this encounter would be for my subsequent trajectory in life and in science.

In 1977, the modern campus of the EPFL did not exist, the institution had just gained federal status, and the physics laboratories were scattered at different locations in town. The Laboratoire de physique appliquée was renting floors in a building that had a gas station near its entrance, in a busy street next to the train station. One of the floors was mostly occupied by theorists led by Alfonso and Klaus Maschke. The space was cramped but the activity was intense, and the atmosphere was friendly and joyful. Alfonso, who was only one year older than me, was a master of his discipline, always busy with collaborators and visitors, while very friendly and helpful when you could get hold of him. He suggested a problem to me: extending the  $k \cdot p$  method in the presence of a non-local pseudopotential. I remember that I worked out the algebra and wrote a working code, but one result did not seem right. Upon careful inspection, instead of showing a minimum, one band exhibited cusp-like behavior in the limit of  $k$  going to zero. Alfonso was clearly disappointed, but after going through the derivation I could show analytically that the pseudopotential had a nonphysical linear dependence on  $k$

J'ai rencontré Alfonso pour la première fois au Laboratoire de physique appliquée de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) en février 1977. J'étais bénéficiaire d'une bourse de la Fondation Della Riccia et je suis allé à Lausanne sur les conseils de Lucio Braicovich, l'un de mes professeurs au Politecnico di Milano, pour effectuer des recherches en physique théorique des solides sous la direction d'Alfonso, une étoile montante dans la discipline, qui venait juste de revenir en Europe après avoir travaillé aux Laboratoires Bell aux États-Unis. À l'époque, je ne pouvais pas imaginer à quel point cette rencontre serait décisive pour ma trajectoire future dans la vie et la science.

En 1977, le campus moderne de l'EPFL n'existait pas, l'institution venait d'obtenir le statut fédéral et les laboratoires de physique étaient dispersés à différents endroits de la ville. Le Laboratoire de physique appliquée louait des étages dans un bâtiment qui avait une station-service près de son entrée et se trouvait dans une rue animée à côté de la gare. Une des étages était principalement occupé par des théoriciens dirigés par Alfonso et Klaus Maschke. L'espace était exigu, mais l'activité était intense et l'atmosphère amicale et joyeuse. Alfonso, qui n'avait qu'un an de plus que moi, était un maître dans sa discipline, toujours occupé avec des collaborateurs et des visiteurs tout en étant très amical et serviable quand on pouvait le joindre. Il m'a proposé un problème : étendre la méthode  $k \cdot p$  en présence d'un pseudopotentiel non local. Je me souviens avoir fait les calculs algébriques et écrit un code qui fonctionnait, mais un résultat ne semblait pas correct ; après un examen attentif, au lieu d'un minimum, une bande présentait un comportement en cuspide dans la limite où  $k$  tend vers zéro. Alfonso était clairement déçu, mais



that we both had not anticipated. After that explanation, Alfonso's trust in me increased. I learned a basic lesson: when critical examination shows that a theoretical model does not conform to expectations, one should understand why.

The scientific interaction with Alfonso introduced me to several young Italian physicists who were in Lausanne in those years, mostly because of him. I recall Wanda Andreoni, Franco Meloni, Annabella Selloni—who later became my wife—, Stefano Baroni, and Raffaele Resta. Everlasting friendships started with all of them. Under Alfonso's leadership, the scientific immersion was total, but our interaction was not limited to science. It extended to heated discussions on literature, movies, and Italian politics over dinners, often followed by alcoholic drinks at Alfonso's home. At the same time, science discussions with him at the Laboratoire often initiated when it was past lunchtime and continued over a *croûte au fromage complète*, a high-calorie dish at a *bistrot* near the train station. By year end, my Della Riccia fellowship terminated, but I was offered an assistant position at EPFL's Laboratoire de physique expérimentale, I believe with Alfonso's support. I accepted eagerly to continue collaborating with Alfonso and start a new theoretical project on the electronic structure of atomic clusters, a focus of interest at the Laboratoire de physique expérimentale.

At the time, I was involved in a collaboration with Alfonso and Erio Tosatti on the static electronic screening of an external perturbation in dielectric crystals including the so-called local field effects. This was a very interesting subject with a long history, think about the classical Lorentz field formula. The study gave insight into how the local chemistry (covalent and ionic bonds) affects the displacement of the valence electrons in the presence of a perturbation, within linear response theory. Erio was in Trieste at the International Centre for Theoretical Physics (ICTP) and, thanks to this collaboration, I attended the 1978 summer school in condensed matter physics at the ICTP, where Alfonso and many other famous physicists gave lectures. I still remember the trip from Geneva to Trieste in Alfonso's car, a rolling Citroën DS, with Alfonso driving and Mario Tosi in the front seat. Mario was in Geneva to give a lecture at a

après avoir revu la dérivation, j'ai pu démontrer analytiquement que le pseudopotentiel avait une dépendance linéaire non physique par rapport à  $k$ , que nous n'avions pas anticipée. Après cette explication, la confiance d'Alfonso en moi a augmenté. J'ai appris une leçon fondamentale : lorsque l'examen critique montre qu'un modèle théorique ne correspond pas aux attentes, il faut comprendre pourquoi.

L'interaction scientifique avec Alfonso m'a fait rencontrer plusieurs jeunes physiciens italiens qui se trouvaient à Lausanne à cette époque, en grande partie grâce à lui. Je me souviens de Wanda Andreoni, Franco Meloni, Annabella Selloni – qui est devenue ma femme par la suite –, Stefano Baroni et Raffaele Resta. Des amitiés durables ont commencé avec chacun d'eux. Sous la direction d'Alfonso, l'immersion scientifique était totale, mais notre interaction ne se limitait pas à la science. Elle s'étendait à des discussions passionnées sur la littérature, les films et la politique italienne lors de dîners, souvent suivis de boissons alcoolisées chez Alfonso. Parallèlement, les discussions scientifiques avec lui au laboratoire commençaient souvent après l'heure du déjeuner et se poursuivaient autour d'une « *croûte au fromage complète* », un plat super-calorique, dans un bistrot près de la gare. À la fin de l'année, ma bourse Della Riccia se terminait, mais on m'a proposé un poste d'assistant, je crois avec le soutien d'Alfonso, au Laboratoire de physique expérimentale de l'EPFL. J'ai accepté avec enthousiasme de continuer à collaborer avec Alfonso et de commencer un nouveau projet théorique sur la structure électronique des clusters atomiques, un domaine d'intérêt du Laboratoire de physique expérimentale.

À l'époque, je collaborais avec Alfonso et Erio Tosatti sur l'écrantage électronique statique d'une perturbation externe dans des cristaux diélectriques, incluant les effets dits de champ local. C'était un sujet très intéressant avec une longue histoire, évoquant par exemple la formule du champ de Lorentz classique. Cette étude a permis de mieux comprendre comment la chimie locale (les liaisons covalentes et ioniques) influence le déplacement des électrons de valence en présence d'une perturbation, dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire. Erio était à Trieste au Centre international de physique théorique (ICTP) et,



Vue aérienne du campus de l'EPFL en 2002.

symposium organized by Charlie Enz. We left Geneva in the evening and Alfonso drove the whole night, with some stops along the way to get properly caffeinated. We arrived safely in Trieste early in the morning. In Trieste, I was introduced to the local condensed matter theory group, which included, among others, Mario Tosi, Erio Tosatti, and Michele Parrinello. I have very fond memories of those years. Always connecting theory with experiment was another important lesson. Alfonso was not only a great mentor, but he was also very generous as he encouraged junior collaborators like Wanda, Annabella, and myself to write papers on our own, even when the suggestion to start the projects came from him.

My first Lausanne years ended in 1981 when I went to the IBM Thomas J. Watson Research Center in the US with Alfonso's help. The IBM Watson Research Center was in those years a major scientific center rivaled only by Bell Laboratories across the Hudson River. At the end of my position with IBM in 1983, I was offered a position in Trieste, where Erio was assembling a group of young physicists to start the condensed matter sector of the Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) a new Italian graduate school. At the SISSA I made my most important scientific contribution with Michele Parrinello, a work that initiated the approach that is today called *ab initio* or first-principles molecular dynamics.

grâce à cette collaboration, j'ai pu assister à l'école d'été de 1978 sur la physique de la matière condensée à l'ICTP, où Alfonso et de nombreux autres physiciens célèbres ont donné des cours. Je me souviens encore du voyage de Genève à Trieste dans la voiture d'Alfonso, une Citroën DS, avec Alfonso au volant et Mario Tosi à l'avant. Mario était à Genève pour donner un séminaire lors d'un symposium organisé par Charlie Enz. Nous avons quitté Genève le soir, et Alfonso a conduit toute la nuit, avec quelques arrêts en cours de route pour se ravitailler en caféine. Nous sommes arrivés sains et saufs à Trieste tôt le matin. À Trieste, j'ai été présenté au groupe de théorie de la matière condensée local, qui comprenait, entre autres, Mario Tosi, Erio Tosatti et Michele Parrinello. J'ai de très bons souvenirs de ces années. Toujours établir un lien entre théorie et expérience était une autre leçon importante. Alfonso n'était pas seulement un grand mentor, mais il était également très généreux en encourageant les collaborateurs juniors comme Wanda, Annabella et moi à rédiger des articles par nous-mêmes, même lorsque la suggestion de commencer les projets venait de lui.

Mes premières années à Lausanne se sont terminées en 1981, lorsque je suis parti au centre de recherche IBM Thomas J. Watson aux États-Unis, grâce à l'aide d'Alfonso. À cette époque, le centre IBM Watson était un important pôle scientifique, qui n'avait pour rival que les Bell Labs de l'autre côté de la rivière Hudson. À la fin de mon poste chez IBM en 1983, on m'a offert un poste à Trieste, où Erio rassemblait un groupe de jeunes physiciens pour commencer le secteur de la matière condensée de la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), une nouvelle école doctorale italienne. À la SISSA, j'ai réalisé ma contribution scientifique la plus importante avec Michele Parrinello, un travail qui a initié l'approche appelée aujourd'hui dynamique moléculaire *ab initio* ou par premiers principes. Notre article dans Physical Review Letters a immédiatement reçu des reconnaissances importantes. Pour ce développement, Michele et moi avons reçu le prix Hewlett Packard Europhysics en 1990. Cela a conduit à des offres d'emploi prestigieuses. Michele a pris la tête d'un nouveau groupe de théorie au centre de recherche IBM de Zurich. L'année suivante, je suis devenu professeur de physique de la matière condensée

Our paper in *Physical Review Letters* immediately received important recognitions. For this development, Michele and I received the 1990 Hewlett Packard Europhysics Prize. This resulted in prestigious job offers. Michele moved to head a new theory group at the IBM Zurich Research Center. In the following year, I became Chair of Condensed Matter Physics at the University of Geneva and director of the Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA) hosted by the EPFL in its new campus in the outskirts of Lausanne, with a magnificent view of the lake and the Alps.

This is where my trajectory crossed with Alfonso's once again. IRRMA was created to foster computational physics research on materials as a joint effort of EPFL and the western Swiss universities (Geneva, Lausanne, Fribourg, and Neuchâtel). Alfonso was the driving force in the launch of this initiative, with help from Martin Peter of the University of Geneva, Antonio Quattropani of EPFL, Wolf Schneider of the University of Lausanne, Dionys Baeriswyl of the University of Fribourg, and Hans Beck of the University of Neuchâtel. Alfonso was the initial director of the institute until a new professor appointed in Geneva would take the job. I spent nine years as director of IRRMA, greatly enjoying the interaction with many outstanding young researchers and PhD students, including Alfredo Pasquarello, Giulia Galli, François Gygi, Alessandro De Vita, and Francesco Mauri. I did not collaborate scientifically with Alfonso in those days, as he rightly preferred to keep his activity separated from mine in the context of IRRMA. But he helped with suggestions for good people to hire, and with the difficult policy of directing a small institute that had to satisfy five funding universities. At the time, Alfonso was also professor in Trieste and commuted between Trieste and Lausanne. He was a very dedicated teacher at both places. The course on the electronic structure of solids that he taught at EPFL with Antonio Quattropani was very appreciated by the students. I remember that he handed me a copy of his meticulously handwritten lecture notes to help me prepare a course I gave at the University of Geneva.

I moved to Princeton in 1999. Since then, my interaction with Alfonso slowly faded away. I saw him occasionally during visits to Trieste and at scientific

à l'Université de Genève et directeur de l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), hébergé par l'EPFL sur son nouveau campus en périphérie de Lausanne, offrant une vue magnifique sur le lac et les Alpes.

C'est à ce moment-là que ma trajectoire a de nouveau croisé celle d'Alfonso. L'IRRMA a été créé pour favoriser la recherche en physique computationnelle sur les matériaux, dans le cadre d'un effort commun entre l'EPFL et les universités suisses romandes (Genève, Lausanne, Fribourg et Neuchâtel). Alfonso a été la force motrice derrière le lancement de cette initiative, avec l'aide de Martin Peter de l'Université de Genève, Antonio Quattropani de l'EPFL, Wolf Schneider de l'Université de Lausanne, Dionys Baeriswyl de l'Université de Fribourg et Hans Beck de l'Université de Neuchâtel. Alfonso a été le directeur initial de l'institut jusqu'à ce qu'un nouveau professeur soit nommé à Genève pour prendre le relais. J'ai passé neuf ans en tant que directeur de l'IRRMA, appréciant énormément l'interaction avec de nombreux jeunes chercheurs et doctorants exceptionnels, tels que Alfredo Pasquarello, Giulia Galli, François Gygi, Alessandro De Vita et Francesco Mauri. Je n'ai pas collaboré scientifiquement avec Alfonso à cette époque, car il préférait justement garder son activité séparée de la mienne dans le cadre de l'IRRMA. Mais il m'a aidé en suggérant de bonnes personnes à recruter et à naviguer dans la difficile politique de direction d'un petit institut devant satisfaire les exigences de cinq universités qui finançaient ses activités. À cette époque, Alfonso était également professeur à Trieste et faisait souvent la navette entre Trieste et Lausanne. Il était un enseignant très dévoué dans les deux établissements. Le cours sur la structure électronique des solides qu'il enseignait à l'EPFL avec Antonio Quattropani était très apprécié des étudiants. Je me souviens qu'il m'a remis une copie de ses notes de cours méticuleusement écrites à la main pour m'aider à préparer un cours que je donnais à l'Université de Genève.

En 1999 je me suis installé à Princeton. Depuis lors, mon interaction avec Alfonso s'est progressivement affaiblie. Je l'ai vu occasionnellement lors de visites à Trieste et de réunions scientifiques. Il était toujours très dévoué à l'enseignement et conseillait

meetings. He was still very dedicated to teaching and wisely advising his many former students and collaborators, but I got the impression that he was increasingly isolating himself, perhaps for health reasons. Alfonso was an outstanding scientist, who greatly contributed to the development of the modern community of computationally oriented electronic structure theorists. He was also a great human being, generous, deep and witty social companion, but he was also very reserved, cautious and humble in his interactions with other people. It was devastating news when I heard that he suddenly passed away about six months ago.

judicieusement ses nombreux anciens élèves et collaborateurs, mais j'avais l'impression qu'il s'isolait de plus en plus, peut-être pour des raisons de santé. Alfonso était un scientifique exceptionnel, qui a largement contribué au développement de la communauté moderne des théoriciens de la structure électronique avec une orientation computationnelle. C'était également un grand homme, généreux, profond et plein d'esprit, mais il était aussi très réservé, prudent et humble dans ses interactions avec les autres. J'ai été profondément bouleversé d'apprendre qu'il était décédé soudainement il y a environ six mois.

## Grande, caro Alfonso: che nostalgia! Grand Alfonso, cher Alfonso: quelle nostalgie!

---

**Wanda Andreoni**

---

Per me Alfonso Baldereschi è sempre stato un mito e sempre lo resterà.

Avevo da poco cominciato a lavorare alla mia tesi di laurea a Roma (era il 1972) quando il Professor Bassani mi parlò di quello che sarebbe poi rimasto nella storia come il punto di Baldereschi, un'idea bellissima, e mi disse di leggere l'articolo di Alfonso Baldereschi, suo ex allievo allora negli Stati Uniti, in *Physical Review*, perché avrebbe potuto aiutarmi. Bassani stesso non lo aveva, ma avrebbe desiderato averne una copia. Passai giorni e giorni a cercarlo, riempiendo dei volumi di *Physical Review* e di altre riviste (non si sa mai... mi dicevo) il tavolo della biblioteca dell'istituto, riservato per i laureandi. Alla fine, pur con tutto il rispetto che gli dovevo, informai Bassani che tale articolo non esisteva. Non so se

Pour moi, Alfonso Baldereschi a toujours été un mythe et le restera toujours.

Je venais de commencer à travailler sur ma thèse à Rome (c'était en 1972) lorsque le Professeur Bassani m'a parlé de ce qui resterait dans l'histoire comme le point de Baldereschi, une très belle idée, et m'a dit de lire l'article d'Alfonso Baldereschi, son ancien étudiant alors aux États-Unis, dans *Physical Review*, parce qu'il pourrait m'aider. Bassani lui-même ne l'avait pas, mais aurait aimé en avoir une copie. J'ai passé des jours et des jours à le chercher, remplissant la table de la bibliothèque de l'Institut de physique, réservée aux étudiants en thèse, de volumes de *Physical Review* et d'autres revues (on ne sait jamais, me disais-je). Finalement, avec tout le respect que je lui devais, j'ai informé Bassani que cet



mi avesse creduto, ma infatti la pubblicazione (qui acclusa) uscì nel 1973.

A quella data, avevo fatto pure a tempo a incontrare l'autore. Era l'ora di pranzo quando gli uffici si spopolavano nell'Istituto di Fisica dell'Università di Roma. Così Alfonso, alla ricerca di Bassani, si era imbattuto in me, unica presente nell'ufficio accanto a quello del professore, perché saltavo il pranzo un po' per lavorare e un po' per questioni di dieta. "*Sono Alfonso Baldereschi*". Non mi pareva vero! Mi chiese cosa facessi... e restò ad ascoltare con espressione interessata, la sigaretta accesa, mentre illustravo le mie "cose" che scarabocchiavo alla lavagna e di cui improvvisamente mi vergognavo da morire. Me lo portò via Bassani, proprio mentre lui mi stava dando consigli. Quattro anni dopo, però, mi ritrovai in quella stessa configurazione, ma a Losanna, nell'ufficio di Alfonso Baldereschi, nel Laboratoire de physique appliquée dell'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL).

A quell'epoca i laboratori dell'EPFL – ora moltiplicati e pur raccolti in un campus stupendo – erano sparsi per la città, in edifici generalmente adibiti ad appartamenti privati. Quello di *physique appliquée* era all'inizio dell'Avenue Ruchonnet, che saliva dalla stazione e aveva all'altro capo una clinica famosa per la chirurgia estetica. Infatti, il mio primo giorno a Losanna, mentre vagavo alla ricerca del laboratorio, mi imbattei in un tipo che mi indicò proprio tale clinica (non dovevo essere molto carina!). Ma non gli diedi retta e, tornata sui miei passi, riconobbi una targa al numero 2, attratta dal profumo saponoso che il negozio di parrucchiere al piano terra diffondeva nell'aria. Invero, solo appena sette anni prima, nel 1969, l'EPFL era stata riconosciuta come tale, cioè come politecnico federale. Fino ad allora, dal 1855, di federale esisteva solo il politecnico famoso di Zurigo (l'Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, ETHZ). Quando ci arrivai, i laboratori di fisica pullulavano di professori il cui titolo più significativo era quello di essere nati nel cantone del Vaud. Ovviamente c'erano eccezioni (Emmanuel Mooser, Philippe Chopard ad esempio). Ero ufficialmente assistente di un professore che brillava per la sua assenza, anche se mascherata da una giacca rossa perennemente appesa, e con cura, a una sedia nel suo ufficio. Per

article n'existait pas. Je ne sais pas s'il m'a cru, mais en fait la publication (ci-jointe) est sortie en 1973.

Entre-temps, j'avais même eu le temps de rencontrer l'auteur. C'était l'heure du déjeuner, l'heure où les bureaux se vidaient à l'Institut de physique de l'Université de Rome. Alfonso, à la recherche de Bassani, était donc tombé sur moi, la seule présente dans le bureau à côté de celui du professeur, car je sautais le déjeuner en partie pour des raisons de travail et en partie pour des raisons de régime. Il s'est présenté : "*Sono Alfonso Baldereschi*". Je n'en revenais pas ! Il m'a demandé ce que je faisais... et il resta là, d'un air intéressé, la cigarette allumée, à m'écouter pendant que je décrivais mes « choses » que je griffonnais au tableau noir et dont j'avais soudain si honte. Bassani me l'a enlevé au moment où il avait commencé à me donner des conseils. Mais quatre ans plus tard, je me suis retrouvée dans la même configuration, à Lausanne, dans le bureau d'Alfonso Baldereschi, au Laboratoire de physique appliquée de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL).

À l'époque, les laboratoires de l'EPFL – aujourd'hui multipliés et même rassemblés dans un superbe campus – étaient disséminés dans la ville. Celui de physique appliquée se trouvait au début de l'Avenue Ruchonnet, qui montait depuis la gare et avait à l'autre bout une clinique réputée pour la chirurgie esthétique. D'ailleurs, lors de mon premier jour à Lausanne, alors que je me baladais à la recherche du laboratoire, je suis tombée sur un type qui m'a précisément indiqué cette clinique (je ne devais pas être très jolie !). Mais je ne l'ai pas écouté et, revenant sur mes pas, j'ai reconnu une plaque au numéro 2, attirée par l'odeur savonneuse qui se diffusait dans l'air depuis le salon de coiffure au rez-de-chaussée. En effet, ce n'est que sept ans plus tôt, en 1969, que l'EPFL avait été reconnue comme telle, c'est-à-dire comme une école polytechnique fédérale. Jusqu'alors, depuis 1855, le seul établissement fédéral existant était la fameuse École Polytechnique de Zurich (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, ETHZ). Lorsque je suis arrivée à l'EPFL, les laboratoires de physique regorgeaient de professeurs dont le titre le plus significatif était d'être nés dans le canton de Vaud. Bien sûr, il y avait des exceptions (Emmanuel Mooser, Philippe Chopard par exemple). J'étais officiellement l'assistante



fortuna, riuscii in qualche modo a cambiare rapidamente progetto e ad essere – anche ufficialmente – affidata ad Alfonso Baldereschi.

Se non avessi incontrato Alfonso, se non mi avesse dato l'opportunità di lavorare con lui, non sarei mai stata una persona "di professione fisica". È stato lui a insegnarmi cosa volesse dire. Fino ad allora ero stata una quasi-dilettante, appassionata sì ma un po' persa, vagabonda per la strada della ricerca, e soprattutto sola. Alfonso non abbandonava mai chi lavorava con lui. Aveva tanti progetti diversi, e poi incarichi di insegnamento e pure i suoi calcoli da portare avanti da solo... e anche se a ore improbabili... ti trovava e ti "inchiodava" a ragionare insieme su quello che si faceva: al come e al perché.

Riusciva sempre a ritagliarsi tempi e spazi per te. Ricordo le ore tarde della sera, ricordo le notti in laboratorio, ma anche i discorsi mentre mangiucchiavamo i panini ineguagliabili di Polli (famoso panettiere di Losanna) che andavamo a prenderci su per l'Avenue de la Gare, e pure quando, eroi della notte (noi due e altri), gustavamo i croissants appena sfornati all'alba dal fornaio del Sous-Gare, vicino al cinema "cochon"! Parlavamo del nostro lavoro anche quando mi diceva di aspettarlo dopo la sua lezione all'edificio principale dell'EPFL e lentamente tornavamo in laboratorio attraverso il Parc de Milan. In queste occasioni Alfonso cercava anche di comunicarmi il suo apprezzamento per la città di Losanna, le strade verdi e silenziose, il lago. Sapeva quanto io, educata a Roma e vissuta due anni a Parigi, soffrissi nella stretta di quel villaggio imprigionato dalle montagne su uno specchio d'acqua, e per di più insospitale e noioso, senza sole, senza allegria, senza storia. Mi insegnava a spulciare le cose "belle". Mi sarei affezionata, secondo lui, a quella città un giorno e infatti... ha avuto ragione, anche se questo avvenne molti anni dopo.

Alfonso era allegro quando lavorava, sempre contento di capire qualunque cosa nuova. Anzitutto: Siamo sicuri di questi numeri? Quanta gente fa filosofia su numeri sbagliati anche oggi (e!) e pubblica e fa carriera. Ma con Alfonso era impossibile. E poi: Quale era il contenuto di questi risultati? Il perché cioè... la fisica. Bisognava capire e spiegare. Lui

d'un professore qui brillava per la sua assenza, bene che mascherata da una giacca rossa perennemente e solennemente appesa a una sedia nel suo ufficio. Fortunatamente, l'ho rapidamente riuscito a cambiare il progetto e a essere – anche ufficialmente – affidata ad Alfonso Baldereschi.

Se io non avessi conosciuto Alfonso, se io non avessi dato l'opportunità di lavorare con lui, io non sarei mai stata una « professionista della fisica ». C'è lui che mi ha insegnato che cosa significava. Fin lì, ero quasi dilettante, appassionata certo, ma un po' perduta, smarrita sul sentiero della ricerca, e soprattutto sola. Alfonso non abbandonava mai quelli che lavoravano con lui. Lui aveva molti progetti differenti, poi delle responsabilità di insegnamento così che i suoi calcoli da portare avanti da solo... e anche se a ore improbabili... il te ritrovava e te « clouava » a riflettere insieme su ciò che noi facevamo : sul come e sul perché.

Il riusciva sempre a se stesso del tempo e dello spazio per te. Ricordo le ore tarde della sera, ricordo le notti in laboratorio, ma anche i discorsi mentre mangiucchiavamo i panini ineguagliabili di Polli (un famoso panettiere di Losanna) che andavamo a prenderci su per l'Avenue de la Gare, e pure quando, eroi della notte (noi due e altri), gustavamo i croissants appena sfornati all'alba dal fornaio del Sous-Gare, vicino al cinema "cochon"! Parlavamo del nostro lavoro anche quando mi diceva di aspettarlo dopo la sua lezione all'edificio principale dell'EPFL e lentamente tornavamo in laboratorio attraverso il Parc de Milan. In queste occasioni Alfonso cercava anche di comunicarmi il suo apprezzamento per la città di Losanna, le strade verdi e silenziose, il lago. Sapeva quanto io, educata a Roma e vissuta due anni a Parigi, soffrissi nella stretta di quel villaggio imprigionato dalle montagne su uno specchio d'acqua, e per di più insospitale e noioso, senza sole, senza allegria, senza storia. Mi insegnava a spulciare le cose "belle". Mi sarei affezionata, secondo lui, a quella città un giorno e infatti... ha avuto ragione, anche se questo avvenne molti anni dopo.

sapeva e capiva tutto profondamente, lo spiegava con chiarezza e inquadrava qualunque risultato in un contesto più grande. Non ti faceva mai pesare la disparità di livello tra te e lui. Mai. Ti ascoltava, ti dava fiducia, ti incoraggiava, e così riconoscevi da solo i tuoi limiti e crescevi.

Scrivere un articolo con lui era cosa lunga e laboriosa e magari non si finiva mai, ma era divertente. Un suo indimenticabile insegnamento suona più o meno così: "Il lettore, chiunque, deve capire bene e chi può deve poter riprodurre i tuoi risultati". Mi fa sorridere anche adesso, visto lo stile ambiguo o volutamente oscuro di tantissimi articoli. Mi ricordo con un piacere speciale la scrittura di un articolo con lui e Roberto Car. Cominciò con un pranzo al Trois Rois (Sous-Gare) – buonissimo ma pesantissimo menu – io cercavo di mangiare solo insalatine e simili, ma loro no ovviamente e questo prolungava il tempo della scrittura, ma anche quello dell'allegria genuina e spensierata. Bisognava poi concentrarsi su qualcosa di sicuro meno ameno, cioè sul perché gli effetti dell'ordine dei cationi nelle eterostrutture di GaAs-AlAs erano risultati "molto piccoli". Sempre avvolta per ore nella nebbia delle sigarette di Alfonso e della pipa di Roberto, ne uscii affumicata, insieme a una bozza dell'articolo. Una copia della bozza era destinata, come sempre, ad un cassetto della scrivania di Alfonso a "decantere come il buon vino" (sue esatte parole). Era la sua strategia, che negli anni a venire ho apprezzato e seguito. Bisogna tornare all'articolo dopo qualche giorno almeno, perché si formi quella facoltà critica nella mente dell'autore necessaria a completare e eventualmente correggere il testo originale.

All'EPFL, in quegli anni (1977 – 1979) vivevamo in un mondo assurdo, che ora definirei primitivo, in cui Alfonso costruì tutto, anche l'inimmaginabile. Anche semplicemente preparare un articolo pronto per essere sottomesso a una rivista costava tempo e fatica. Lui aveva fatto parte dello staff di ricerca dei Bell Laboratories, il paradiso della scienza, dove io stessa potei constatare più tardi che c'era chi ti faceva tutto per una pubblicazione, e pure i lucidi per i seminari, ma anche a Roma c'era il disegnatore dell'Istituto di Fisica, a cui tu portavi solo gli schizzi di quello che desideravi pubblicare. A Losanna NO.

Alfonso était joyeux quand il travaillait, toujours heureux de comprendre quoi que ce soit de neuf. Tout d'abord : sommes-nous sûrs de ces chiffres ? Combien de personnes philosophent encore aujourd'hui (!) sur des chiffres erronés, publient et font carrière. Mais avec Alfonso, c'était impossible. Ensuite : quel était le contenu de ces résultats ? Le pourquoi, c'est-à-dire... la physique. Il fallait le comprendre et l'expliquer. Il connaissait et comprenait tout en profondeur, il l'expliquait très clairement et replaçait chaque résultat dans un contexte plus large. Il ne te faisait jamais peser la différence de niveau entre toi et lui. Jamais. Il t'écoutait, te donnait confiance, t'encourageait, ce qui te permettait de reconnaître tes propres limites et de progresser.

Écrire un article avec lui était une affaire longue et laborieuse que l'on risquait de ne jamais terminer, mais c'était divertissant. L'un de ses enseignements inoubliables sonne à peu près ainsi : « Le lecteur, quel qu'il soit, doit bien comprendre et ceux qui le peuvent doivent pouvoir reproduire tes résultats. » Cela me fait encore sourire aujourd'hui, étant donné le style ambigu ou délibérément obscur de tant d'articles. Je me souviens avec un plaisir particulier de la rédaction d'un article avec lui et Roberto Car. Cela a commencé par un déjeuner aux Trois Rois (Sous-Gare) – un menu très bon, mais très lourd... J'essayais de ne manger que de petites salades et autres, mais eux, bien sûr, non, et cela prolongeait le temps de l'écriture mais aussi celui de la bonne humeur, véritable et légère. Il fallait ensuite nous concentrer sur un sujet certainement moins amusant, à savoir pourquoi les effets de l'ordre des cations dans les hétérostructures GaAs-AlAs s'étaient avérés « très faibles ». Toujours enveloppée pendant des heures dans la brume des cigarettes d'Alfonso et de la pipe de Roberto, j'en suis ressortie enfumée, avec un brouillon de l'article. Une copie de ce brouillon était destinée, comme toujours, à un tiroir du bureau d'Alfonso pour « decanter comme du bon vin » (ses mots exacts). C'était sa stratégie, que j'ai appréciée et suivie au cours des années suivantes. Il faut revenir à l'article après quelques jours au moins, pour que se forme dans l'esprit de l'auteur la faculté critique nécessaire pour compléter et éventuellement corriger le texte original.

E così Alfonso mi insegnò anche a fare i disegni a mano, con il pennino e l'inchiostro di china. Ho ancora un righello che mi aveva dato durante una notte di lavoro, con attaccato lo scotch per non sporcare il foglio di carta lucida. Sì, l'ho conservato per ricordo.

Il calcolatore funzionava sempre ai laboratori Bell, ma anche a Roma e a Parigi, dove avevo lavorato negli anni precedenti, il computer restava sveglio durante il fine settimana. A Losanna NO. Era in funzione solo dalle 8 del mattino alle 9 di sera dal lunedì al venerdì, e il sabato fino a mezzogiorno, quando un messaggio dell'operatore – "*Mademoiselle... bon weekend*" – mi buttava fuori. In queste condizioni, Alfonso non si scoraggiò e costruì pezzetto su pezzetto le condizioni appropriate per una ricerca di livello internazionale nel campo della fisica computazionale. A quell'epoca, diversamente da cosa stava succedendo negli Stati Uniti, in Europa i teorici della materia condensata guardavano con forte disistima coloro che usavano il calcolatore per ottenere risultati: i "computazionali" erano razza inferiore. Così Alfonso, uno dei pionieri nel mondo della disciplina che ora chiamiamo *computational materials science*, la introdusse in Svizzera, vincendo, armato solo della sua capacità e reputazione, chiunque aveva per anni storto il naso. È stato lui a creare un istituto (l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux, IRRMA) a questa disciplina dedicato, che riuniva in una collaborazione senza precedenti le università della Svizzera francese, e è stato lui, anche se dopo tanti anni, ad avere la prima Cattedra in Fisica Computazionale. E il primo supercomputer ad arrivare in Svizzera nel 1986 arrivò proprio all'EPFL! Proprio in quei giorni io lasciai per la seconda volta l'EPFL e fui arruolata all'IBM Research a Zurigo. Anche io, come tanti, dovevo tanto della mia competenza – così riconosciuta – ad Alfonso Baldereschi.

Anche se con lunghi intervalli di silenzio, non persi mai davvero il contatto con Alfonso. Per venti anni tornai a Losanna solo raramente: per tenere dei seminari e quando lui o Alfredo Pasquarello mi invitavano a far parte della commissione di dottorato dei loro rispettivi allievi. Poi, dal 2006, venni arruolata in varie mansioni all'EPFL (di nuovo!) e così passai tanto tempo a Losanna. Non persi mai l'opportunità di parlare con Alfonso, ormai il più delle volte nel terrazzino

À l'EPFL, à cette époque (1977-79), nous vivions dans un monde absurde, que je qualifierais aujourd'hui de primitif, dans lequel Alfonso a tout construit, même l'inimaginable. Le simple fait de préparer un article prêt à être soumis à une revue coûtait du temps et de l'effort. Il avait fait partie du personnel de recherche des Laboratoires Bell, le paradis de la science, où j'ai pu moi-même constater plus tard qu'il y avait des gens qui faisaient tout pour toi en vue d'une publication, même les transparents pour les séminaires ; même à Rome, il y avait le dessinateur de l'Institut de physique, à qui tu apportais seulement les esquisses de ce que tu voulais publier. À Lausanne NON. Alfonso m'a donc aussi appris à dessiner à la main, avec la plume et de l'encre de Chine. J'ai encore une règle qu'il m'avait donnée pendant une nuit de travail, avec du scotch pour ne pas salir la feuille de papier glacé. Oui, je l'ai gardée en souvenir.

L'ordinateur fonctionnait tout le temps aux Bell Labs ; même à Rome et à Paris, où j'avais travaillé les années précédentes, l'ordinateur restait éveillé le week-end. À Lausanne NON. Il n'était en fonction que de 8 h à 21 h du lundi au vendredi, et le samedi jusqu'à midi, lorsqu'un message de l'opérateur « *Mademoiselle... bon weekend !* » me chassait. Dans ces conditions, Alfonso ne s'est pas découragé et a construit pièce par pièce les conditions appropriées pour une recherche de classe mondiale dans le domaine de la physique computationnelle. À l'époque, contrairement à ce qui se passait aux États-Unis, les théoriciens de la matière condensée en Europe regardaient avec grand dédain ceux qui utilisaient les ordinateurs pour obtenir des résultats : les « *computationalistes* », une race inférieure. Alfonso, l'un des pionniers dans le monde entier de la discipline que nous appelons aujourd'hui *computational materials science*, l'a donc introduite en Suisse, l'emportant, armé seulement de sa compétence et de sa réputation, sur tous ceux qui, pendant des années, avaient tourné le dos à cette discipline. C'est lui qui a créé un institut (l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux, IRRMA) dédié à cette discipline, qui a réuni les universités romandes dans une collaboration sans précédent, et c'est lui, bien qu'après de nombreuses années, qui a occupé la première Chaire de Physique Computationnelle. Et le premier superordinateur à arriver en Suisse en 1986

all'ultimo piano, uno dei pochi rifugi rimasti per i fumatori. Parlavamo di tutto, dei miei progetti, su cui non mancava di darmi consigli, dei suoi attuali e anche della mia situazione personale. Mi pento a volte di non aver seguito alcuni dei suoi consigli di vita. Alfonso mi invitava spesso alla cautela prima di prendere una qualsiasi decisione, a riflettere con uno sguardo al futuro invece che al mero presente. La sua lucida razionalità, corroborata da una lunga esperienza personale, cozzava purtroppo con la mia tendenza a scegliere velocemente e con il cuore, ovvero con la pancia come si direbbe ora. In ogni caso, comunque, Alfonso poi mi ha sempre supportato e aiutato.

Andò in pensione dall'EPFL alla fine di settembre del 2011, allo scadere dei 65 anni, come prevede la legge svizzera. Ricordo che quella sua "ultima" sera ero nel mio ufficio all'EPFL e lo chiamai mentre stava mettendo a posto il suo. Non dissi quasi nulla, ma mi sentivo un groppone alla gola: Un personaggio, cui la facoltà, almeno, avrebbe dovuto dedicare un monumento, veniva lasciato andare così? C'era stato invero un workshop a lui dedicato ma... mi faceva male lo stesso quella sera immaginarlo lì da solo con una montagna di ricordi. E quando, un anno dopo, mi trasferirono in quello che era stato il suo ufficio, mi sentii davvero a disagio. Lo avevano svuotato! Quell'ufficio era stato un'oasi di pace, lo specchio di quella sua mente organizzata e potente, tappezzato di libri e dossieri con articoli e appunti, tutti ordinati e catalogati. Alcuni furono portati in un altro ufficio per professori emeriti che divideva con Antonio Quattropani, suo amico di lunga data. Anni dopo ci misero scrivania e scaffali anche per me ma non ci incontrammo mai, lui quasi sempre a Trieste e io a Zurigo. Quando ci capitavo, gli lasciavo un saluto sulla lavagna, che a volte trovavo decorata dai disegni di un bambino, penso proprio uno dei suoi nipoti. Adriano, il primo: Mi annunciò la sua nascita con uno sguardo nuovo, felicissimo, commosso. Quella stessa luce calda la ritrovai nei suoi occhi quando, qualche anno dopo, mi disse di avere un secondo nipote, Giuliano.

L'ultima volta che incontrai Alfonso fu il 27 aprile 2023, quasi esattamente un anno prima della sua scomparsa (22 aprile 2024) in occasione dell'inaugurazione di un nuovo grande ufficio aperto, riservato ai professori emeriti della facoltà. Lo trovai molto

est arrivato à l'EPFL ! C'est à cette époque que j'ai quitté l'EPFL pour la deuxième fois et que j'ai été recruté par IBM Research à Zurich. Comme tant d'autres, je devais une grande partie de mon expertise – ainsi reconnue – à Alfonso Baldereschi.

Malgré de longs intervalles de silence, je n'ai jamais vraiment perdu le contact avec Alfonso. Pendant vingt ans, je ne suis retournée à Lausanne que rarement : pour donner des séminaires et lorsque lui-même ou Alfredo Pasquarello m'invitaient à faire partie du jury de thèse de leurs doctorants respectifs. Puis, à partir de 2006, j'ai été recrutée pour diverses fonctions à l'EPFL (de nouveau !) et ainsi j'ai passé beaucoup de temps à Lausanne. Je ne perdais jamais l'occasion de parler avec Alfonso, la plupart du temps sur la petite terrasse du dernier étage, l'un des rares refuges restants pour les fumeurs. Nous parlions de tout, de mes projets, sur lesquels il ne manquait pas de me donner des conseils, de ses projets actuels et aussi de ma situation personnelle. Je regrette parfois de ne pas avoir suivi certains de ses conseils de vie. Alfonso m'invitait souvent à la prudence avant de prendre toute décision, à réfléchir en pensant à l'avenir plutôt qu'au simple présent. Sa lucide rationalité, corroborée par une longue expérience personnelle, se heurtait malheureusement à ma tendance à décider trop souvent vite et avec mon cœur, ou avec mon ventre comme on dirait aujourd'hui. Quoi qu'il en soit, Alfonso m'a toujours soutenue et aidée.

Il a pris sa retraite de l'EPFL à la fin du mois de septembre 2011, à l'âge de 65 ans, comme le prévoit la loi en Suisse. Je me souviens que ce « dernier » soir, j'étais dans mon bureau à l'EPFL et je l'ai appelé pendant qu'il rangeait le sien. Je n'ai presque rien dit, mais j'ai senti une boule dans la gorge : un personnage, auquel la faculté, au moins, aurait dû dédier un monument, s'en allait comme ça ? Il y avait en effet eu un workshop d'une journée que l'EPFL lui a dédié... mais... ça me faisait mal quand même, ce soir-là, de l'imaginer là, seul avec une montagne de souvenirs. Et lorsque, un an plus tard, on m'a transférée dans ce qui avait été son bureau, je me suis vraiment sentie mal à l'aise. Ils l'avaient vidé ! Ce bureau avait été une oasis de paix, le miroir de son esprit organisé et puissant, tapissé de livres et de dossieri avec des articles et des notes, tous bien rangés et catalogués.

invecchiato ma... sempre lui, allegro e affettuoso. Il suo sguardo aveva conservato quella luminosa serenità che contraddistingue le persone buone e sagge. Ci salutammo, dopo aver parlato a lungo di tutto come sempre, dandoci appuntamento alla mia prossima visita a Losanna o a Trieste. Purtroppo, non ci sono mai potuta andare da allora.

In conclusione, non posso omettere di esprimere un pensiero che so di condividere con chiunque lo abbia conosciuto: Il suo esempio era e sempre sarà una luce, un faro di per sé. Non solo perché era geniale, ma anche perché era instancabile, sia nella ricerca che nell'insegnamento, e era un professionista onestissimo. Ricordo che una volta, verso le tre del mattino, sentii dei passi avvicinarsi cadenzati all'ufficio attiguo al mio (non so cosa ci facessi, forse dovevo preparare un seminario o semplicemente, avendo fatto tardi con il mio lavoro, non avevo avuto ancora una volta il coraggio di tornare a casa di notte da sola e aspettavo il sorgere del sole). Avrei avuto timore se non avessi riconosciuto il suo passo inconfondibile. Mi disse che doveva preparare una lezione per le otto. Poi come non ricordare che, negli anni seguenti, a partire circa dal 1980, senza soluzione di continuità al suo lavoro Alfonso si trasferiva dal suo ufficio al treno per Trieste. Era diventato un pezzetto di casa quel Simplon Express – squallido discendente dell'Orient Express – che Erio Tosatti rinominò un giorno il "Baldereschi Express". E cosa dire della sua cristallina onestà professionale? Non va davvero sottovalutata. Basti pensare, infatti, alla boria di tanti cosiddetti scienziati e alla mancanza di scrupoli, diffusa anche nella nostra comunità, nell'appropriarsi delle idee o del credito del lavoro di altri. Semmai fu lui ad esserne derubato e potrei scrivere su questo argomento ma... so che Alfonso non approverebbe. Non me ne ha mai parlato infatti, ma io – e non solo io – lo so. Nonostante la sua statura indiscussa di scienziato, poi, Alfonso ha sempre avuto rispetto per tutti coloro che, anche se senza scintille, si impegnavano seriamente nella ricerca. Un insegnamento, anche questo, che non va dimenticato.

Mi sono tuffata nei ricordi... molti belli sì, ma una tristezza senza fine ora mi afferra. È quella sensazione ineffabile che la lingua greca ha racchiuso in una parola sola: nostalgia, il dolore del ritorno.

Certains ont été transportés dans un autre bureau destiné aux professeurs émérites, qu'il partageait avec Antonio Quattropani, son ami de longue date. Des années plus tard, on y a installé un bureau et des étagères pour moi aussi, mais nous ne nous sommes jamais rencontrés, il était presque toujours à Trieste et moi à Zurich. Lorsque je me rendais à Lausanne, je lui laissais un message sur le tableau noir, que je trouvais parfois décoré des dessins d'un enfant, je suis sûre qu'il s'agissait de l'un de ses petits-enfants. Adriano, le premier : Il m'a annoncé sa naissance avec un regard nouveau, ravi, ému. Cette même lumière chaleureuse, je l'ai retrouvée dans ses yeux lorsque, des années plus tard, il m'a dit qu'il avait un deuxième petit-fils, Giuliano.

La dernière fois que j'ai rencontré Alfonso, c'était le 27 avril 2023, presque exactement un an avant son décès (22 avril 2024), lors de l'inauguration d'un nouveau grand bureau ouvert réservé aux professeurs honoraires de la faculté. Je l'ai trouvé très vieilli mais... toujours lui, joyeux et affectueux. Son regard avait conservé cette lumineuse sérénité qui distingue les gens bons et sages. Nous nous sommes quittés, après avoir longuement parlé de tout, comme d'habitude, et nous sommes convenus de nous revoir lors de ma prochaine visite à Lausanne ou à Trieste. Malheureusement, je n'ai jamais pu m'y rendre depuis.

En conclusion, je ne peux pas omettre d'exprimer une pensée que je sais partager avec tous ceux qui l'ont connu : son exemple était et sera toujours une lumière, un phare en soi. Non seulement parce qu'il était génial, mais aussi parce qu'il était infatigable, tant dans la recherche que dans l'enseignement, et qu'il était un professionnel très honnête. Je me souviens qu'une fois, vers trois heures du matin, j'entendis des pas cadencés s'approcher du bureau voisin du mien (je ne sais pas ce que j'y faisais, peut-être devais-je préparer un séminaire ou simplement, ayant déjà travaillé tard, encore une fois je n'avais pas eu le courage de rentrer seule chez moi la nuit et j'attendais le lever du soleil). J'aurais eu peur si je n'avais pas reconnu son pas si caractéristique. Il me dit qu'il devait préparer un cours pour huit heures du matin. Et puis, comment ne pas mentionner que dans les années qui suivirent, à partir de 1980 environ, Alfonso passa, sans interruption de travail, de son





École Polytechnique Fédérale de Lausanne:  
Bâtiment PH. Le bureau d'Alfonso Baldereschi est au  
deuxième étage, le premier à gauche du bloc en saillie.  
Photo d'Alfredo Pasquarello.

bureau au train pour Trieste ? Ce Simplon express – sordide descendant de l'Orient express – qu'Erio Tosatti rebaptisa un jour « Baldereschi Express » était devenu presque un petit bout de chez lui. Et que dire de sa cristalline honnêteté professionnelle ? Il ne faut pas la sous-estimer. Il suffit de penser à l'arrogance de tant de soi-disant scientifiques et au manque de scrupules, même répandu au sein de notre communauté, lorsqu'il s'agit de s'appropriier les idées ou le crédit du travail des autres. En fait, c'est lui qui a été volé et je pourrais écrire à ce sujet mais... je sais qu'Alfonso n'approuverait pas. En fait, il ne m'en a jamais parlé, mais moi – et pas seulement moi – je le sais. Malgré sa stature incontestée de scientifique, Alfonso a toujours eu du respect pour tous ceux qui, même sans éclat, se consacraient sérieusement à la recherche. Un enseignement, là aussi, qu'il ne faut pas oublier.

Je me suis plongée dans les souvenirs... la plupart beaux, oui, mais une tristesse sans fin me saisit maintenant. C'est ce sentiment ineffable que la langue grecque a encapsulé dans un seul mot : nostalgie, la douleur du retour.

## Sia lodato Baldereschi... Loué soit Baldereschi...

---

**Giorgio Guizzetti**

---

Nell'agosto del 1977 si tenne a Perugia, nell'ambito dell'annuale Scuola Nazionale del Gruppo Nazionale di Struttura della Materia – Consiglio Nazionale delle Ricerche (GNSM-CNR), il corso Proprietà e Applicazioni dei Semiconduttori, rivolto principalmente a laureandi e neolaureati in fisica nell'indirizzo di Struttura della Materia. Il direttore della scuola

En août 1977, un cours intitulé Propriétés et applications des semi-conducteurs s'est tenu à Pérouse dans le cadre de l'école nationale annuelle du Gruppo Nazionale di Struttura della Materia du Consiglio Nazionale delle Ricerche (GNSM-CNR), qui s'adressait principalement aux étudiants et aux jeunes diplômés en physique dans le domaine de la

era Franco Forlani, fisico, amministratore delegato dell'industria Marelli Autronica, mentre io ero uno dei due segretari scientifici.

La prima ora di lezione e le successive quattro (una per giorno), sulla struttura elettronica dei semiconduttori, furono tenute da un giovane fisico teorico, Alfonso Baldereschi, docente all'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), segnalato da Franco Bassani. La chiarezza e la vivacità della sua esposizione catturarono subito l'attenzione e l'apprezzamento degli studenti e degli altri docenti presenti. Al termine della prima settimana di lezioni (cinque-sei ore al giorno) gli studenti compilarono delle "lodi goliardiche" per i docenti: quella di Alfonso recitava *"Sia lodato Baldereschi che ci tiene sempre desti"*. Forlani aggiunse: *"È stato il miglior docente"*.

Alla sera i docenti si riunivano a cena nei vari ristoranti di Perugia e in una di quelle occasioni scoprii che anche Alfonso amava la buona cucina e la convivialità, e che avevamo amici in comune, suoi compagni di studi in Fisica a Milano e miei ex compagni di liceo: questo fu l'inizio anche della nostra amicizia.

L'anno dopo, poiché da fisico sperimentale che si cimentava in semplici calcoli avevo qualche problema nell'interpretazione di spettri ottici di nuovi cristalli, chiesi ad Alfonso se potesse iniziarmi a un calcolo professionale di strutture elettroniche. Acconsentì con generosità e, con il supporto di una borsa della Fondazione Angelo Della Riccia, mi accolse per tre mesi a Losanna presso il Laboratoire de physique appliquée dell'EPFL. L'anno successivo Alfonso propose a Emmanuel Mooser, direttore dell'istituto, di assegnarmi per sei mesi l'incarico di primo assistente, per cui mi trasferii a Losanna con mia moglie e i due bambini.

Gli stage a Losanna furono una delle più significative esperienze della mia vita universitaria. Innanzitutto, Alfonso confermò le sue eccellenti doti didattiche: con poche "lezioni" e alcuni articoli mirati mi mise in grado di capire e utilizzare in breve un programma di calcolo basato sullo pseudopotenziale. Inoltre, all'EPFL conobbi diversi giovani teorici italiani che collaboravano con Alfonso: Wanda Andreoni, mia compagna di ufficio, Stefano Baroni, Roberto Car, Franco Meloni, Cecilia Pennetta, Raffaele Resta e

structure de la matière. Le directeur de l'école était Franco Forlani, physicien et PDG d'Industria Marelli Autronica, tandis que j'étais l'un des deux secrétaires scientifiques.

La première heure de cours et les quatre suivantes (une par jour), sur la structure électronique des semi-conducteurs, ont été données par un jeune physicien théoricien, Alfonso Baldereschi, chargé de cours à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), recommandé par Franco Bassani. La clarté et la vivacité de son exposé ont immédiatement capté l'attention et l'appréciation des étudiants et des autres professeurs présents. À la fin de la première semaine de cours (5 à 6 heures par jour), les étudiants ont rédigé des « éloges goliardiques » pour les conférenciers. Celui d'Alfonso disait : *« Loué soit Baldereschi qui nous tient toujours éveillés »*. Forlani a ajouté : *« C'était le meilleur des enseignants »*.

Le soir, les professeurs se réunissaient pour dîner dans différents restaurants de Pérouse et, à l'une de ces occasions, j'ai découvert qu'Alfonso aimait aussi la bonne cuisine et la convivialité et que nous avions des amis en commun, ses camarades étudiants en physique à Milan et mes anciens camarades de lycée : ce fut ainsi le début de notre amitié.

L'année suivante, comme j'avais du mal à interpréter les spectres optiques de nouveaux cristaux en tant que physicien expérimental s'essayant à des calculs simples, j'ai demandé à Alfonso s'il pouvait m'initier au calcul professionnel des structures électroniques. Il a généreusement accepté et, avec le soutien d'une bourse de la Fondazione Della Riccia, m'a accueilli pendant trois mois à Lausanne, au Laboratoire de physique appliquée de l'EPFL. L'année suivante, Alfonso a proposé à Emmanuel Mooser, directeur du Laboratoire, de m'attribuer le poste de premier assistant pour six mois. Je suis donc allé m'installer à Lausanne avec ma femme et mes deux enfants.

Les stages à Lausanne ont été l'une des expériences les plus marquantes de ma vie universitaire. Tout d'abord, Alfonso a confirmé ses excellentes compétences pédagogiques : avec seulement quelques « cours » et quelques articles ciblés, il m'a permis

Annabella Selloni, dei quali conobbi le interessanti attività di ricerca, instaurando inoltre con alcuni di loro un'amicizia duratura. A riprova della reputazione di Alfonso e della stima di cui godeva, molti fisici italiani e stranieri passavano da Losanna per fargli visita e discutere con lui, che era sempre molto aperto e disponibile. Solo una volta, dopo l'incontro con un fisico teorico, alquanto famoso all'epoca, ebbe a dire un po' sorpreso: *"È solo un carpitore di idee"*.

Tutti questi incontri e le collaborazioni su varie linee di ricerca costringevano Alfonso a un'organizzazione ferrea della propria giornata lavorativa che, come vedevamo, spesso continuava anche la notte. Però, almeno una volta alla settimana, riemergeva in lui il gusto della buona cucina e della convivialità e quindi cenavamo in gruppo in qualche locale tipico della vecchia Losanna o in trattorie sulla Route du Vignoble, in mezzo ai vigneti (ah, le scorpiate di *raclette* o di *fondue* di formaggi!). In queste occasioni si parlava poco di fisica, mentre spesso insorgevano animate discussioni sulla situazione italiana (c'erano allora le Brigate Rosse e vari rapimenti, fra cui quello di Aldo Moro) alle quali anche Alfonso partecipava con interesse ma sempre pacatamente.

Durante il mio secondo stage a Losanna, nel 1979, scendemmo a Pavia perché, su mia proposta, Alfonso fu invitato dal mio Dipartimento di Fisica a tenere, nell'ambito della Scuola di specializzazione in Fisica, un ciclo di lezioni sulle proprietà ottiche e magnetico-ottiche dei solidi e le loro correlazioni con le strutture elettroniche e magnetiche. Anche in questa occasione la sua didattica fu eccellente, tanto che Attilio Rigamonti, ordinario di Struttura della Materia, e altri docenti affermarono che bisognava adoperarsi affinché Baldereschi potesse rientrare in una università italiana.

Di fatto, essendo nel 1980 commissario del concorso nazionale per professori ordinari, Rigamonti fu tra i sostenitori della candidatura di Baldereschi, che risultò fra i vincitori e fu chiamato nel 1981 sulla cattedra di Struttura della Materia all'Università di Trieste. Nello stesso anno l'EPFL lo nominò *professeur titulaire*. La doppia posizione universitaria, che pur lo costringeva a fare la spola fra Losanna e Trieste, non gli impedì di continuare ricerche di punta e di

de comprendre et d'utiliser en très peu de temps un programme de calcul basé sur les pseudopotentiels. En outre, à l'EPFL, j'ai fait la connaissance de plusieurs jeunes théoriciens italiens qui ont collaboré avec Alfonso : Wanda Andreoni, ma collègue de bureau, Roberto Car, Annabella Selloni, Franco Meloni, Raffaele Resta, Cecilia Pennetta et Stefano Baroni, dont j'ai appris à connaître les activités de recherche intéressantes et avec certains desquels j'ai noué des liens d'amitié durables. Preuve de la réputation d'Alfonso et de l'estime qu'on lui portait, de nombreux physiciens italiens et étrangers sont passés par Lausanne pour le rencontrer et discuter avec lui, qui s'est toujours montré très ouvert et disponible. Ce n'est qu'une seule fois, après une rencontre avec un physicien théoricien assez célèbre à l'époque, qu'il a dit, un peu surpris : *« Ce n'est qu'un attrapeur d'idées »*.

Toutes ces réunions et collaborations sur différents axes de recherche contraignaient Alfonso à une organisation rigoureuse de sa journée de travail qui, comme nous l'avons vu, se prolongeait souvent jusqu'à la nuit. Cependant, au moins une fois par semaine, il retrouvait le goût de la bonne cuisine et de la convivialité, et nous dînions en groupe dans quelque restaurant typique du vieux Lausanne ou dans des bistrotts de la Route du Vignoble, au milieu des vignes (ah, quels gueuletons de *raclette* ou de *fondue au fromage* !) Dans ces occasions, on parlait peu de physique, alors que des discussions animées surgissaient souvent sur la situation italienne (à l'époque, il y avait les Brigades rouges et divers enlèvements, dont celui d'Aldo Moro) auxquelles Alfonso participait aussi avec intérêt, mais toujours calmement.

Pendant mon deuxième stage à Lausanne, nous sommes descendus à Pavia en 1979 parce que, à ma suggestion, Alfonso avait été invité par mon Département de physique à donner une série de conférences à l'École de spécialisation en physique sur les propriétés optiques et magnéto-optiques des solides et leur corrélation avec les structures électroniques et magnétiques. À cette occasion également, son enseignement a été excellent, à tel point qu'Attilio Rigamonti, professeur de structure de la matière, et d'autres professeurs ont déclaré qu'il fallait tout faire



contribuire a creare scuole eccellenti di fisica teorica in entrambe le sedi. Inoltre partecipò attivamente, in rappresentanza dell'Università di Trieste, alle riunioni scientifico-finanziarie della Sezione Nazionale "Semiconduttori" del GNSM, in cui vidi Alfonso, teorico fra tanti sperimentali, sostenere a spada tratta che occorreva sostituire con *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) e *Metal-Organic Chemical Vapour Deposition* (MOCVD) le vecchie tecniche di crescita di cristalli e strutture, e dotarsi delle emergenti tecnologie di caratterizzazione, quali *Secondary Ion Mass Spectrometry* (SIMS) e *Scanning Tunneling Microscopy* (STM).

Dal 1987 in poi i nostri incontri, tranne in qualche congresso internazionale, si diradarono, anche perché entrambi fummo impegnati in numerose cariche dirigenziali universitarie e in organismi nazionali e internazionali di ricerca. La nostra amicizia però non si esaurì, e ci invitammo reciprocamente alle feste per i nostri settant'anni, organizzate dai nostri colleghi e allievi. Purtroppo, impegni di famiglia impedirono a entrambi di partecipare, ma ci scambiammo lunghi e affettuosi messaggi augurali. L'ultima chance di incontrarlo la ebbi in occasione delle celebrazioni per Franco Bassani, tenute a Canneto Pavese il 13 aprile 2024. Purtroppo, fra i tanti ex allievi e amici di Bassani presenti, Alfonso, che era uno degli allievi prediletti, non c'era. Non sapevamo se non si sentisse bene. Pochi giorni dopo... l'evento che gli fu fatale.

pour que Baldereschi revienne dans une université italienne.

En effet, en tant que commissaire du concours national pour les professeurs ordinaires en 1980, Rigamonti a été l'un des soutiens de la candidature de Baldereschi, qui a fait partie des lauréats et a été appelé à la chaire de structure de la matière à l'Université de Trieste en 1981. La même année, l'EPFL l'a nommé professeur titulaire. Son double poste universitaire, qui l'obligeait à faire la navette entre Lausanne et Trieste, ne l'a pas empêché de continuer à mener des recherches de pointe et de contribuer à la création d'excellentes écoles de physique théorique sur les deux sites. Il a également participé activement, en tant que représentant de l'Université de Trieste, aux réunions scientifiques et financières de la section nationale des semi-conducteurs du GNSM, au cours desquelles j'ai vu Alfonso, un théoricien parmi de nombreux expérimentateurs, défendre avec vigueur la nécessité de remplacer les anciennes techniques de croissance de cristaux et de structures par la *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) et la *Metal-Organic Chemical Vapour Deposition* (MOCVD), et d'adopter les techniques de caractérisation émergentes, telles que la *Secondary Ion Mass Spectrometry* (SIMS) et la *Scanning Tunneling Microscopy* (STM).

À partir de 1987, nos rencontres, à l'exception de quelques congrès internationaux, se sont raréfiées, en partie parce que nous occupions tous les deux de nombreux postes de direction universitaires et dans des organismes de recherche nationaux et internationaux. Notre amitié ne s'est pas éteinte pour autant et nous nous sommes invités mutuellement aux fêtes de nos 70 ans, organisées par nos collègues et nos étudiants. Malheureusement, des obligations familiales nous ont empêchés d'y assister tous les deux, mais nous avons échangé de longs et affectueux messages de vœux. J'aurais eu la dernière possibilité de le rencontrer à l'occasion des célébrations en l'honneur de Franco Bassani, qui se sont tenues à Canneto Pavese le 13 avril 2024. Malheureusement, parmi les nombreux anciens élèves et amis de Bassani présents, Alfonso, qui était l'un de ses élèves préférés, n'était pas là. Nous ne savions pas s'il ne se sentait pas bien. Quelques jours plus tard... l'événement qui lui a été fatal.



# En attendant... Alfonso

## En attendant... Alfonso

Cecilia Pennetta

La prima volta che parlai con Alfonso Baldereschi fu nel giugno del 1979, al telefono. Ero appena rientrata dal mio (primo) viaggio di nozze. Mi telefonò per informarmi che aveva esaminato la mia domanda per un soggiorno di dieci mesi a Losanna presso il Laboratoire de physique appliquée dell'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) sotto la sua supervisione, con una borsa di studio finanziata dal Ministero degli Esteri Italiano e mi chiedeva di andare a Losanna per un colloquio allo scopo di vagliare tale eventualità. Apprendendo nel corso della telefonata la circostanza delle mie recenti nozze, mi chiese se intendessi o meno mantenere la mia domanda. Gli risposi prontamente di sì, anche se quel sì, come si può immaginare, scatenò un bel po' di agitazione (a dir poco) nella mia famiglia.

Avevo presentato quella domanda quasi un anno prima, su suggerimento del mio relatore di tesi di laurea. Gli avevo espresso la mia volontà di effettuare un'esperienza di studio all'estero su aspetti teorici riguardanti la fisica dello stato solido (argomento della mia tesi) e lui mi aveva prontamente indicato il nome di Alfonso Baldereschi, la cui fama era già consolidata nel 1978 nell'ambiente della fisica dello stato solido. Francamente riponevo pochissime speranze nel successo della mia richiesta: è vero, avevo una media di voti brillantissima, ma l'università da cui provenivo era una piccola università di una piccola cittadina del Sud Italia, sconosciuta ai più (erano ben lontani i tempi attuali in cui la Puglia e il Salento sono diventati quasi trendy). Il Dipartimento di Fisica in cui avevo studiato era stato fondato poco più di dieci anni prima: altro che consolidate tradizioni accademiche... Questo però costituiva un motivo ulteriore per alimentare il mio desiderio di calarmi in un ambiente scientifico più solido,

J'ai parlé à Alfonso Baldereschi pour la première fois en juin 1979, au téléphone. Je venais de rentrer de ma (première) lune de miel. Il m'avait téléphoné pour m'informer qu'il avait examiné ma candidature pour un séjour de dix mois, sous sa supervision, au Laboratoire de physique appliquée de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), avec une bourse financée par le ministère italien des Affaires étrangères, et me demandait de me rendre à Lausanne pour un entretien afin d'examiner cette possibilité. Apprenant mon récent mariage au cours de notre conversation téléphonique, il m'avait demandé si j'avais l'intention de maintenir ma candidature. Je me suis empressée de répondre par l'affirmative, bien que, comme vous pouvez l'imaginer, cela ait provoqué une certaine agitation (pour ne pas dire plus) au sein de ma famille.

J'avais déposé cette candidature presque un an auparavant, sur le conseil de mon directeur de thèse à qui j'avais fait part de mon désir d'étudier à l'étranger dans le domaine de la physique théorique de l'état solide (sujet de ma thèse). Il m'avait rapidement indiqué le nom d'Alfonso Baldereschi, dont la réputation était déjà bien établie en 1978 dans le milieu de la physique de l'état solide. J'avais très peu d'espoir que ma candidature aboutisse: il est vrai que la moyenne de mes notes était remarquable, mais l'université d'où je venais était une petite université dans une petite ville du sud de l'Italie, inconnue pour la plupart des gens (à cette époque, les Pouilles et le Salento étaient loin d'être « tendance » comme ils le sont presque devenus aujourd'hui). Le Département de physique où j'avais étudié avait été fondé seulement un peu plus de dix ans auparavant, ce qui ne correspond pas vraiment à des traditions académiques bien établies. Cela renforçait d'autant plus mon désir de m'immerger dans un



vivace e di respiro internazionale, come era già allora l'EPFL. Mio marito sapeva quanto io ci tenessi e non si oppose, diversa fu la reazione dei miei genitori, soprattutto mio padre. Nell'Italia di quegli anni, soprattutto al Sud, il lavoro di una donna era "tollerato" ma il "vero" lavoro era quello dell'uomo, la donna poteva lavorare ma senza scegliere lavori "impegnativi" che ne mettessero in discussione il ruolo tradizionale di curatrice del focolare domestico... Io non la pensavo così.

In luglio, accompagnata da mia madre andai a Losanna per il colloquio. Nella sua grande affabilità e sensibilità, Alfonso invitò me e mia madre a casa sua (per un tè o una cena, non ricordo), ove conobbi anche sua moglie Laura. In ogni caso mia madre si tranquillizzò e passò dalla mia parte. Alfonso, persona molto accorta e gentile, si dette anche da fare per cercare uno *stage* in uno studio di architettura per mio marito, da poco laureato in Ingegneria civile, ma alla fine quest'ultimo preferì restare a Lecce. Con Alfonso avevamo concordato che avrei iniziato il mio soggiorno a ottobre e avrei lavorato sulla diffusione di impurezze interstiziali cariche in cristalli di Si e Ge, e così fu.

All'epoca il Laboratoire de physique appliquée era situato all'interno di un condominio all'inizio di Avenue Ruchonnet. Io avevo affittato un mini-studio nei dintorni, alle spalle della stazione ferroviaria. Lo studio era veramente piccolissimo, ma ci passavo così poco tempo, si può quasi dire che vivessi a Ruchonnet. Si dice che le persone si dividano in "allodole" e "gufi" in relazione alle loro abitudini "diurne" o "notturne". Io certamente ero un gufo, ma ero ben consapevole di recarmi in Svizzera, quasi per definizione il paese della puntualità, ero quindi ben determinata a modificare i miei bioritmi e rispettare puntualmente gli orari "ufficiali" del laboratorio. Ben presto però mi resi conto che non avevo alcun motivo per capovolgere le mie abitudini orarie, anzi! sarebbe stata un'impresa quasi vana sperare di incontrare Alfonso al mattino, tanto più di buon'ora, mentre era molto più facile intercettarlo nel tardo pomeriggio se non a sera, a volte anche molto inoltrata.

Alfonso aveva un rapporto particolare con il tempo, ovvero, si può dire, una sua personale filosofia del

environnement scientifique plus solide, plus vivant et plus international, comme l'était déjà à l'époque l'EPFL. Mon mari savait à quel point j'y tenais et il ne s'y était pas opposé. La réaction de mes parents, surtout de mon père, a été différente. Dans l'Italie de ces années-là, surtout dans le sud, le travail des femmes était « toléré », mais le « vrai » travail était celui des hommes ; une femme pouvait travailler, mais sans choisir des emplois « exigeants » qui remettaient en question son rôle traditionnel de gardienne du foyer... Je n'étais pas de cet avis.

En juillet, accompagnée de ma mère, je me suis rendue à Lausanne pour l'entretien. Avec une grande affabilité et sensibilité, Alfonso nous a invitées chez lui, ma mère et moi, pour un thé ou un dîner (je ne me souviens plus). À cette occasion, j'ai également rencontré sa femme Laura. En tout cas, cela a tranquilisé ma mère qui s'est rangée de mon côté. Alfonso étant une personne très avisée et gentille, il a également fait de son mieux pour trouver un stage dans un cabinet d'architectes pour mon mari qui venait d'obtenir son diplôme d'ingénieur civil mais qui a finalement préféré rester à Lecce. Nous avons convenu avec Alfonso que je commencerais mon séjour en octobre et que je travaillerais sur l'étude de la diffusion d'impuretés interstitielles chargées dans les cristaux de Si et de Ge, ce que j'ai effectivement fait.

À l'époque, le Laboratoire de physique appliquée était situé dans un immeuble au début de l'Avenue Ruchonnet. J'avais loué un mini-studio à proximité, derrière la gare. Le studio était vraiment minuscule, mais j'y passais tellement peu de temps qu'on aurait presque pu dire que je vivais à Ruchonnet. On dit que les gens sont divisés en « alouettes » et « hiboux » selon que leurs habitudes soient diurnes ou nocturnes. J'étais certainement un hibou, mais j'étais bien consciente de me rendre en Suisse, pays de la ponctualité presque par définition. J'étais donc bien décidée à modifier mes biorythmes et à respecter rigoureusement les horaires « officiels » du laboratoire, mais je me suis vite rendu compte que je n'avais aucune raison d'inverser mes habitudes horaires, bien au contraire ! En effet, il aurait été presque vain d'espérer rencontrer Alfonso le matin, surtout en début de journée, alors qu'il était beaucoup plus facile de l'intercepter en fin d'après-midi, voire le soir, parfois très tard.

tempo. Aspettare Alfonso era un'esperienza a cui, si può dire, tutti o quasi si sottoponevano con una certa rassegnazione: chi con pazienza, in alcuni casi con leggendaria pazienza... chi con rimbrotti. In effetti, quel suo farsi sempre attendere non era limitato ai soli incontri più o meno concordati, ma si manifestava anche nelle sue risposte e pareri in ambito lavorativo, su idee, progetti o articoli in corso di stesura.

Certo, ai tempi cui mi riferisco, tutto il procedere sia della ricerca che della pubblicazione dei suoi risultati era lento in una maniera quasi inimmaginabile oggi! Era un'epoca in cui gli articoli si chiamavano manoscritti perché effettivamente erano scritti a mano, e poi ricopiati con macchine da scrivere da benemerite segretarie nel più fortunato dei casi... le curve si disegnavano su carta millimetrata e poi disegnatori professionali li passavano a inchiostro su carta pergamena... cominciavano ad apparire i primi plot grafici, i programmi di calcolo si scrivevano su schede perforate e poi, dopo una bella passeggiata nel parco, si portava il blocco di schede al centro di calcolo dove venivano lette e il programma compilato ed eseguito. Naturalmente, non esistevano i personal computer ma anche i videoterminali in collegamento con il computer centrale erano abbastanza pochi... e parlo dell'EPFL. Tutto ciò si traduceva ovviamente in un numero di articoli pubblicati per anno molto minore e riduceva di molto l'ansia e la fretta attuali della pubblicazione.

Tuttavia, non era solo questo ad agire sul rapporto di Alfonso con il tempo, anzi lo era in minima parte. Credo che alla base ci fosse il suo perfezionismo, la sua ricerca di una perfezione rigorosa che si applicava innanzitutto nel fare ricerca, laddove pretendeva che ogni dettaglio, anche il più minuzioso, fosse attentamente controllato, ma ho l'impressione, anche se certo chi lo conosce meglio di me può smentirmi, che il suo perfezionismo si applicasse anche a molti aspetti della sua vita quotidiana, imbrigliando i tempi, plasmandoli, piegandoli a quelle che riteneva delle esigenze imprescindibili di esecuzione rigorosa delle diverse azioni. Di conseguenza la sua unità di misura del tempo era basata sulla qualità di ciò per cui era utilizzato, con una certa inevitabile discrezionalità sulla valutazione di questa qualità. Infiniti ricordi e

Alfonso aveva una relazione particolare con il tempo, on pourrait dire une philosophie personnelle du temps. Attendre Alfonso était une expérience à laquelle, on peut le dire, tout le monde, ou presque, se soumettait avec une certaine résignation : certains avec patience, dans certains cas avec une patience légendaire... et d'autres avec des reproches. En effet, le fait de toujours se faire attendre ne se limitait pas aux réunions plus ou moins convenues, mais se manifestait également dans ses réponses et ses avis lors de discussions scientifiques sur des idées, des projets ou des articles en cours de rédaction.

Bien sûr, à l'époque dont je parle, tout le processus de recherche et de publication de ses résultats était lent d'une manière qui est presque inimaginable aujourd'hui ! C'était une époque où les articles étaient appelés « manuscrits » parce qu'ils étaient écrits à la main, puis recopiés avec des machines à écrire par des secrétaires dévouées dans le meilleur des cas... Les courbes étaient tracées sur du papier millimétré, puis des dessinateurs professionnels appliquaient de l'encre sur du papier parchemin. Les premiers tracés graphiques commençaient à apparaître, les programmes de calcul étaient écrits sur des cartes perforées, puis, après une belle promenade dans le parc, le bloc de cartes était amené au centre informatique où elles étaient lues, et le programme compilé et exécuté. Bien sûr, il n'y avait pas de personal computers, mais même les terminaux connectés à l'ordinateur central étaient assez peu nombreux... et je parle de l'EPFL... Tout cela se traduisait évidemment par un nombre d'articles publiés par an beaucoup plus faible et réduisait considérablement l'anxiété et l'empressement qu'on ressent aujourd'hui concernant la publication.

Cependant, ce n'était pas cela qui influençait le plus la relation d'Alfonso avec le temps ; au contraire, cette influence était minime. Je crois que c'est son perfectionnisme, sa recherche d'une perfection rigoureuse qui s'appliquait avant tout à ses recherches, où il exigeait que chaque détail, même le plus infime, soit soigneusement contrôlé. J'ai l'impression, bien que ceux qui le connaissent mieux que moi puissent me contredire, que son perfectionnisme s'appliquait également à de nombreux aspects de sa vie quotidienne, maîtrisant le temps, le modelant, le pliant à ce qu'il considérait comme les exigences inévitables d'une exécution

infiniti episodi vengono alla mente, ma raccontarli non è certo lo scopo di questo breve contributo.

Voglio solo menzionare il fatto che, dopo il mio primo soggiorno a Losanna, tornai nel 1981 con una borsa di studio del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) per poi andare, verso la fine dello stesso anno alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) di Trieste, in quella che ancora non era una vera e propria scuola di dottorato (che in Italia è stato istituito solo nel 1983) ma una scuola di alta formazione. Nel frattempo, ovviamente il mio matrimonio era andato a rotoli... A Trieste, dove continuavo ad avere Alfonso come supervisore e a lavorare sulla diffusione di impurezze interstiziali, ebbi modo di seguire le sue indimenticabili lezioni di Fisica dello Stato Solido, veramente una pietra miliare nella mia formazione e credo anche nella formazione di tutti coloro che sono stati poi i suoi allievi, sia per i contenuti che per la limpidezza e il rigore della sua esposizione. La didattica: un'espressione in cui si manifestava pienamente tutto il suo sforzo e desiderio di perfezione.

Nel 1985 vinsi il concorso di Struttura della Materia nel primo posto da ricercatore universitario che l'Università di Lecce aveva bandito in tale disciplina. Alfonso mi aveva sconsigliato vivamente di partecipare, ma la mia famiglia, da cui mi ero allontanata anni prima promettendo di tornare quando possibile, premeva fortemente. Feci domanda ma ero fortemente tentata a non presentarmi alla selezione. Poi il caso volle che in commissione di concorso capitasse proprio Franco Bassani, un nome che non ha certo bisogno di presentazione. Mi sembrò un segno del destino e mi impegnai per non sfigurare.

Come previsto da Alfonso, i miei primi anni a Lecce furono molto difficili. In quel periodo a Lecce le risorse di calcolo erano veramente risibili, l'esecuzione dei miei programmi di calcolo si misurava in settimane... non esistevano ancora né internet né la posta elettronica, si comunicava con fax lentissimi che stampavano su fogli illeggibili, e quando, finalmente libera da impegni didattici, riuscivo a "scappare" qualche giorno a Trieste per incontrare Alfonso, riassaporavo il gusto di lunghissime attese. Così fu che infine, nel 1992, mi arresi e decisi che

rigorosa delle differenti azioni. Par conséquent, son unité de mesure du temps était basée sur la qualité de l'usage auquel il était destiné, avec une certaine discrétion inévitable dans l'évaluation de cette qualité. D'innombrables souvenirs et épisodes me viennent à l'esprit, mais les raconter n'est certainement pas l'objet de cette courte contribution.

Je voudrais seulement mentionner le fait qu'après mon premier séjour à Lausanne, j'y suis revenue en 1981 avec une bourse du Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) et je me suis rendue, vers la fin de la même année, à la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) de Trieste, dans ce qui n'était pas encore une véritable école doctorale (celles-ci n'ayant été créées en Italie qu'en 1983), mais une école d'enseignement supérieur. Entre-temps, bien sûr, mon mariage avait volé en éclats... À Trieste, où j'ai continué d'avoir Alfonso comme superviseur et de travailler sur la diffusion des impuretés interstitielles, j'ai eu l'occasion d'assister à ses inoubliables leçons de Physique de l'état solide, ce qui a vraiment été une étape marquante de ma formation, et je crois également de celle de tous ceux qui ont été ses étudiants, tant par les contenus que par la clarté et la rigueur de ses exposés. Dans l'enseignement se manifestaient pleinement tout son effort et son désir de perfection.

En 1985, j'ai remporté le concours *Struttura della Materia* pour le premier poste de chercheur universitaire que l'Université de Lecce avait publié dans cette discipline. Alfonso m'avait fortement découragé d'y participer, mais ma famille, dont je m'étais éloignée des années auparavant en promettant de revenir dès que possible, insistait vivement. J'ai posé ma candidature, mais j'ai été fortement tentée de ne pas me présenter à la sélection. Puis, il se trouve que Franco Bassani, un nom qui n'a certainement pas besoin d'être présenté, faisait partie du comité du concours. Cela m'a semblé être un signe du destin et je me suis engagée à ne pas faire mauvaise impression.

Comme Alfonso l'avait prédit, mes premières années à Lecce ont été très difficiles. À cette époque, les ressources de calcul étaient vraiment dérisoires, et l'exécution de mes programmes de calcul prenait des semaines... Internet ou le courrier électronique n'existaient pas encore, nous communiquions

dovevo trovare una strada tutta mia. D'altra parte, incominciavano a incuriosirmi gli studi sul caos e sui sistemi disordinati, e in fondo quale allieva di un rigoroso perfezionista, come modestamente continuo a sentirmi, non è poi del tutto incomprensibile che mi sia lasciata affascinare dall'impresa di cercare qualche traccia di ordine nel disordine attorno.

au moyen de fax très lents qui s'imprimaient sur des feuilles de papier illisibles, et lorsque, enfin, libérée des contraintes de l'enseignement, je parvenais à « m'échapper » quelques jours à Trieste pour rencontrer Alfonso, je savourais à nouveau le goût d'attentes interminables. C'est ainsi que j'ai finalement abandonné en 1992 et décidé que je devais trouver ma propre voie. D'un autre côté, je commençais à être intriguée par l'étude du chaos et des systèmes désordonnés. Après tout, en tant qu'élève d'un perfectionniste rigoureux, comme je continue de me considérer modestement, il n'est pas complètement incompréhensible que j'aie été attirée par la recherche d'une trace d'ordre dans le désordre qui m'entourait.

## With Alfonso: establishing a new paradigm in polarization theory

### Avec Alfonso: la mise en place d'un nouveau paradigme de la théorie de la polarisation

---

Raffaele Resta

---

Among the contributors to this book, I am likely the one who has been friends with Alfonso for the longest span of time. We entered together the Scuola Normale Superiore di Pisa in November 1965, I as a freshman, he as a third-year student (coming from the University of Milan). In those times, the Scuola Normale—a residential state college—was a fairly small community (at most 200 students and faculty including both sciences and humanities), very tightly knit, I would say for the better and for the worse (privacy was inconceivable). We later graduated—two years apart—under the same supervisor,

Parmi les auteurs de ce livre, je suis probablement celui qui a été l'ami d'Alfonso le plus longtemps. Nous sommes entrés ensemble à la Scuola Normale Superiore de Pise en novembre 1965, moi en première année, lui en troisième année (venant de l'Université de Milan). À l'époque, la Normale – un collège d'état résidentiel – était une communauté assez petite (au plus 200 étudiants et professeurs en comprenant les sciences et les humanités), très soudée, je dirais pour le meilleur et pour le pire (l'intimité était inconcevable). Nous avons ensuite obtenu notre diplôme – à deux ans d'écart – sous le même directeur, Franco



Un moment de détente en 1981. Depuis la gauche : Alfonso Baldereschi, Raffaele Resta, Franco Meloni et Stefano Baroni.

Franco Bassani; it was a master's degree (four-year curriculum), as there was no doctorate in Italy until the 1980s. Despite these personal links, our professional interaction was rather weak, our actual thesis work did not have much in common. The real interaction, which changed my professional life for the better, started in 1979. We then coauthored more than 30 papers, the first in 1981 and the last in 1999. Even after that date, we continued to meet frequently and discuss physics in Trieste—where we were both faculty members—until our mandatory retirements and beyond.

In 1979 I was offered by Alfonso a position at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL)—a kind of senior postdoc—while in Pisa I had been tenured for a long time. The Italian system allowed for very long and frequent sabbatical periods, particularly for the junior faculty. I exploited the system quite a bit, and I spent a very long time at EPFL in the subsequent 30+ years. I arrived for the first time in Lausanne in September 1979; Roberto Car and José Luís Martins were already there; Cecilia Pennetta, Stefano Baroni (both freshly graduated), and Franco Meloni arrived about the same time as I; Michel Posternak arrived

Bassani; il s'agissait d'un master (cursus de quatre ans) – il n'y avait pas de doctorat en Italie avant les années 1980. Malgré ces liens personnels, notre interaction professionnelle était plutôt faible, nos travaux de thèse n'ayant pas grand-chose en commun. La véritable interaction, qui a changé ma vie professionnelle pour le mieux, a commencé en 1979; nous avons alors cosigné plus de 30 articles, le premier en 1981, le dernier en 1999. Même après cette date, nous avons continué à nous rencontrer fréquemment et à discuter de physique à Trieste, faculté à laquelle nous appartenions tous les deux, jusqu'à nos retraites obligatoires et au-delà.

En 1979, Alfonso m'a proposé un poste à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) – une sorte de postdoctorant senior – alors qu'à Pise, j'avais un poste permanent à l'université depuis longtemps. Le système italien permettait des périodes sabbatiques très longues et fréquentes, en particulier pour les jeunes professeurs. J'ai beaucoup profité de ce système et j'ai passé une très longue période à l'EPFL au cours des plus de 30 années qui ont suivi. Je suis arrivé pour la première fois à Lausanne en septembre 1979; Roberto Car et José Luís Martins étaient déjà là; Cecilia Pennetta, Stefano Baroni (tous deux fraîchement diplômés) et Franco Meloni sont arrivés à peu près en même temps que moi; Michel Posternak est arrivé peu après. Bien que dix ans se soient écoulés depuis l'obtention de mon diplôme, mon exposition à la physique de pointe avait été plutôt limitée, et mes énergies avaient été consacrées à d'autres activités, notamment le service militaire (18 mois), beaucoup d'enseignement à l'Université de Pise (des cours de calcul, pas de physique!) et beaucoup de voile (de manière semi-professionnelle jusqu'en 1976).

Grâce à Alfonso, je suis entré en contact avec la théorie de pointe de la structure électronique, et j'ai également appris à préparer et à présenter un exposé, à rédiger un article, à traiter avec des collègues, à organiser un événement... Entre autres choses, nous avons organisé ensemble le tout premier workshop sur l'énergie totale à Trieste et plusieurs autres par la suite. Alfonso était notoirement une personne très flegmatique et très méticuleuse: nous passions des heures à préparer une seule diapositive ou une seule figure afin de rendre



shortly afterwards. Although I had graduated ten years earlier, my exposure to state-of-the-art physics had been rather limited, and my energies had also been devoted to other activities, including military service (18 months), much teaching at the University of Pisa (calculus, not physics!) and much sailing (semiprofessionally until 1976).

Thanks to Alfonso, I came in contact with cutting-edge electronic-structure theory, and I also learned how to prepare and present a talk, how to write a paper, how to deal with colleagues, how to organize an event... Among other things we organized together the very first Total Energy workshop in Trieste and several of the subsequent ones. Alfonso was notoriously a very phlegmatic and very meticulous person: we would spend hours preparing a single slide or a single figure in order to make its message as clear as possible. In the earliest time of our collaboration there were no computer graphics, no word processor... Still, he cared much for the aesthetics of a presentation, an inherited style which lasts in my activity.

About 1979 is also the birth date of modern electronic-structure theory, mostly—but not only—of the computational kind. Volker Heine coined the name “total energy” in order to distinguish this new physics from the “old” kind of solid-state physics. At the time, this kind of physics was in fashion in very few places in the world and practiced by very few researchers. The Lausanne group became one of the world leaders. Shortly afterwards, the Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) was established in Trieste. Alfonso (together with Erio Tosatti) strongly advised me to transfer my tenured position from the University of Pisa to SISSA and I followed their advice. Moving to a non-existent institution was a very bold move. It proved to be a very felicitous one: as everybody knows, SISSA quickly became a cradle of modern electronic-structure theory, and I found myself in the right place at the right time.

Having said how much I owe to Alfonso, next I am going to give an example of our common scientific activity. I am choosing a part only—a small but outstanding part—of our work on electrical polarization. I am going to summarize two papers only: their

son message aussi clair que possible. Au tout début de notre collaboration, il n’y avait pas d’infographie, pas de traitement de texte... mais il se souciait beaucoup de l’esthétique d’une présentation, un style hérité qui perdure dans mon activité.

C’est également vers 1979 qu’est née la théorie moderne de la structure électronique, principalement – mais pas seulement – de type computationnel. Volker Heine a inventé le nom d’« énergie totale » pour distinguer cette nouvelle physique de l’« ancienne » physique de l’état solide. À l’époque, ce type de physique n’était en vogue que dans très peu d’endroits dans le monde et n’était pratiqué que par très peu de chercheurs ; le groupe de Lausanne est devenu l’un des leaders mondiaux. Peu après, la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) a été créée à Trieste ; Alfonso (avec Erio Tosatti) m’a fortement conseillé de transférer mon poste permanent de l’Université de Pise à la SISSA et j’ai suivi leur conseil. Déménager dans une institution inexistante était une décision très audacieuse. Elle s’est avérée très heureuse : comme tout le monde le sait, la SISSA est rapidement devenue un berceau de la structure électronique moderne et je me suis retrouvé au bon endroit au bon moment.

Après avoir dit tout ce que je dois à Alfonso, je vais maintenant donner un exemple de notre activité scientifique commune. Je n’évoquerai qu’une partie – petite mais remarquable – de notre travail sur la polarisation électrique. Je vais résumer deux articles seulement : leurs résultats – et le processus qui y a conduit – marquent la période la plus passionnante de ma vie professionnelle.

Alors que la polarisation induite était bien comprise et calculable à partir des premiers principes, la polarisation « elle-même » – comme la polarisation spontanée dans les pyroélectriques et les ferroélectriques – restait insaisissable. La polarisation  $P$  est une propriété matérielle intensive, définie intuitivement comme le dipôle par unité de volume. Pour une cristallite *délimitée*, le dipôle est une simple fonction de la densité de charge ; il semble donc naturel de supposer que même dans un solide,  $P$  est une fonction de la densité de charge périodique. Aujourd’hui encore, de nombreux manuels donnent

results—and the process leading to them—mark the most exciting time of my professional life.

While induced polarization was well understood and computable from first principles, polarization “itself”—like spontaneous polarization in pyroelectrics and ferroelectrics—remained elusive. Polarization  $\mathbf{P}$  is an intensive material property, intuitively defined as the dipole per unit volume. For a *bounded* crystallite, the dipole is a simple function of the charge density; it seems therefore natural to assume that even in a solid  $\mathbf{P}$  is a function of the periodic charge density. Even today, many textbooks provide definitions of  $\mathbf{P}$  based on the periodic charge density of the polarized material: such definitions are strongly flawed and non-computable. The solution emerged step by step—or better, computation by computation—culminating in the 1990s with the theory of polarization, called “modern” at the time.

In the late 1980s, Alfonso and I dedicated most of our work to the physics of heterostructures and we gained much expertise in extracting the significant information from supercell calculations, in particular, creating our trademark computational tool: the “macroscopic average”. Such expertise was then exploited to tackle the long-standing problem of polarization: in 1990 we produced the first calculation ever of spontaneous  $\mathbf{P}$ . In discovering what had to be actually computed, we arrived at a *change of paradigm*, and we understood what  $\mathbf{P}$  really is: a very different quantity from what is defined in textbooks.

Our case study was BeO, having the simplest structure where inversion symmetry is absent: wurtzite. The idea was to address the macroscopic polarization of a slab of finite thickness, embedding it in an *ad hoc* medium which (i) has no bulk polarization for symmetry reasons, and (ii) does not produce any geometrical or chemical perturbation at the interface.

The optimal choice was a fictitious BeO crystal in the zincblende structure. The system was periodically replicated in a supercell geometry. The first-principles calculation showed well localized interface charges, of opposite sign and equal magnitudes at the two non-equivalent interfaces. The interface

des définitions de  $\mathbf{P}$  basées sur la densité de charge périodique du matériau polarisé : ces définitions sont très imparfaites et impossibles à calculer. La solution est apparue pas à pas – ou mieux, calcul par calcul – et a abouti dans les années 1990 à la théorie de la polarisation, qualifiée de « moderne » à l’époque.

À la fin des années 1980, Alfonso et moi avons consacré l’essentiel de nos travaux à la physique des hétérostructures et nous avons acquis une grande expertise dans l’extraction d’informations significatives à partir de calculs de supercellules, en créant notamment notre outil de calcul distinctif : la « moyenne macroscopique ». Cette expertise a ensuite été exploitée pour s’attaquer au problème de longue date de la polarisation : en 1990, nous avons réalisé le premier calcul de  $\mathbf{P}$  spontanée. En découvrant ce qu’il fallait réellement calculer, nous avons abouti à un *changement de paradigme* et nous avons compris ce qu’était réellement  $\mathbf{P}$  : une quantité très différente de celle définie dans les manuels.

Notre étude de cas était l’oxyde de béryllium (BeO), qui possède la structure la plus simple où la symétrie d’inversion est absente : la wurtzite. L’idée était d’étudier la polarisation macroscopique d’une plaque d’épaisseur finie, en l’intégrant dans un milieu *ad hoc* qui (i) n’a pas de polarisation globale pour des raisons de symétrie, et (ii) ne produit aucune perturbation géométrique ou chimique à l’interface.

Le choix optimal a été un BeO fictif dans la structure zinc-blende ; le système a été répliqué périodiquement dans une géométrie de supercellule. Le calcul *ab initio* a montré des charges d’interface bien localisées, de signe opposé et de magnitude égale aux deux interfaces non équivalentes. La densité de charge de l’interface est liée à la différence de polarisation entre les deux matériaux :  $\sigma_{\text{interface}} = \Delta \mathbf{P} \cdot \mathbf{n}$ . Nous avons évalué la valeur de  $\sigma_{\text{interface}}$  et comme nous avons postulé que  $\mathbf{P}$  disparaît par symétrie dans la lame de zinc-blende, nous avons obtenu la valeur globale de  $\mathbf{P}$  dans le matériau wurtzite. Comme toujours dans une expérience numérique pionnière, aucun résultat n’est acquis : plusieurs tentatives sont nécessaires. La contribution d’Alfonso a été fondamentale pour concevoir la bonne stratégie, extraire les informations les plus pertinentes à partir de la

charge density is related to the difference in polarization between the two materials:  $\sigma_{\text{interface}} = \Delta \mathbf{P} \cdot \mathbf{n}$ . We evaluated the value of  $\sigma_{\text{interface}}$ , and since we postulated that  $\mathbf{P}$  vanishes by symmetry in the zincblende slab, we obtained the bulk value of  $\mathbf{P}$  in the wurtzite material. As usual in a pioneering computer experiment, no result comes for granted: varied attempts are needed. Alfonso's contribution was fundamental in devising the right strategy, in extracting the most relevant information from the computer output, and (obviously!) in presenting the results.

It must be emphasized that the quantity really "measured" in this computer experiment is  $\Delta \mathbf{P}$ , not  $\mathbf{P}$  itself. We then browsed the experimental literature, looking for a confirmation of our result, and realized that no experimental value of  $\mathbf{P}$  in any wurtzite material existed: only estimates were available. Our work marks, as said above, a change of paradigm:  $\mathbf{P}$  had to be *defined* by means of *differences*, and the concept of  $\mathbf{P}$  "itself" was to be abandoned. The alert reader will realize that the concept of  $\mathbf{P}$  "itself" has indeed been revived after 1993, but this required yet another change of paradigm (not discussed here).

Owing to this milestone work, Alfonso, Michel Posternak, and I were awarded the 1990 Seymour Cray prize—which came with a conspicuous amount of money. The award was announced in *Flash* (the EPFL's internal journal) on February 12, 1991. Therein we provided a description of our work aimed at the general public, where the change of paradigm was emphasized. We stated verbatim: *Seules les variations de  $\mathbf{P}$  sont détectables expérimentalement [...] L'idée fondamentale du présent travail est, pour obtenir la valeur de  $\mathbf{P}$ , de faire également usage du concept de différence dans l'approche théorique [...]*.

As said above, no experimental value of  $\mathbf{P}$  was available in BeO and, more generally, in the class of pyroelectric materials (for good reasons, we discovered). Instead, accurate measurements existed since the 1950s in the class of ferroelectric perovskite oxides, where  $\mathbf{P}$  is by definition switchable. Performing a calculation in a material of this kind by adopting the same logic as in BeO was at the time computationally prohibitive, and in the early 1990s we were struggling to evaluate  $\Delta \mathbf{P}$  by devising a different strategy.

sortie de l'ordinateur et (évidemment!) présenter les résultats.

Il faut souligner que la quantité réellement « mesurée » dans cette expérience informatique est  $\Delta \mathbf{P}$ , et non  $\mathbf{P}$  elle-même. Nous avons ensuite parcouru la littérature expérimentale, dans le but de confirmer notre résultat, et nous avons ainsi réalisé qu'il n'existait aucune valeur expérimentale de  $\mathbf{P}$  pour un matériau wurtzite : seules des estimations étaient disponibles. Notre travail marque, comme nous l'avons dit plus haut, un changement de paradigme :  $\mathbf{P}$  devait être *défini* au moyen de *différences*, et le concept de  $\mathbf{P}$  « elle-même » devait être abandonné. Le lecteur attentif se rendra compte que le concept de  $\mathbf{P}$  « elle-même » a effectivement été relancé après 1993, mais cela a nécessité un autre changement de paradigme (qui n'est pas abordé ici).

Grâce à ce travail marquant, Alfonso, Michel Posternak et moi-même avons reçu le prix Seymour Cray 1990, assorti d'une somme d'argent considérable. Le prix a été annoncé sur *Flash* (le journal interne de l'EPFL) le 12 février 1991. Nous y avons fourni une description de nos travaux destinée au grand public, où le changement de paradigme était mis en évidence. Nous disons textuellement : *Seules les variations de  $\mathbf{P}$  sont détectables expérimentalement [...] L'idée fondamentale du présent travail est, pour obtenir la valeur de  $\mathbf{P}$ , de faire également usage du concept de différence dans l'approche théorique [...]*.

Comme indiqué ci-dessus, aucune valeur expérimentale de  $\mathbf{P}$  n'était disponible pour le BeO et, plus généralement, pour la classe des matériaux pyroélectriques (pour de bonnes raisons, comme nous l'avons découvert). En revanche, des mesures précises existent depuis les années 1950 dans la classe des oxydes ferroélectriques pérovskites, où  $\mathbf{P}$  est par définition commutable. Effectuer un calcul dans un matériau de ce type en adoptant la même logique que pour le BeO était à l'époque prohibitif sur le plan numérique et, au début des années 1990, nous nous sommes efforcés d'évaluer  $\Delta \mathbf{P}$  en élaborant une stratégie différente. En mai 1992, j'ai assisté au Workshop on Recent Developments in Electronic Structure, à Raleigh, en Caroline du Nord, où Dominic King-Smith

In May 1992, I attended the annual Workshop on Recent Developments in Electronic Structure, in Raleigh, NC, where Dominic King-Smith and David Vanderbilt were presenting the ultimate solution of the polarization problem in a poster: their—by now famous—Berry-phase theory of polarization.

In the following months, I frequently commuted between Trieste and Lausanne, and I also spent part of the summer in Lausanne. That was once more a wonderful collaboration with Alfonso and Michel Posternak. We first implemented the new theory by benchmarking our previous BeO result. Then we chose the perovskite oxide  $\text{KNbO}_3$  as the main case study. Several steps were highly nontrivial and required significant computational skill and debugging: computing the electronic Berry phase, adding the nuclear contribution, removing the  $2\pi$  ambiguity intrinsic in any phase, and—last but not least—converting the result from our units into Coulomb per square meter. In this trial-and-error path, Alfonso's perfectionism was fundamental; all results (and all hypotheses about them) were double- and triple-checked. I remember those days as very exciting; Eventually, our final value matched the best experimental one to 6%. A profound understanding of the essence of the phenomenon came together with the numerical result. Even here, Alfonso's insight proved to be fundamental. The manuscript was submitted on October 21, 1992, with the title "Towards a Quantum Theory of Polarization in Ferroelectrics: The Case of  $\text{KNbO}_3$ ", which owes to Alfonso's inclination to understatement. My title would instead have been "Quantum Theory...", eliminating "Towards."

et David Vanderbilt présentaient sur un poster la solution ultime au problème de la polarisation : leur théorie de la polarisation, désormais célèbre, dite de la phase de Berry.

Au cours des mois suivants, j'ai souvent fait la navette entre Trieste et Lausanne, et j'ai également passé une partie de l'été à Lausanne. Ce fut une fois de plus une merveilleuse collaboration avec Alfonso et Michel Posternak. Nous avons d'abord mis en œuvre la nouvelle théorie en comparant nos résultats précédents pour le BeO, puis nous avons choisi l'oxyde pérovskite  $\text{KNbO}_3$  comme principale étude de cas. Plusieurs étapes étaient fortement non triviales et ont nécessité beaucoup de compétences en calcul et de débogage : le calcul de la phase électronique de Berry, l'ajout de la contribution nucléaire, la suppression de l'ambiguïté de  $2\pi$  intrinsèque à toute phase et, enfin et surtout, la conversion du résultat de nos unités en Coulomb par mètre carré. Dans ce parcours d'essais et d'erreurs, le perfectionnisme d'Alfonso a été fondamental ; tous les résultats (et toutes les hypothèses les concernant) ont été vérifiés deux et trois fois. Je me souviens de cette époque comme étant palpitante ; finalement, notre valeur finale correspondait à la meilleure valeur expérimentale à 6 % près. Une compréhension profonde de l'essence du phénomène est apparue en même temps que le résultat numérique ; même ici, l'intuition d'Alfonso s'est avérée fondamentale. Le manuscrit a été soumis le 21 octobre 1992 sous le titre « Towards a Quantum Theory of Polarization in Ferroelectrics: The Case of  $\text{KNbO}_3$  » (Vers une théorie quantique de la polarisation dans les ferroélectriques : le cas du  $\text{KNbO}_3$ ), ce qui s'explique par la tendance d'Alfonso à la réserve. Mon titre aurait plutôt été « Une théorie quantique... », en éliminant « Vers ».





## Concours Seymour Cray

### Lauréats 1990

Michel Posternak, Raffaele Resta et le professeur EPFL Alfonso Baldereschi, ex aequo avec une équipe de l'EPFZ, ont reçu le vendredi 1er février dernier le deuxième prix du Concours Seymour Cray Suisse 1990 pour l'expérience (réalisée dans le cadre de l'IRRMA) qu'ils présentent ici. Le premier prix a récompensé M. Bichsel et P. Seitz pour leur travail "Concierge électronique" portant sur la reconnaissance de personnes. Si la participation à ce concours s'est limitée à dix travaux, "le jury a été très heureux de constater une très bonne qualité moyenne", a précisé son président, le professeur Maurice Cosandey.

## Les hommes d'IRRMA



De gauche à droite: Alfonso Baldereschi, Michel Posternak et Raffaele Resta. (Photo Alain Herzog)

## Détermination de la polarisation spontanée de la matière au moyen d'une expérience numérique: cas de l'Oxyde de Béryllium Pyroélectrique

Lors de ses trois premières années d'activité, l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), dont les locaux se trouvent sur le site de l'EPFL, a mené à bien de nombreux travaux ayant abouti à plus de soixante-dix publications. Les domaines d'activité de l'Institut sont actuellement les suivants:

1. Propriétés des nouvelles structures semiconductrices, telles que les superréseaux et les puits quantiques.
2. Propriétés des supraconducteurs à haute température critique et des systèmes magnétiques.
3. Géométrie et propriétés électroniques des agrégats atomiques.
4. Propriétés des systèmes désordonnés et des alliages, et leurs diagrammes de phase.
5. Propriétés des systèmes dominés par une forte corrélation électronique, tels que les composés du Cérium.
6. Méthodes de simulation quantique en physique de la matière condensée, telles que la dynamique moléculaire et la méthode Monte Carlo quantique.

Le travail qui a été présenté par les soussignés lors de l'édition 1990 du Concours Seymour Cray, et qui a été retenu par le jury, appartient au premier domaine de recherche mentionné ci-dessus et consiste essentiellement en une expérience numérique visant à déterminer la polarisation spontanée de la matière en utilisant le concept de superréseau.

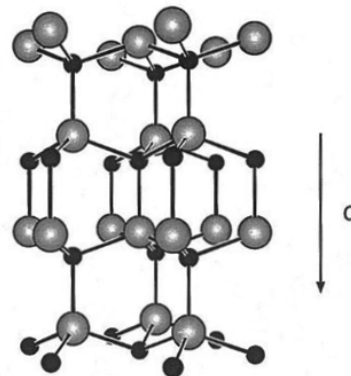
Les cristaux qui présentent une polarisation macroscopique spontanée constituent une classe particulièrement intéressante de matériaux. Leur polarisation électrique peut être modifiée en changeant la température, comme c'est le cas pour les pyroélectriques, ou en appliquant un champ électrique extérieur, comme dans les ferroélectriques, où même la direction de la polarisation peut être modifiée. Ces phénomènes sont largement utilisés pour la réalisation de détecteurs à infra-rouges et de mémoires ferroélectriques. Du point de vue fondamental, l'interprétation de la polarisation spontanée de la matière, ainsi que sa détermination, sont des problèmes délicats, connus de très longue date. En physique classique, la polarisation macroscopique est reliée en général aux moments dipolaires localisés sur les atomes ou molécules qui constituent le système. Ces dipôles sont des ingrédients essentiels de tous les modèles classiques, mais n'ont pas encore été définis de manière rigoureuse. Avant notre contribution, il n'existait aucune étude satisfaisante, basée sur la mécanique quantique de la polarisation spontanée des cristaux.

Du point de vue phénoménologique, la polarisation spontanée  $P$  n'est pas une grandeur mesurable en tant que propriété intrinsèque de l'état d'équilibre. Seules les variations de  $P$  sont détectables expérimentalement, au moyen par exemple de mesures de pyroélectricité, de piézoélectricité ou de ferroélectricité. L'idée fondamentale du présent travail est, pour obtenir la valeur de  $P$ , de faire également usage du concept de différence dans l'approche théorique: nous avons élaboré une "expé-

rience numérique" où seule la différence  $\Delta P$  entre deux phases du même matériau est la quantité réellement "mesurée" sur l'ordinateur.

Le système le plus simple pour lequel la polarisation macroscopique est permise par les lois de symétrie est l'oxyde de béryllium  $BeO$ . Ce matériau a en effet la structure hexagonale de la wurtzite (coordination tétraédrique), et ses constituants sont des éléments de la première ligne du tableau périodique. Le cristal possède un axe privilégié, qui est la direction de la polarisation spontanée. La Figure 1 montre une vue en perspective de cette structure. Pour notre "expérience numérique", nous

Fig. 1 - Cristal de  $BeO$  dans la structure hexagonale de la wurtzite.





## Concours Seymour Cray

### Thèmes 1991

Pour le Concours Seymour Cray Suisse 1991, les thèmes suivants sont proposés:

- Neuroinformatique
- Modèles numériques de la matière
- Automatisation de processus industriels (CAO/PAO)
- Infographie
- Application des architectures parallèles et réparties.

1<sup>er</sup> prix: 40 000 francs; 2<sup>e</sup> prix: 20 000 francs; 3<sup>e</sup> prix: 10 000 francs. La date limite de remise des dossiers est le **30 juin 1991**. Vous pouvez obtenir le règlement du concours et la composition du jury en écrivant à l'adresse suivante:

Cray Research (Suisse) SA  
Concours Seymour Cray 1991  
rte de Pré-Bois 20  
C.P. 534  
1215 Genève 15 - Aéroport

considérons le  $BeO$  à la fois dans la structure observée de la wurtzite, et dans une structure *hypothétique* cubique (aussi à coordination tétraédrique), dite de la blende de zinc. L'emploi de deux différentes phases est en complète analogie avec la situation présente lors d'une mesure réelle dans un ferroélectrique. Il est important de noter à ce propos que  $BeO$  n'existe dans la nature que sous la forme hexagonale, et que la phase cubique considérée ici est donc une vue de l'esprit, mais qui peut être matérialisée sur ordinateur.

L'expérience numérique consiste:

- 1) à simuler sur ordinateur un superréseau hypothétique formé d'une succession de couches de  $BeO$  dans les structures hexagonale et cubique en alternance,
- 2) à "mesurer" les paramètres physiques de ce système.

Le superréseau correspond à la situation où deux "domaines", différents du point de vue structural, coexistent dans le matériau. Une coupe de la structure cristallographique finale est montrée au haut de la Figure 2, où les abscisses sont parallèles à l'axe de la couche hexagonale; les interfaces entre les deux phases sont indiquées par des lignes brisées. En fait, le système utilisé pour cette expérience numérique est une réplique périodique, selon l'axe hexagonal, de la structure montrée sur la Figure 2. La "mesure" de la différence des polarisations macroscopiques entre les deux phases est la solution de notre problème, car la polarisation de la phase cubique s'annule identiquement pour des raisons de symétrie, et la valeur calculée de  $\Delta P$  coïncide donc avec la polarisation spontanée cherchée du  $BeO$  dans la structure hexagonale de la wurtzite. La différence de polarisations est obtenue au moyen d'un calcul sophistiqué que nous ne

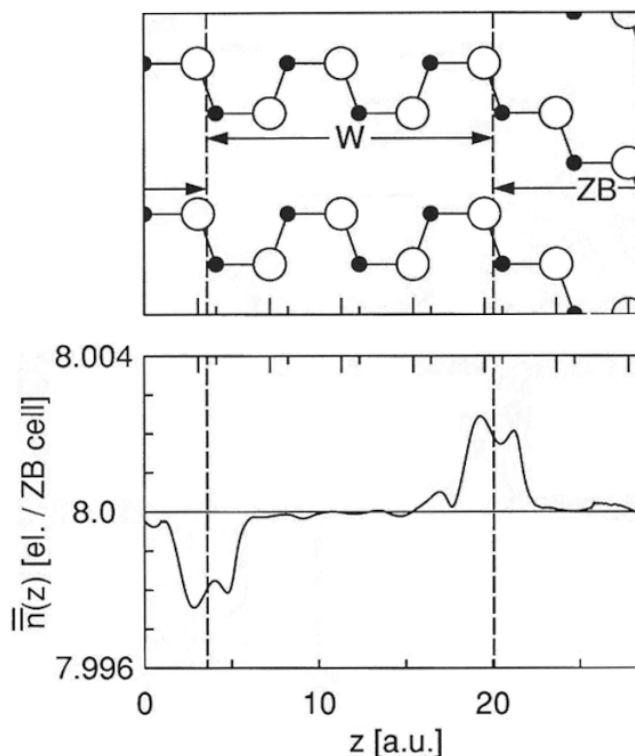


Fig. 2 - Haut: diagramme représentant une coupe de la cellule élémentaire du superréseau utilisé dans "notre expérience numérique". Les interfaces entre le  $BeO$  dans la phase hexagonale de la wurtzite (W) et dans la phase cubique hypothétique de la blende de zinc (ZB) sont indiquées par des lignes brisées. Bas: distribution macroscopique de la charge électronique le long de l'axe hexagonal du superréseau.

décrivons pas ici. Ce calcul donne en effet directement la distribution de charge électronique du système, ainsi que sa moyenne macroscopique le long de l'axe du superréseau. Cette dernière grandeur est représentée par la courbe continue au bas de la Figure 2, où l'on peut constater que la différence des polarisations macroscopiques dans les deux sous-systèmes se manifeste par un empilement de charge aux deux interfaces entre les "domaines" hexagonaux et cubiques. Cette charge  $\delta$  est directement reliée à la polarisation par l'équation de l'électrostatique macroscopique  $\nabla \cdot P = -\delta$ . La "mesure" sur ordinateur de la polarisation spontanée de l'oxyde de béryllium donne la valeur  $P = 4.5 \times 10^{-2} C/m^2$ . Il n'existe pas de mesure expérimentale di-

recte de cette quantité, mais à partir d'expériences d'optique non linéaire, et en utilisant des modèles empiriques, il est possible de déduire indirectement la valeur approchée  $P = 5.0 \pm 1.5 \times 10^{-2} C/m^2$ .

Notre étude montre donc que le terme électronique de la polarisation macroscopique spontanée des solides peut être obtenu rigoureusement au moyen d'une "expérience numérique" appropriée, et nous espérons que ce travail ouvrira la voie à des calculs microscopiques généraux de la pyroélectricité et de la ferroélectricité.

Alfonso BALDERESCHI  
Michel POSTERNAK  
Raffaele RESTA

# La genèse de 45 ans de collaboration scientifique et d'amitié

Michel Posternak

Quarante-cinq ans d'une collaboration scientifique fructueuse, doublée d'une amitié sincère, ont hélas pris fin ce 22 avril 2024. Mais tout dénouement, aussi inéluctable et triste qu'il soit, a toujours comme contrepartie un préambule, qui en l'occurrence fut ici particulièrement prometteur. C'est de ma rencontre avec Alfonso que je désire vous entretenir dans les lignes qui suivent.

En automne 1979, je revenais d'un séjour de quelques années passé aux États-Unis à la Northwestern University (Evanston, Illinois), et je venais d'être nommé à un poste du Fonds national au Laboratoire de physique appliquée de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), sis alors à l'Avenue Louis Ruchonnet à Lausanne. Ce Laboratoire, qui est devenu ensuite un Institut lors du déménagement de Ruchonnet à Ecublens, au début des années 1980, avait à sa tête son directeur fondateur, le Prof. Emmanuel Mooser. Le laboratoire était organisé en groupes de recherche, dont un groupe de théorie dirigé par le Professeur Roland Fivaz, un groupe de génie médical (dont l'acteur principal était Christian Depeursinge), et un groupe des semi-conducteurs (Prof. Emmanuel Mooser, secondé par Francis Lévy). Alfonso avait sa place dans le groupe de théorie en tant que spécialiste de la théorie du solide. L'activité centrale des chercheurs de ce groupe était la physique des semi-conducteurs, avec comme principal outil numérique la méthode des pseudopotentiels. Ma première préoccupation fut donc de m'intégrer à ce groupe, ce qui n'était pas évident compte tenu de mes compétences limitées en matière de semi-conducteurs. J'avais en effet passé mes années à Evanston à étudier les surfaces de métaux simples et de transition, en utilisant le code *all electron*, autocohérent, basé sur la méthode Full-Potential Linearized Augmented

Plane-Wave (FLAPW), que nous avions développé à la Northwestern University. Notre code était le premier de ce type à être en mesure de calculer les états électroniques des matériaux en couche et des surfaces. Avec tous ces préalables à l'esprit, il me fallait donc maintenant trouver un point d'accrochage avec le groupe de recherche de Lausanne.

Je décidais de rendre visite au Prof. Hans Beck de l'Université de Neuchâtel, que je connaissais de longue date, afin de lui demander conseil. Hans Beck collaborait avec le Professeur Hans-Joachim Güntherodt, de l'Université de Bâle, qui travaillait entre autres sur les composés intercalés du graphite. La structure en couches de ces composés rendait une approche au moyen de mon code FLAPW particulièrement intéressante. L'idée de me lancer dans des calculs pour ce type de systèmes me plut immédiatement. Bien entendu, compte tenu des moyens informatiques limités de l'époque (par exemple, 300 ko de mémoire disponible sur le CDC Cyber de l'EPFL en 1980), il n'était pas question d'aborder les systèmes aussi complexes que ceux qu'étudiait expérimentalement le groupe Güntherodt, avec pour intercalants des molécules de grande taille.

Je décidai alors d'aborder le plus simple de ces composés intercalés, à savoir  $\text{LiC}_6$  pour lequel quelques travaux expérimentaux et théoriques étaient disponibles. Compte tenu des capacités de mon code FLAPW, conçu pour aborder des systèmes en couches ou des surfaces, j'avais considéré en premier lieu les trois modèles théoriques suivants : une monocouche de graphite  $\text{C}_6$ , une double couche  $\text{C}_6\text{-C}_6$ , présentant le même arrangement d'atomes de carbone que dans le composé solide  $\text{LiC}_6$ , et enfin une couche de lithium en sandwich entre les deux couches de

graphite ci-dessus,  $C_6$ -Li- $C_6$ . Les études théoriques de l'époque, basées essentiellement sur des calculs Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO) avec un ensemble minimal de fonctions de base (en général les orbitales 2s et 2p du carbone), conduisaient à la description suivante des structures de bande de valence : (i) pour le graphite, la séquence de bandes était  $\sigma$  et  $\pi$  liants,  $\pi$  et  $\sigma$  antiliants, avec le niveau de Fermi séparant les deux sortes de bandes  $\pi$  ; (ii) dans le cas de  $LiC_6$ , une bande parabolique additionnelle, la soi-disant « bande du Li », était présente un peu au-dessus du niveau de Fermi.

Mon premier calcul, concernant la monocouche de graphite, avait essentiellement pour but de confronter les résultats de ma nouvelle approche *all electron* avec ceux de la littérature, basés sur des méthodes moins élaborées. Or quelle ne fut pas ma surprise en constatant qu'en plus des bandes mentionnées ci-dessus, deux bandes paraboliques résultaient aussi de mes calculs, juste en dessous du zéro du vide, et proches du centre de la zone de Brillouin, et qui étaient totalement absentes de l'image conventionnelle des bandes du graphite. Après avoir effectué de nombreux tests pour m'assurer qu'il ne s'agissait pas d'un artefact, je me rendis à l'évidence qu'il s'agissait de quelque chose de nouveau, et je pensai immédiatement à en discuter avec Alfonso. C'était une occasion rêvée pour une entrée en matière scientifique. Sa réaction fut enthousiaste, et une passionnante discussion débuta, qui se termina fort tard dans la soirée, préambule à bien d'autres de la même sorte par la suite. Inutile de dire qu'à partir de ce moment, le tutoiement fut de rigueur ! Les semaines et mois qui suivirent mirent à forte contribution les faibles moyens informatiques dont nous disposions, mais permirent d'affiner notre compréhension de ces « nouvelles » bandes. Nous avons ainsi trouvé que ces deux bandes correspondaient à des états de surface de la monocouche, celui avec l'énergie la plus basse étant symétrique par rapport au plan de la couche. Passant à la double couche  $C_6$ - $C_6$  nous avons retrouvé ces deux états additionnels, juste en dessous du zéro du vide. Ces deux premiers états, symétriques et antisymétriques, étaient respectivement les combinaisons liantes et antiliantes des états symétriques des deux monocouches composant le système  $C_6$ - $C_6$ . L'état symétrique, avec l'énergie la

plus basse, était un état intercouche, qui n'est pas localisé sur les atomes de carbone, mais présente un caractère « électron libre » dans les plans parallèles aux couches. Nous avons pu montrer que cette description restait valable si l'on augmente le nombre de couches de carbone.

Passant enfin au système  $C_6$ -Li- $C_6$ , nous avons trouvé que ses niveaux d'énergie sont très semblables à ceux du système  $C_6$ - $C_6$ . Les deux bandes au-dessus du niveau de Fermi sont toujours présentes. L'énergie de l'état symétrique, le plus bas, est compatible avec le bas de la « bande lithium » du solide  $LiC_6$ , décrite dans la littérature. Nous avons ainsi pu montrer que cette soi-disant « bande du lithium » tire son origine des états intercouches liants, qui préexistent dans le graphite, et qui sont orthogonalisés aux états de cœur Li 1s. Finalement, nous avons démontré que les états de valence Li 2s donnent eux naissance à des états résonnants à bien plus haute énergie. Avec ces résultats [1,2], nous avons ainsi apporté une compréhension nouvelle à l'origine d'une bande attribuée précédemment, et de manière incorrecte, aux électrons 2s du lithium. L'acceptation de ces deux articles pour publication dans Physical Review Letters a été une épreuve de très longue haleine, comme je n'en ai connu que peu dans la suite de ma carrière. À l'évidence, le groupe responsable de l'interprétation erronée de la structure électronique du  $LiC_6$  voulait à tout prix empêcher la publication de nos résultats dans le journal prestigieux qu'était alors Physical Review Letters. De notre côté, cette dispute n'a eu pour effet que de renforcer notre envie de collaborer par la suite, et de stimuler notre amitié. Toute cette affaire fut donc le déclic à l'origine de 45 ans de recherche en commun, sur bon nombre de sujets, dont je cite très brièvement ci-dessous les principaux :

- les états intercouches dans divers matériaux ;
- la polarisation spontanée du BeO (qui nous valut, avec Raffaele Resta, le deuxième prix du Concours Seymour Cray Suisse 1990) ;
- la théorie de la polarisation dans les ferro-électriques ;
- le mécanisme de la polarisation dans les perovskites ;
- l'étude de monoxydes de métaux de transition antiferromagnétiques ;

- les fonctions de Wannier du MnO antiferromagnétique (avec Nicola Marzari) ;
- les fonctions de Wannier et les charges de Born du TiO<sub>2</sub> brookite ;
- la dissociation de l'eau sur des nanoparticules de TiO<sub>2</sub> anatase ;
- l'hydrophilicité des surfaces de TiO<sub>2</sub> anatase en présence d'atomes de Ca et de phosphates.

Ma dernière rencontre avec Alfonso a eu lieu le 22 février 2024. Comme à l'accoutumée, après avoir discuté de questions scientifiques qui nous intéressaient, nous avons abordé des sujets plus personnels. Alfonso appréciait mon engagement sur le plan politique vaudois, sujet que nous avons déjà souvent

évoqué dans le passé. Mais ce soir, c'est de la politique italienne que nous avons parlé, et Alfonso était si intarissable sur ce sujet que nous avons décidé de continuer cette discussion lors de notre prochaine entrevue, prévue en avril.

Hélas, le destin en a voulu autrement.

- [1] M. Posternak, A. Baldereschi, A. J. Freeman, E. Wimmer, M. Weinert, Prediction of electronic interlayer states in graphite and reinterpretation of alkali bands in graphite intercalation compounds, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 761 (1983).
- [2] M. Posternak, A. Baldereschi, A. J. Freeman, E. Wimmer, Prediction of electronic surface states in layered materials: graphite, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 863 (1984).

## Birth and ephemeral life of pseudopotential alchemy

## Naissance et vie éphémère de l'alchimie des pseudopotentiels

---

**Stefano Baroni**

---

The theory of band offsets at semiconductor interfaces has been one of Alfonso Baldereschi's most cherished topics, to which he made significant contributions—both directly and by enticing peers and disciples, including myself, to delve deeply into it. In this tribute, I recount how a brilliant idea of his for modeling band offsets in a class of semiconductor heterojunctions led to one of our most cited articles [1] and brought about the birth of “pseudopotential alchemy,” a model to both compute and understand

La théorie des décalages de bande aux interfaces des semi-conducteurs a été l'un des sujets les plus chers à Alfonso Baldereschi, auquel il a apporté des contributions significatives – tant directement qu'en incitant ses pairs et disciples, y compris moi-même, à s'y plonger profondément. Dans cet hommage, je raconte comment une idée brillante de sa part pour modéliser les décalages de bande dans une classe d'hétérojonctions semi-conductrices a conduit à l'un de nos articles les plus cités [1] et a donné

the electronic and structural properties of composite semiconductors, such as heterojunctions and alloys, by treating them as small perturbations with respect to a “virtual crystal”—a system in which different chemical elements occupying crystallographically equivalent lattice sites are represented by an average pseudopotential.

The rapid diffusion of the Molecular Beam Epitaxy (MBE) technology in the 1980s was pivotal in enabling the widespread fabrication of semiconductor heterostructures, thus paving the way to the emergence of nanosciences in the 2000s. This development sparked the interest of solid-state theorists, with the young Alfonso Baldereschi standing out as a towering figure, who sought to understand, predict, and eventually engineer their electronic properties. Alfonso was not just any theorist. To mark the difference between abstract theory and the field of which he was an internationally renowned leader, he liked to define the latter as the “theory of physical phenomena.” And physical phenomena are to be *observed* either before being understood or after being predicted. In both cases, observation needs increasingly sophisticated apparatuses, which drove Alfonso’s instrumental role in the acquisition of Italy’s first MBE machinery for the TASC (Tecnologie Avanzate e Nanoscienza) national laboratory in Trieste—where he had secured a chair at the University in 1981 and continued his influential work until his retirement in 2016, after having held a similar position in Lausanne until 2011.

Following Alfonso’s path, in 1984 I relocated to Trieste from Lausanne, where my long and profoundly shaping acquaintance with him had begun in 1979. The late 1980s were creatively significant for me, marked by the development of density-functional perturbation theory (DFPT)—a result of the strong and extremely fruitful collaboration between Trieste and Lausanne in those years—and my deep involvement in semiconductor physics, into which Alfonso prodded me, starting with our 1988 joint work on band offsets [1].

In the mid-1980s, a much-debated issue was whether band offsets at semiconductor heterojunctions are intrinsic bulk properties of the constituent

naissance à l’« alchimie des pseudopotentiels », un modèle qui permet à la fois de calculer et de comprendre les propriétés électroniques et structurales des semi-conducteurs composites, tels que les hétérojonctions et les alliages, en les traitant comme de petites perturbations par rapport à un « cristal virtuel » – un système dans lequel différents éléments chimiques occupant des sites de réseau cristallographiquement équivalents sont représentés par un pseudopotentiel moyen.

La diffusion rapide de la technologie *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) dans les années 1980 a été essentielle pour permettre la fabrication à grande échelle d’hétérostructures semi-conductrices, ouvrant ainsi la voie à l’émergence des nanosciences dans les années 2000. Ce développement a éveillé un vif intérêt parmi les théoriciens de l’état solide, parmi lesquels le jeune Alfonso Baldereschi se distinguait comme une figure éminente, cherchant à comprendre, à prédire et finalement à moduler leurs propriétés électroniques. Alfonso n’était pas un théoricien comme les autres. Pour marquer la différence entre la théorie abstraite et le domaine dans lequel il était un leader internationalement reconnu, il aimait définir ce dernier comme la « théorie des phénomènes physiques ». Et les phénomènes physiques doivent être observés soit avant d’être compris, soit après avoir été prédits. Dans les deux cas, l’observation nécessite des appareils de plus en plus sophistiqués, ce qui a conduit Alfonso à jouer un rôle déterminant dans l’acquisition de la première machine MBE d’Italie pour le laboratoire national TASC (Tecnologie Avanzate e Nanoscienza) à Trieste – où il avait obtenu une chaire à l’université en 1981 et a poursuivi son travail influent jusqu’à sa retraite en 2016, après avoir occupé un poste similaire à Lausanne jusqu’en 2011.

En suivant le chemin d’Alfonso, en 1984, j’ai déménagé à Trieste depuis Lausanne, où ma longue et profonde relation avec lui avait commencé en 1979. La fin des années 1980 a été particulièrement féconde pour moi, marquée par le développement de la théorie de perturbation de la fonctionnelle de densité (DFPT) – résultat de la forte et extrêmement fructueuse collaboration entre Trieste et Lausanne durant ces années – et par mon implication profonde dans la



materials, or whether they critically depend on the orientation and morphology of the interface. As of 1987, the prevailing view was mixed: while general theoretical considerations based on the long-range nature of the Coulomb interaction suggested that electrostatic potential lineups—and therefore band offsets—at semiconductor interfaces may indeed depend on the interface structure, experimental evidence, first-principles calculations on the paradigmatic GaAs/AlAs system, and theoretical models applicable across different chemical compositions seemed to suggest the opposite. The situation was intriguing: theory clearly showed that band offsets could depend on the complex nature of the interfacial structure, which in turn depends on the details of the fabrication process—why shouldn't it?—, yet experiment and computation seemed to indicate the opposite, at least in the case of GaAs/AlAs, which was the most studied example.

*"The purpose of computation is insight, not numbers" [2]: if current calculations do not explain what appears to be a fortuitous coincidence, it is because the logical consequences that could be drawn from them have not yet been thoroughly worked out. Armed with this belief, Alfonso was determined to dig deep into the problem and involved me in the work that led to our 1988 paper [1], thus luring me into the field of semiconductor physics, which kept me busy for the next ten years or so. This paper, which is still now one of the most cited for the two of us, as well as for its third author, Raffaele Resta, introduced two new and far-reaching concepts.*

The first one, which was due to Raffaele, and is still widely used to date in the science of surfaces and interfaces, is that of "macroscopic average." This concept provided a novel tool for analyzing the  $z$ -dependence of a scalar field, such as the electron density and the electrostatic potential energy, across the junction of two semi-infinite media (one of which could simply be the vacuum, as at surfaces). By averaging a field over a period centered at a specific point, macroscopic averages effectively smooth out short-wavelength fluctuations, isolating the long-range variations that are crucial for understanding electrostatic properties at interfaces. This approach allows for a clearer distinction between bulk and

physique des semi-conducteurs, domaine dans lequel Alfonso m'a poussé à commencer par notre travail commun en 1988 sur les décalages de bande [1].

Au milieu des années 1980, une question très débattue était de savoir si les décalages de bande aux hétérojonctions semi-conductrices sont des propriétés intrinsèques des matériaux constitutifs ou s'ils dépendent de manière critique de l'orientation et de la morphologie de l'interface. En 1987, l'opinion dominante était partagée : bien que des considérations théoriques générales, basées sur la nature à longue portée de l'interaction de Coulomb, suggèrent que les alignements de potentiel électrostatique – et donc les décalages de bande – aux interfaces semi-conductrices peuvent effectivement dépendre de la structure de l'interface, des preuves expérimentales, des calculs de premiers principes sur le système paradigmatique GaAs/AlAs et des modèles théoriques applicables à différentes compositions chimiques semblaient indiquer le contraire. La situation était intrigante : la théorie montrait clairement que les décalages de bande pouvaient dépendre de la nature complexe de la structure interfaciale, qui dépend à son tour des détails du processus de fabrication – pourquoi cela ne serait-il pas le cas ? –, mais pourtant l'expérience et le calcul semblaient indiquer le contraire, du moins dans le cas de GaAs/AlAs, qui était l'exemple le plus étudié.

*« Le but du calcul est l'intuition, pas les chiffres » [2] : si les calculs actuels n'expliquent pas ce qui semble être une coïncidence fortuite, c'est parce que les conséquences logiques qui pourraient en être tirées n'ont pas encore été complètement développées. Convaincu de cela, Alfonso était déterminé à creuser profondément le problème et m'a impliqué dans le travail qui a conduit à notre article de 1988 [1], m'entraînant ainsi dans le domaine de la physique des semi-conducteurs, qui m'a occupé pendant les dix années suivantes. Cet article, qui reste aujourd'hui l'un des plus cités pour nous deux, ainsi que pour son troisième auteur, Raffaele Resta, a introduit deux nouveaux concepts aux implications considérables.*

Le premier, qui est dû à Raffaele et est encore largement utilisé aujourd'hui dans la science des surfaces et des interfaces, est celui de « la moyenne

interface-specific features, without requiring the definition of an ideal reference interface, while offering deeper insights into the electrostatic behavior at semiconductor heterojunctions. Leveraging first-principles calculations and the accurate numerical analysis enabled by the concept of macroscopic average, the band offset at GaAs/AlAs heterojunctions was found to be independent of interface orientation to within 0.02 eV. It was concluded that the finding of an orientation-independent macroscopic dipole suggests the idea that for GaAs/AlAs the lineup is basically a bulk effect. Such independence is in fact obtained under the assumption that each of the two bulk solids is an assembly of elementary building blocks, and that these blocks can also be rigidly assembled to form an ideal reference interface. Starting from this reference, any orientation dependence can only be due to electronic redistributions at the interface.

Alfonso then introduced the second key idea of the paper by suggesting that such elementary building blocks could be identified with the cation-centered Wigner-Seitz cells (WSC) of the two constituents. Overall charge neutrality requires that these building blocks be neutral, while crystal symmetry demands that they carry neither dipole nor quadrupole moments. Elementary electrostatics then dictates that the average electrostatic potential  $\bar{\Phi}$  of a semi-infinite three-dimensional array of such building blocks, with vanishing first multipoles, is independent of interface morphology. In this scenario, the potential lineup at a semiconductor interface is simply the difference between the average potentials of the two semi-infinite constituents:  $\Delta\bar{\Phi}(\text{GaAs/AlAs}) = \bar{\Phi}(\text{GaAs}) - \bar{\Phi}(\text{AlAs})$ . This finding would solve the problem of the band offset at lattice-matched homo-polar semiconductor interfaces, but, if it were general, it would leave little room for engineering the interface to tune the band offset across it. What about the effects of strain, such as in Si/Ge or GaAs/InAs, of heterovalency, such as in Ge/GaAs, or of a combination of the two, such as in Si/GaAs? Is there any way that we can exploit these effects, if any, to tune the band offset across a semiconductor interface? In order to answer these questions, a new approach to semiconductor heterojunctions was developed, based

macroscopique». Ce concept a fourni un nouvel outil pour analyser la dépendance en  $z$  d'un champ scalaire, tel que la densité électronique et l'énergie potentielle électrostatique, à travers la jonction de deux milieux semi-infinis (dont l'un pourrait tout simplement être le vide, comme aux surfaces). En moyennant un champ sur une période centrée à un point spécifique, les moyennes macroscopiques lissent efficacement les fluctuations à courte longueur d'onde, isolant les variations à longue portée qui sont cruciales pour comprendre les propriétés électrostatiques aux interfaces. Cette approche permet une distinction plus claire entre les caractéristiques de volume et celles spécifiques à l'interface, sans nécessiter la définition d'une interface de référence idéale, tout en offrant des perspectives plus profondes sur le comportement électrostatique aux hétérojonctions semi-conductrices. En s'appuyant sur des calculs de premiers principes et l'analyse numérique précise rendue possible par le concept de moyenne macroscopique, il a été trouvé que le décalage de bande aux hétérojonctions GaAs/AlAs était indépendant de l'orientation de l'interface à moins de 0,02 eV. Il a été conclu que la découverte d'un dipôle macroscopique indépendant de l'orientation suggère que, pour GaAs/AlAs, l'alignement est essentiellement un effet de volume. Une telle indépendance est en effet obtenue sous l'hypothèse que chacun des deux solides massifs est un assemblage de blocs élémentaires, et que ces blocs peuvent également être assemblés rigidement pour former une interface de référence idéale. À partir de cette référence, toute dépendance de l'orientation ne peut être due qu'à des redistributions électroniques à l'interface.

Alfonso a ensuite introduit la deuxième idée clé de l'article en suggérant que ces blocs élémentaires pouvaient être identifiés avec les cellules de Wigner-Seitz centrées sur le cation (WSC) des deux constituants. La neutralité de charge globale exige que ces blocs soient neutres, tandis que la symétrie cristalline impose qu'ils ne portent ni de dipôle ni de quadrupôle. L'électrostatique élémentaire dicte alors que le potentiel électrostatique moyen  $\bar{\Phi}$  résultant d'un réseau tridimensionnel semi-infini de tels blocs, ayant des multipôles de premier ordre nuls, est indépendant de la morphologie de l'interface.

on “pseudopotential alchemy,” and later extended to solid solutions.

With the establishment of the “atomic pseudopotential” concept and the advent of computing systems powerful enough to model the electronic structure of real materials, by the mid 1970s the virtual-crystal approximation (VCA) had gained considerable traction in semiconductor physics for addressing compositional disorder in solid solutions. A solid solution is characterized by a regular crystalline structure, where (sub-)lattice sites are occupied at random by two (or more) atomic species, say *A* and *B*. The VCA assumes that all the atoms in the disordered (sub-)lattice are represented by the same average pseudopotential,  $\bar{v}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[v_A(\mathbf{r}) + v_B(\mathbf{r})]$ , resulting in a perfect crystal where the effects of disorder are lost, but the average properties of the alloy are hopefully represented with acceptable accuracy. Of course, the VCA representation of a semiconductor heterojunction would entirely overlook any interface-specific features, including band offsets. If the VCA is sufficient to describe the average macroscopic properties of an alloy, it must be because the difference between  $v_A$  and  $v_B$  is small enough to be treated by low-order perturbation theory.

We reckoned therefore that linear response theory (LRT) would probably give good insight into the band offset problem [3]. This simple idea turned out to be extremely fruitful, not just for computing the electronic properties of interfaces, but also for predicting their dependence on structural details, often using only simple back-of-the-envelope considerations on top of sophisticated first-principles calculations.

In a nutshell, pseudopotential alchemy amounts to dealing with the effects of the interface by treating the difference between a real and a virtual ion by first-order perturbation theory in the difference between the ionic pseudopotentials forming the solid solution or the heterostructure. The resulting charge-density response can be expressed through an array of localized charge distributions—which, like in the case of WSCs, are neutral and carry neither a dipole nor a quadrupole moment—, thus producing an electrostatic potential lineup independent of interface morphology. For heterovalent interfaces

Dans ce scénario, l'alignement du potentiel à une interface semi-conductrice est simplement la différence entre les potentiels moyens des deux constituants semi-infinis :  $\Delta\bar{\Phi}(\text{GaAs/AlAs}) = \bar{\Phi}(\text{GaAs}) - \bar{\Phi}(\text{AlAs})$ . Cette découverte résoudrait le problème du décalage de bande aux interfaces homopolaires semi-conductrices à maillage correspondant, mais, si elle était générale, elle laisserait peu de place à l'ingénierie de l'interface pour ajuster le décalage de bande à travers celle-ci. Qu'en est-il des effets de contrainte, comme à l'interface Si/Ge ou GaAs/InAs, de l'hétérovalence, comme à l'interface Ge/GaAs, ou d'une combinaison des deux, comme à l'interface Si/GaAs ? Existe-t-il un moyen d'exploiter ces effets, le cas échéant, pour ajuster le décalage de bande à travers une interface semi-conductrice ? Pour répondre à ces questions, une nouvelle approche des hétérojonctions semi-conductrices a été développée, basée sur l'« alchimie de pseudopotentiels », et ensuite étendue aux solutions solides.

Avec l'établissement du concept de « pseudopotentiel atomique » et l'avènement de systèmes de calcul suffisamment puissants pour modéliser la structure électronique de matériaux réels, l'approximation du cristal virtuel (VCA) avait gagné au milieu des années 1970 une considération significative en physique des semi-conducteurs pour aborder le désordre de composition dans les solutions solides. Une solution solide se caractérise par une structure cristalline régulière, où des sites du (sous-)réseau sont occupés de manière aléatoire par deux (ou plusieurs) espèces atomiques, disons *A* et *B*. Le VCA suppose que tous les atomes dans le (sous-)réseau désordonné sont représentés par le même pseudopotentiel moyen,  $\bar{v}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[v_A(\mathbf{r}) + v_B(\mathbf{r})]$ , ce qui aboutit à un cristal parfait où les effets du désordre sont perdus, mais où les propriétés moyennes de l'alliage sont, espérons-le, représentées avec une précision acceptable. Bien sûr, la représentation VCA d'une hétérojonction semi-conductrice ignorerait entièrement toute caractéristique spécifique à l'interface, y compris les décalages de bande. Si le VCA est suffisant pour décrire les propriétés macroscopiques moyennes d'un alliage, c'est probablement parce que la différence entre  $v_A$  et  $v_B$  est suffisamment petite pour être traitée par la théorie des perturbations de faible ordre.

(e.g., Ge/GaAs), the alchemic perturbations turning a virtual ion into a real one carry a net charge. The response to these charged perturbations, treated within LRT, leads to a potential lineup that depends on the atomic structure of the interface, thus allowing band offsets to be tuned by engineering the interface structure. A notable example of this effect is the electrostatic potential drop induced by depositing a thin heterovalent double layer at a polar junction between two like semiconductors, such as Ge/GaAs/Ge [3]. This prediction—regarding the dependence of band offsets at polar heterojunctions on interface morphology and the creation of an offset at homojunctions via the deposition of ultrathin dipole layers—was soon confirmed by X-ray photoemission spectroscopy [4]. Using similar arguments, the effects of strain on the band offset could be understood, leading to the development of a general LRT theory of band offsets at semiconductor heterojunctions, as reviewed, e.g., in reference [5].

Shortly after one of the major issues in the physics of semiconductor heterostructures was thus resolved by “pseudopotential alchemy”, it was realized that the very same concept could be leveraged to address the structural stability of semiconductor solid solutions. In a solid solution, the random distribution of different atomic species among crystallographically equivalent lattice sites can be described by a binary variable,  $\sigma_R = \pm 1$ , which assumes either value according to the atomic species that occupies a given site  $R$ . DFPT can then be leveraged to map the energetics of the alloy onto an Ising model with long-range coupling constants, which could readily be simulated by Metropolis Monte Carlo [6]. The effects of macroscopic strain and microscopic atomic distortions from the VCA equilibrium configuration can be incorporated by introducing a generalized perturbation, in which the “alchemical” variables,  $\{\sigma_R\}$ , are coupled with the atomic displacements,  $\{u_R\}$ . Solid solutions of arbitrary binary, ternary, or quaternary compositions, such as  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ ,  $\text{Ga}_x\text{P}_{1-x}\text{As}$ , or  $\text{Zn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{S}_y\text{Se}_{1-y}$ , can be handled by straightforward extensions of this scheme [6].

I consider “pseudopotential alchemy” one of the feats of my early career, probably on par with DFPT. Unfortunately, its impact has been more modest: I did not

Nous avons donc estimé que la théorie de la réponse linéaire (LRT) donnerait probablement un bon aperçu du problème des décalages de bande [3]. Cette idée simple s’est révélée extrêmement fructueuse, non seulement pour le calcul des propriétés électroniques des interfaces, mais aussi pour prédire leur dépendance aux détails structurels, souvent en utilisant uniquement des considérations simples de coin de table, en complément de calculs de premiers principes sophistiqués.

En bref, l’« alchimie des pseudopotentiels » consiste à traiter les effets de l’interface en considérant la différence entre un ion réel et un ion virtuel par la théorie de perturbations du premier ordre dans la différence entre les pseudopotentiels ioniques formant la solution solide ou l’hétérostructure. La réponse en densité de charge résultante peut être exprimée par un ensemble de distributions de charge localisées – qui, comme dans le cas des cellules de Wigner-Seitz, sont neutres et ne portent ni de dipôle ni de quadrupôle –, produisant ainsi un alignement du potentiel électrostatique indépendant de la morphologie de l’interface. Pour les interfaces hétérovalentes (par exemple, Ge/GaAs), les perturbations alchimiques transformant un ion virtuel en un ion réel portent une charge nette. La réponse à ces perturbations chargées, traitée dans le cadre de la LRT, conduit à un alignement du potentiel qui dépend effectivement de la structure atomique de l’interface, permettant ainsi d’ajuster les décalages de bande par l’ingénierie de la structure de l’interface. Un exemple notable de cet effet est la chute du potentiel électrostatique induite par le dépôt d’une fine couche double hétérovalente à une jonction polaire entre deux semi-conducteurs identiques, tels que Ge/GaAs/Ge [3]. Cette prédiction – concernant la dépendance des décalages de bande aux hétérojonctions polaires par rapport à la morphologie de l’interface et la création d’un décalage aux homojonctions par le dépôt de couches dipolaires ultrafines – a été rapidement confirmée par la spectroscopie de photoémission à rayons X [4]. En utilisant des arguments similaires, les effets de la déformation sur le décalage de bande ont pu être approfondis, menant au développement d’une théorie générale LRT des décalages de bande aux hétérojonctions semi-conductrices, comme cela est discuté, par exemple, dans la revue de la réf. [5].

have the vision to fully pursue its potential, and, by the mid 1990s, I became increasingly drawn into the development of DFPT. Raffaele was on the verge of discovering the modern theory of polarization, which would make him famous and consume most of his energy for the rest of his professional life. As for Alfonso, I felt a nagging doubt that he did not value our work as much as I did, likely due to his proverbial understatement, as noted also in Raffaele's contribution to this volume. I partially revised this view when he wrote a fine and widely cited review paper with Maria and Nadia [5], covering much of our work on the band offset problem. However, the truth is that our fine work, along with my own research on solid solutions—directly stemming from it—, has had only a limited impact. Yet, it remains very dear to me, and I still consider it a pillar of my own development as a scientist and as a man. These reflections are an abridged version of a longer, slightly more technical, note that can be downloaded from arXiv [7].

- [1] A. Baldereschi, S. Baroni, R. Resta, Band offsets in lattice-matched heterojunctions: A model and first principles calculations for GaAs/AlAs, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 734–737 (1988).
- [2] R. W. Hamming, *Numerical Methods for Scientists and Engineers* (McGraw-Hill, 1962).
- [3] S. Baroni, R. Resta, A. Baldereschi, M. Peressi, Can we tune the band offsets at semiconductor heterojunctions? in *Semiconductor Superlattices and Interfaces*, NATO Advanced Science Institutes, Series B, Physics, Vol. 206, edited by G. Fasol, A. Fasolino, and P. Lugli (Springer, New York, 1989) pp. 251–271.
- [4] G. Biasiol, L. Sorba, G. Bratina, R. Nicolini, A. Franciosi, M. Peressi, S. Baroni, R. Resta, A. Baldereschi, Microscopic capacitors and neutral interfaces in III-V/IV/III-V semiconductor heterostructures, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1283–1286 (1992); M. Marsi, S. La Rosa, Y. Hwu, F. Gozzo, C. Coluzza, A. Baldereschi, G. Margaritondo, J. McKinley, S. Baroni, R. Resta, Microscopic manipulation of homojunction band lineups, *J. Appl. Phys.* **71**, 2048–2050 (1992).
- [5] M. Peressi, N. Binggeli, A. Baldereschi, Band engineering at interfaces: Theory and numerical experiments, *J. Phys. D Appl. Phys.* **31**, 1273–1299 (1998).
- [6] S. de Gironcoli, P. Giannozzi, S. Baroni, Structure and thermodynamics of  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  alloys from *ab initio* Monte Carlo simulations, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2116–2119 (1991); N. Marzari, S. de Gironcoli, S. Baroni,

Peu après que l'un des enjeux majeurs de la physique des hétérostructures semi-conductrices a ainsi été résolu grâce à l'« alchimie des pseudopotentiels », on a réalisé que le même concept pouvait être exploité pour aborder la stabilité structurelle des solutions solides semi-conductrices. Dans une solution solide, la distribution aléatoire des différentes espèces atomiques parmi les sites de réseau cristallographiquement équivalents peut être décrite par une variable binaire,  $\sigma_R = \pm 1$ , qui prend l'une ou l'autre valeur selon l'espèce atomique occupant un site donné  $\mathbf{R}$ . La DFPT peut ensuite être appliquée pour représenter l'énergie de l'alliage sur un modèle d'Ising avec des constantes de couplage à longue portée, qui peuvent être facilement simulées par la méthode de Monte Carlo de Metropolis [6]. Les effets de la déformation macroscopique et des distorsions atomiques microscopiques par rapport à la configuration d'équilibre du VCA peuvent être intégrés en introduisant une perturbation généralisée, dans laquelle les variables « alchimiques »,  $\{u_R\}$ , sont couplées avec les déplacements atomiques,  $\{\sigma_R\}$ . Les solutions solides de compositions binaires, ternaires ou quaternaires arbitraires, telles que  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ ,  $\text{Ga}_x\text{P}_{1-x}\text{As}$ , ou  $\text{Zn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{S}_y\text{Se}_{1-y}$ , peuvent être traitées par des extensions simples de ce schéma [6].

Je considère l'« alchimie des pseudopotentiels » comme l'un des exploits des premières années de ma carrière, probablement au même niveau que la DFPT. Malheureusement, son impact a été plus modeste : je n'ai pas eu la vision de poursuivre pleinement son potentiel, et, au milieu des années 1990, je me suis de plus en plus tourné vers le développement de la DFPT. Raffaele était sur le point de découvrir la théorie moderne de la polarisation, qui le rendrait célèbre et absorberait la majeure partie de son énergie pour le reste de sa vie professionnelle. Quant à Alfonso, j'avais un doute lancinant sur le fait qu'il n'estimait pas notre travail autant que moi, probablement en raison de sa réserve légendaire, comme l'a également souligné Raffaele dans sa contribution à ce volume. J'ai partiellement révisé cette opinion lorsque Alfonso a écrit un excellent article de revue, largement cité, avec Maria et Nadia [5], couvrant une grande partie de notre travail sur le problème des décalages de bande. Cependant, la vérité est que notre travail de qualité, ainsi que mes propres recherches sur les



Structure and phase stability of  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  solid solution from computational alchemy, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4001–4004 (1994); A. M. Saitta, S. de Gironcoli, S. Baroni, Structural and electronic properties of a wide-gap quaternary solid solution:  $(\text{Zn,Mg})(\text{S,Se})$ , *Phys. Rev Lett.* **80**, 4939–4942 (1998).

- [7] S. Baroni, Birth and ephemeral life of pseudopotential alchemy (2024), arXiv:2410.11809.

solutions solides – directement issues de celui-ci – n’ont eu qu’un impact limité. Pourtant, il reste très cher pour moi, et je le considère encore comme un pilier de mon propre développement, en tant que scientifique et en tant qu’homme. Ces réflexions sont une version abrégée d’une note plus longue, légèrement plus technique, qui peut être téléchargée sur arXiv [7].

## Funeral eulogy

Trieste, 27 April 2024

Alfonso was a mentor.

For some of my numerous colleagues, who are his fortunate disciples, he may have been one of their mentors. For me, he was the mentor.

I met Alfonso on a spring day in 1979, when he welcomed me at the Lausanne train station. I was then 24, arriving for a job interview that would shape the rest of my life. He wasn’t yet 33 and he was universally regarded as the rising star of theoretical solid-state physics. I spent the next five years in Lausanne, then followed him to Trieste, where a couple of years later he became one of the country’s youngest full professors. Later, until the mid 1990s, I was fortunate enough to be his guest for several months each year at IRRMA, the institute for numerical materials simulation he founded in Lausanne.

We published our last joint work thirty years ago, marking the end of a long, pleasant, and still cited collaboration, with Raffaele Resta as the third pillar. After that, we lost touch a bit, meeting perhaps a couple of times a year, but the mark he left on my scientific personality, and not just that, is indelible. The relationship between a mentor and a disciple is inherently asymmetrical and, in some ways, reminiscent of the most asymmetrical of all: that between father and son. A good father leaves a permanent trace in the persona of his son, even when he doesn’t constantly hold his hand. As a child, the son may sometimes wish for more reassuring advice or a more certain guide, but as an adult, he will draw inspiration and confidence from the father’s example

## Éloge funèbre

Trieste, 27 avril 2024

Alfonso a été un mentor.

Pour certains de mes nombreux collègues, qui sont ses disciples privilégiés, il a pu être l’un de leurs mentors. Pour moi, il a été le mentor.

J’ai rencontré Alfonso un jour de printemps en 1979, lorsqu’il m’a accueilli à la gare de Lausanne. J’avais alors 24 ans, arrivant pour un entretien d’embauche qui allait façonner le reste de ma vie. Il n’avait pas encore 33 ans et il était universellement considéré comme l’étoile montante de la physique théorique des solides. J’ai passé les cinq années suivantes à Lausanne, puis je l’ai suivi à Trieste, où, quelques années plus tard, il est devenu l’un des plus jeunes professeurs ordinaires d’Italie. Plus tard, jusqu’au milieu des années 90, j’ai eu la chance d’être son invité pendant plusieurs mois chaque année à l’IRRMA, l’Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux, qu’il a fondé à Lausanne.

Nous avons publié notre dernier travail commun il y a trente ans, marquant la fin d’une collaboration longue, agréable et encore citée, avec Raffaele Resta comme troisième pilier. Après cela, nous avons un peu perdu contact, nous rencontrant peut-être quelques fois par an, mais l’empreinte qu’il a laissée sur ma personnalité scientifique, et pas seulement sur celle-ci, est indélébile. La relation entre un mentor et un disciple est intrinsèquement asymétrique et, d’une certaine manière, elle rappelle la plus asymétrique de toutes : celle entre père et fils. Un bon père laisse une empreinte permanente dans la personnalité de son fils, même lorsqu’il ne lui tient pas

and the freedom and self-assurance he instilled in him as a child.

The salient traits of Alfonso's personality, or at least those I perceived as such, were intellectual acuity and honesty on the one hand, and on the other, a composure that allowed him to convey the impression of always knowing what was best (or least harmful) for himself and others. His acuity was that of a child prodigy, capable of getting to the heart of a complex scientific problem always before his interlocutor and focusing the power of his Cartesian logic on the essential, leaving out the superfluous. His intellectual honesty allowed him to clearly outline and not hide the limits of his and others' understanding, and to make the result of his thinking clearly intelligible, without weighing it down with unnecessary concepts or words. His composure—the ability to hide from others the torments that must certainly have afflicted him—I believe came from this very honesty: once he had analyzed and understood the causes and the most probable course of events, it must have seemed superfluous, and perhaps undignified, to burden others with his doubts and regrets.

The lightning acuity of the intellect is an innate talent that is hardly transmitted from mentor to disciple. Not so with intellectual honesty and the ability to separate the wheat from the chaff, which can be taught and learnt. I like to think that whatever intellectual honesty I have managed to painfully acquire is the result of Alfonso's early and lasting example. As for composure, Alfonso and I could not have been more different: he, reserved, reflective, and silent, I, extroverted, sometimes hasty, and always noisy. And yet, slowly, as I grow older, I am learning not to fight for lost causes and not to shout my righteous reasons when there is no one willing to listen to them. In this too, thank you, Alfonso.

Alfonso's personality has always exerted an intellectual fascination over me, along with a certain awe that, throughout these 45 years, has prevented me from feeling like his peer. I saw Alfonso for the last time one evening last September (2023). At the end of dinner, together with friends Franco and Gaetano, Alfonso hugged me, I believe for the first time. I felt emotion in his embrace. Certainly, there was much in

constamment la main. En tant qu'enfant, le fils peut parfois souhaiter des conseils plus rassurants ou un guide plus certain, mais en tant qu'adulte, il puisera son inspiration et sa confiance dans l'exemple de son père et dans la liberté et l'assurance qu'il lui a instillées lorsqu'il était enfant.

Les traits saillants de la personnalité d'Alfonso, ou du moins ceux que j'ai perçus comme tels, étaient l'acuité intellectuelle et l'honnêteté d'une part, et d'autre part, une sérénité qui lui permettait de donner l'impression de toujours savoir ce qui était le mieux (ou le moins nuisible) pour lui-même et pour les autres. Son acuité était celle d'un enfant prodige, capable d'atteindre le cœur d'un problème scientifique complexe bien avant son interlocuteur et de concentrer la puissance de sa logique cartésienne sur l'essentiel, laissant de côté le superflu. Son honnêteté intellectuelle lui permettait de délimiter clairement et de ne pas dissimuler les limites de sa propre compréhension et de celle des autres, et de rendre le résultat de sa réflexion parfaitement intelligible, sans l'alourdir de concepts ou de mots inutiles. Sa sérénité – la capacité de cacher aux autres les tourments qui devaient certainement l'affliger –, je crois qu'elle venait de cette même honnêteté : une fois qu'il avait analysé et compris les causes et le cours des événements les plus probables, il devait lui sembler superflu, et peut-être indigne, de charger les autres de ses doutes et de ses regrets.

L'acuité fulgurante de l'intellect est un talent inné qui se transmet difficilement du mentor au disciple. Il en va autrement de l'honnêteté intellectuelle et de la capacité à séparer le bon grain de l'ivraie, qui peuvent être enseignées et apprises. J'aime penser que l'honnêteté intellectuelle que j'ai réussi à acquérir, non sans peine, est le fruit de l'exemple précoce et durable d'Alfonso. Quant à la maîtrise de soi, Alfonso et moi n'aurions pas pu être plus différents : lui réservé, réfléchi et silencieux ; moi extraverti, parfois hâtif et toujours bruyant. Et pourtant, lentement, à mesure que je vieillissais, j'apprends à ne pas me battre pour des causes perdues et à ne pas crier mes raisons justes quand il n'y a personne pour les écouter. Là aussi, merci, Alfonso.

La personnalité d'Alfonso a toujours exercé sur moi une fascination intellectuelle, accompagnée d'une certaine admiration profonde qui, au cours de ces 45 dernières années, m'a empêché de me sentir à sa

mine. Perhaps, over time, our once distant relationship was becoming less asymmetrical. Perhaps the opportunity I have been given today to share these thoughts with you is a small, indirect, sign of that.

Stefano Baroni

hauteur. J'ai vu Alfonso pour la dernière fois un soir de septembre dernier (2023). À la fin du dîner, avec nos amis Franco et Gaetano, Alfonso m'a pris dans ces bras, je crois, pour la première fois. J'ai ressenti de l'émotion dans son geste. Il y en avait assurément beaucoup dans le mien. Peut-être qu'avec le temps, notre relation autrefois distante devenait moins asymétrique. Peut-être que l'occasion qui m'a été donnée aujourd'hui de partager ces réflexions avec vous est un petit signe, indirect, de cela.

Stefano Baroni

## Alfonso Baldereschi, the gentleman physicist Alfonso Baldereschi, le physicien gentilhomme

---

Piotr Bogusławski

---

I met Alfonso at the Jaszowiec Conference in Poland in 1982. Alfonso invited me to the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) for a year, after which I continued a collaboration with him at the International Centre of Theoretical Physics (ICTP) in Trieste for another year. Later, I visited him a few times in Lausanne in 1985-89. It was a very interesting period for condensed matter physics, when first-principles atomic pseudopotentials within density functional theory were being developed and applied to solids.

Alfonso was surprisingly efficient with introducing me to *ab initio* methods. His pedagogical talents were truly outstanding. I guess I am not the only one to remember his low and seductive voice, speaking slowly but navigating with an astonishing mastery through complex topics, were it a lecture, an explanation of an idea in physics, but also the presentation of his viewpoint on social problems.

J'ai rencontré Alfonso à la conférence de Jaszowiec en Pologne en 1982. Alfonso m'a invité à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) pour une année, après quoi j'ai poursuivi ma collaboration avec lui à l'International Centre for Theoretical Physics (ICTP) à Trieste pendant une autre année. Plus tard, je lui ai rendu visite à plusieurs reprises à Lausanne de 1985 à 1989. C'était une période très intéressante pour la physique de la matière condensée, lorsque les pseudopotentiels atomiques *ab initio* dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité ont été développés et appliqués aux solides.

Alfonso a été étonnamment efficace pour m'initier aux méthodes *ab initio*. Ses talents pédagogiques étaient vraiment extraordinaires. Je suppose que je ne suis pas le seul à me souvenir de sa voix grave et séduisante, parlant lentement mais naviguant avec une maîtrise étonnante à travers des sujets complexes,



Michael Schlüter & Alfonso Baldereschi

Alfonso was sharing his time between Lausanne and Trieste, linking the two strong scientific communities. This was the reason for his quasi-periodic absence in EPFL: every second week he took the “Alfonso train” to Italy. As a result, his lack of time was almost proverbial among his colleagues in Lausanne—Wanda Andreoni, Klaus Maschke, Stefano Baroni, Roberto Car and Raffaele Resta, and also his PhD students François Gygi and Nadia Binggeli.

Apart from the sharp intellect, a trait characteristic of Alfonso was his elegance and class. The elegance with which he approached physical problems and edited scientific papers, and class which characterized his relations with collaborators. Indeed, Alfonso was at the heart of many initiatives and projects, which involved a wide spectrum of colleagues from many countries, but he was never attempting to impose himself as a “bossy manager.” He never emphasized his status, nor entered into conflicts with collaborators, nor even spoke louder than usual—his calm class and competence were sufficient to assure him an influential role.

qu’il s’agisse d’un cours, de l’explication d’une idée physique, ou de la présentation de son point de vue sur les problèmes sociaux.

Alfonso partageait son temps entre Lausanne et Trieste, reliant les deux fortes communautés scientifiques. C’est la raison de son absence quasi périodique à l’EPFL : une semaine sur deux, il prenait le « train Alfonso » pour l’Italie. En conséquence, son manque de temps était presque proverbial parmi ses collègues de Lausanne – Wanda Andreoni, Klaus Maschke, Stefano Baroni, Roberto Car et Raffaele Resta, ainsi que ses doctorants François Gygi et Nadia Binggeli.

En plus de son intelligence aiguë, un trait caractéristique d’Alfonso était son élégance et sa classe. L’élégance avec laquelle il abordait les problèmes physiques et rédigeait des articles scientifiques, et la classe qui caractérisait ses relations avec ses collaborateurs. En effet, Alfonso était au cœur de nombreuses initiatives et de nombreux projets, qui impliquaient un large éventail de collègues de nombreux

His everyday life was pedantically organized, which was necessary to complete all his tasks. But on the desk in his office at EPFL, among geometrically arranged papers, pencils, a box of cigarettes, etc., there was a picture of him with Michael Schlüter (and the Golden Gate Bridge in the background, both of them smiling and with hippie-like hair flowing in the wind, the picture showing the hidden, but occasionally coming to the surface, romantic face of Alfonso.

pays, mais il n'a jamais tenté de s'imposer comme un « manager autoritaire ». Il n'a jamais mis en avant son statut, ni n'est entré en conflit avec ses collaborateurs, ni n'a même parlé plus fort que d'habitude – sa classe calme et ses compétences étaient suffisantes pour lui assurer un rôle influent.

Sa vie quotidienne était organisée de manière minutieuse, ce qui était nécessaire pour accomplir toutes les tâches. Mais sur son bureau à l'EPFL, parmi des papiers géométriques, des crayons, une boîte de cigarettes, etc., il y avait une photo de lui avec Michael Schlüter (et le Golden Gate Bridge en arrière-plan), tous deux souriants et les cheveux de hippie flottant au vent, la photo montrant le visage romantique d'Alfonso, habituellement caché mais qui refaisait parfois surface.

## Quelques souvenirs de mes premiers pas de physicien avec Alfonso Baldereschi

---

François Gygi

---

Ma première rencontre avec Alfonso Baldereschi remonte au semestre 1981-1982, lorsqu'il donna le cours de Théorie électronique du solide au Département de physique de l'EPFL.

Ce cours se distingua par la clarté de la présentation, et j'en garde un excellent souvenir. Il eut une influence décisive sur la direction que je choisis de poursuivre plus tard. De nombreux étudiants de notre classe de physique avaient choisi ce cours et étaient tous enthousiastes. Pourtant, l'examen final nous réserva quelques surprises, et créa une certaine inquiétude parmi les étudiants. Alors que l'examen oral se déroulait dans un des auditorios, nous étions réunis avec quelques amis devant la

porte, attendant d'entrer à notre tour, et bombardant de questions les étudiants qui avaient juste fini leur examen. Hélas, presque tous semblaient bien découragés et pensaient n'avoir pas su répondre aux questions d'Alfonso. J'eus moi-même la même impression. Après avoir pu répondre raisonnablement à de nombreuses questions qui devenaient de plus en plus complexes, j'avais dû admettre ne pas savoir répondre aux deux ou trois dernières questions, qui m'avaient d'ailleurs semblé plus difficiles que le contenu du cours. La surprise vint lors de la réception des notes. Mes amis et moi fûmes surpris de constater que nous avions presque tous reçu la meilleure note. À ce moment, la stratégie d'Alfonso nous apparut clairement. Il avait décidé de pousser



les limites de ses questions jusqu'au point où nous ne savions plus répondre, une approche très logique pour évaluer nos connaissances, mais qui nous causa un peu d'anxiété !

Fin 1982, je poursuivis un travail de diplôme sous la supervision de Klaus Maschke à l'Institut de physique appliquée, et mis en pratique les concepts de théorie du solide. Pour la première fois, je fus confronté aux problèmes pratiques tels que l'écriture de programmes, et la rédaction d'une première publication qui fut possible grâce à l'aide précieuse et l'enseignement patient de Klaus Maschke et de Wanda Andreoni, qui travaillaient alors sur les propriétés cohésives du NaCl.

En automne 1983, Alfonso m'offrit la possibilité de poursuivre un travail de thèse à l'Institut de physique appliquée sous sa direction, et j'acceptai avec enthousiasme. Ma première tâche fut d'étudier et de modifier les programmes écrits par mes prédécesseurs. Je me présentai alors dans le bureau d'Alfonso pour ce transfert de « patrimoine informatique ». Il s'approcha d'une armoire et en retira un tiroir rempli de cartes perforées. C'était à l'époque la manière de préserver les programmes, et il me recommanda de ne pas laisser tomber ces cartes, qui devaient bien entendu être conservées dans leur séquence originale. J'entrepris alors le projet de recherche proposé par Alfonso, sur la méthode de Hartree-Fock dans les solides, un sujet relativement peu exploré jusque-là.

De cette période, je garde le souvenir de nombreuses conversations qui s'étendaient souvent sur plusieurs heures, entrecoupées bien sûr de pauses café indispensables. Alfonso était connu pour la rigueur de ses arguments, et il n'hésitait pas à repartir de principes fondamentaux pour aborder les problèmes en question. Cette approche demandait parfois de longues heures de discussions, et j'appris bien vite à ne pas prévoir d'autres activités après un rendez-vous avec Alfonso ! Mais tous s'accordaient à reconnaître la valeur de ces précieuses conversations.

Alfonso a toujours été très généreux en me donnant beaucoup de liberté, ce qui me permit d'élargir mon apprentissage de la physique, notamment au contact des étudiants de l'Institut de physique théorique. Il m'encouragea aussi à participer à de nombreuses conférences, quand bien même je n'avais pas de contribution à présenter.

Cela me permit de rencontrer de nombreux chercheurs qui jouèrent un rôle important dans la suite de ma carrière. Ainsi je pus rencontrer le professeur Bassani à Pise, qui me fit ensuite l'honneur de joindre mon comité de thèse. Alfonso m'encouragea aussi à visiter la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) à Trieste, et à participer aux conférences organisées à Trieste. Cela contribua immensément à me familiariser avec les derniers développements présentés par des chercheurs venant d'horizons très divers. Alfonso m'invita aussi à participer à la vie sociale au-delà du programme strictement scientifique de ces conférences, et je pus faire la connaissance de nombreux autres étudiants, parfois lors de dîners dans les restaurants de Trieste. Je fis là mon premier apprentissage de quelques mots d'italien, qui furent le début de bien d'autres conversations.

À la conclusion de ma thèse, Alfonso demanda à Michael Schlüter de joindre mon comité de thèse, ce qu'il accepta. Cela me permit ensuite de joindre ce dernier en tant que postdoctorant aux Bell Labs, ouvrant de nouveaux horizons qui eurent une grande influence sur le reste de ma carrière. À mon retour des États-Unis, après un postdoctorat à IBM, j'eus la chance de pouvoir travailler à l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), un institut qu'Alfonso avait contribué à créer à Lausanne et où je pus poursuivre ma carrière entre 1992 et 1998.

Je garde un excellent souvenir des années passées sous la supervision d'Alfonso, et lui suis reconnaissant de m'avoir enseigné la physique avec son unique clarté. Sa générosité me permit d'enrichir mes connaissances d'une façon dont bien peu d'étudiants bénéficient aujourd'hui.

# Memorie (di una fisica superficiale)

## Mémoires (d'une physicienne superficielle)

---

Alessandra Catellani

---

Così mi dissero: "Adesso andrai al Politecnico Federale di Losanna a lavorare con Alfonso, e là imparerai davvero la fisica dello stato solido". Avevano perfettamente ragione, anche se l'affermazione è stata decisamente riduttiva.

All'arrivo a Losanna, era la fine del 1984, io ero una giovane borsista appena laureata, con tantissimi sogni e nessuna conoscenza di teoria dei gruppi. La prima impressione, l'immagine più vivida che ricordo del Professor Alfonso Baldereschi quindi è quella di un ricercatore estremamente alto, dinoccolato e sempre impegnatissimo, nella sua giacca di tweed, perennemente circondato da una nuvola di fumo. Mi accolse dandomi una quantità di libri e articoli da studiare, un progetto di ricerca, ed un gruppo di persone con cui lavorare, nel quale inserirmi. Anche se fosse stato assente, sembrava fosse in realtà sempre al Politecnico, lo vedevi nel suo ufficio, o ne coglievi la scia.

Ho imparato davvero tantissimo: oltre ai corsi sulla fisica dello stato solido e la teoria dei gruppi; oltre a correggere i testi, e utilizzare caratteri in modo coerente nelle figure o nelle presentazioni – con quanto stress per inserire modifiche all'ultimo minuto prima di un seminario... – ho imparato cose di base: come si lavora, come comportarsi ad una conferenza, come studiare e come insegnare; ho imparato come pensare, come affrontare un problema di fisica, perché sì, per me il Professor Baldereschi ERA LA FISICA.

Ricorderò sempre la sua espressione sorniona nel discutere risultati inaspettati, e la pressione che ti metteva per trovarne rapidamente conferma o un'interpretazione, incurante di quisquiglie come il tempo di calcolo.

Ils m'ont donc dit : « Maintenant, tu vas aller à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) pour travailler avec Alfonso, et c'est là que tu apprendras vraiment la physique de l'état solide ». Ils avaient tout à fait raison, même si l'affirmation était nettement réductrice.

Lorsque je suis arrivée à Lausanne, c'était à la fin de l'année 1984, j'étais une jeune boursière qui venait d'obtenir son diplôme, avec beaucoup de rêves et aucune connaissance de la théorie des groupes. La première impression, l'image la plus vive que je garde du Professeur Alfonso Baldereschi, est donc celle d'un chercheur de très grande taille, dégingandé, et toujours occupé, dans sa veste de tweed, perpétuellement entouré d'un nuage de fumée. Il m'a accueillie en me donnant un certain nombre de livres et d'articles à étudier, un projet de recherche et un groupe de personnes dans lequel je pouvais m'intégrer pour collaborer. Même s'il était absent, il semblait être toujours au polytechnique, on pouvait le voir dans son bureau ou relever sa trace.

J'ai appris tant de choses : au-delà de l'état solide et de la théorie des groupes, au-delà de la relecture des textes et de l'utilisation cohérente des polices de caractères dans les figures ou les présentations – avec tout le stress des changements de dernière minute avant un séminaire... –, j'ai appris les bases : comment travailler, comment se comporter dans un cours, comment étudier et comment enseigner ; j'ai appris à penser, à aborder un problème de physique, car oui, pour moi, le Professeur Baldereschi ÉTAIT LA PHYSIQUE.

Je me souviendrai toujours de son expression malicieuse lorsqu'il discutait de résultats inattendus, et

Adesso che mi trovo anche a fare un bilancio della mia carriera spero di essere riuscita a trasmettere anche solo in minima parte il desiderio di sapere, l'amore per la fisica, per la conoscenza, l'orgoglio di non uniformarsi, che pervadevano quei giorni al Politecnico, e hanno poi segnato tutta la mia storia.

de la pression qu'il exerçait sur toi pour en obtenir rapidement confirmation ou une interprétation, sans se soucier de futilités comme le temps de calcul.

Maintenant que je fais le bilan de ma carrière, j'espère avoir réussi à transmettre ne serait-ce qu'une infime partie du désir de savoir, de l'amour de la physique, de la connaissance et de la fierté de ne pas se conformer, qui ont imprégné ces journées au polytechnique et qui ont ensuite marqué toute mon histoire.

## Enriching contacts with Alfonso Baldereschi

### Des contacts enrichissants avec Alfonso Baldereschi

---

Lucio Claudio Andreani

---

I first met Alfonso Baldereschi in 1986, when I was a first-year PhD student (*perfezionando*) at the Scuola Normale Superiore in Pisa. I was young and naive, and had no previous knowledge of him, nor of the panorama of Italian researchers. When we started discussing, it took just a few moments for me to realize I was facing a scientist with superior intellectual skills. It was the time when the field of semiconductor nanostructures started to grow very rapidly, notably, theorists were concerned with calculating energy levels of confined states and subband dispersion in quantum wells. The dispersion of valence subbands proved to be complicated and had to be described in the framework of the  $4 \times 4$  Luttinger-Kohn Hamiltonian [1]. I was struggling with the search of symmetry properties and analytic solutions to the problem, and I soon discovered that the main steps had already been described in two seminal works by Alfonso Baldereschi and Nunzio Lipari [2,3], later by Massimo

Ma première rencontre avec Alfonso Baldereschi remonte à 1986, lorsque j'étais étudiant en première année de doctorat à la Scuola Normale Superiore de Pise. J'étais jeune et naïf, et je n'avais aucune connaissance préalable de lui ni du panorama des chercheurs italiens. Quand nous avons commencé à discuter, il m'a fallu peu de temps pour réaliser que je faisais face à un scientifique aux facultés intellectuelles supérieures. C'était à l'époque où le domaine des nanostructures semiconductrices commençait à se développer très rapidement ; en particulier, les théoriciens s'intéressaient au calcul des niveaux d'énergie des états confinés et à la dispersion des sous-bandes dans les puits quantiques. La dispersion des sous-bandes de valence s'est révélée complexe et devait être décrite dans le cadre de l'hamiltonien de Luttinger-Kohn  $4 \times 4$  [1]. Je luttais pour trouver des propriétés de symétrie et des solutions analytiques au problème, et j'ai rapidement découvert que

Altarelli and Nunzio Lipari [4]. The spherical approximation to the Luttinger Hamiltonian was the key to developing simple but accurate approaches to the effective-mass equation for excitons and acceptor states. In semiconductor nanostructures, this was generalized to the axial (cylindrical) approximation by Massimo Altarelli and his coworkers [5]. Together with Alfredo Pasquarello and Franco Bassani, we then used this kind of approach to describe the valence subbands and confined excitons in GaAs-AlGaAs quantum wells [6,7]. Starting with that inspiring conversation in 1986, I am very glad to acknowledge the profound influence Alfonso had on my subsequent work.

I met Alfonso Baldereschi again at a summer school, I think it was in Castro Marina in 1987. That was a good time for the Italian condensed matter community, as each year there was a summer school in a beautiful seaside place and a spring workshop of theoretical physics in Fai della Paganella, with a widespread participation and lively discussions. Alfonso gave a lecture on Density Functional Theory (DFT): he spoke for nearly two hours, showing exactly seven slides. For each slide, he spent several minutes explaining the physics and the subtleties behind single-particle levels and excitations, Hohenberg-Kohn theorems, Kohn-Sham equations, etc. His recurring message was to identify physical quantities that can be calculated and compared with experiments: he did so along the line of our common first supervisor, Professor Franco Bassani. I took several pages of notes on this lecture, which formed the basis of my understanding of DFT. Later, Alfonso asked me to write down the lecture notes in the form of a manuscript, which I did. The manuscript was then used for teaching, and I handed it to my students for many years.

I then moved to the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), first in 1987 during my PhD, then in 1989 as a postdoc. The Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA) had just been founded with Alfonso Baldereschi as its first director (later Roberto Car took the office). Alfonso helped me settle down and kept an eye on my activity, although I chose to work in a field (correlated systems) that was different from the computational mainstream of IRRMA. I was first a student,

les principales étapes avaient déjà été décrites dans deux travaux fondamentaux d'Alfonso Baldereschi et Nunzio Lipari [2,3], ensuite par Massimo Altarelli et Nunzio Lipari [4]. L'approximation sphérique de l'hamiltonien de Luttinger était la clé pour développer des approches simples mais précises de l'équation de masse effective pour les excitons et les états d'accepteur. Dans les nanostructures semi-conductrices, cela a été généralisé à l'approximation axiale (cylindrique) par Massimo Altarelli et ses collaborateurs [5]. Avec Alfredo Pasquarello et Franco Bassani, nous avons ensuite utilisé ce type d'approche pour décrire les sous-bandes de valence et les excitons confinés dans des puits quantiques GaAs-AlGaAs. À partir de cette conversation inspirante en 1986, je suis très heureux de reconnaître l'influence profonde qu'Alfonso a eue sur mes travaux ultérieurs.

J'ai de nouveau rencontré Alfonso Baldereschi lors d'une école d'été, je pense que c'était à Castro Marina en 1987. C'était une période propice pour la communauté italienne de la matière condensée ; chaque année, il y avait une école d'été dans un bel endroit au bord de la mer et un workshop de physique théorique au printemps à Fai della Paganella, avec une participation large et des discussions animées. Alfonso a donné une conférence sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) : il a parlé pendant près de deux heures, montrant exactement sept diapositives. Pour chaque diapositive, il a passé plusieurs minutes à expliquer la physique et les subtilités derrière les niveaux et les excitations à une particule, les théorèmes de Hohenberg-Kohn, les équations de Kohn-Sham, etc. Son message récurrent était d'identifier les grandeurs physiques qui peuvent être calculées et comparées avec les expériences : il le faisait dans l'esprit de notre directeur de thèse commun, le Professeur Franco Bassani. J'ai pris plusieurs pages de notes sur cette conférence, qui ont formé la base de ma compréhension de la DFT. Plus tard, Alfonso m'a demandé de rédiger les notes de cours sous forme de manuscrit, ce que j'ai fait. Le manuscrit a ensuite été utilisé pour l'enseignement, et je l'ai remis à mes étudiants pendant de nombreuses années.

J'ai ensuite rejoint l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), d'abord en 1987 pendant mon doctorat, puis en 1989 en tant que postdoctorant.

then an assistant in the PhD course *Symétries en matière condensée* given by him and Hans Beck, who was my postdoc supervisor. And I still keep the folder with the lecture notes and exercises of this excellent course. It was also very interesting to witness the growth of the community of first-principles calculations, led by top-level Italian scientists. The research environment was lively and stimulating, the atmosphere was a friendly one, seminars and meetings were of topmost interest. For example, I was impressed by the PhD thesis defense of François Gygi, who worked under the supervision of Alfonso, and who was among the first to calculate the energy gap of insulating solids within DFT with quasiparticle corrections [8].

During my postdoc at EPFL, I discussed with Alfonso some technical issues related to variational (i.e., finite-basis) expansion with a large basis set. He explained to me that the numerical solution of a linear eigenvalue problem is usually stable, while the solution of a generalized eigenvalue problem can easily become unstable (specifically, the overlap matrix should be positive definite, but it can fail to do so in the computer code because of rounding errors). Numerical precision becomes very important, but there is a useful trick that considerably improves stability: the basis set should be chosen in such a way that the overlap matrix is *balanced*, namely with diagonal elements of the order of unity. I often used finite-based expansions in my scientific works, and this elegant trick turned out to be most helpful. Also, these discussions helped in solving a specific problem, namely the Fano linewidth of the light-hole excitons in GaAs-GaAlAs quantum wells. Below a given quantum-well width, the light-hole exciton becomes degenerate with the continuum of the heavy-hole exciton, and it acquires a resonance linewidth. This effect is difficult to calculate because the continuum states are hard to represent in a finite basis set. I was working on this problem with Alfredo Pasquarello, and Alfonso's suggestions helped us choose an appropriate basis set of plane waves that are equally spaced in energy, allowing us to calculate the Fano resonance effect with good accuracy [9].

At the end of 1992, I came back to Italy and had few contacts with Alfonso since then (apart from a few

L'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA) venait d'être fondé, avec Alfonso Baldereschi comme premier directeur (ensuite, Roberto Car a pris la direction). Alfonso m'a aidé à m'installer et a veillé sur mon activité, bien que j'aie choisi de travailler dans un domaine (systèmes corrélés) différent du domaine principal de l'IRRMA. J'ai d'abord été étudiant, puis assistant dans le cours de doctorat *Symétries en matière condensée* donné par Alfonso et Hans Beck, qui était le superviseur de ma recherche postdoctorale. Je garde encore le dossier avec les notes de cours et les exercices de cet excellent cours. Il a également été très intéressant de voir grandir la communauté des calculs *ab initio*, dirigée par des scientifiques italiens de haut niveau. L'environnement de recherche était dynamique et stimulant, l'atmosphère était amicale, et les séminaires et les réunions étaient d'un intérêt majeur. Par exemple, j'ai été impressionné par la soutenance de thèse de doctorat de François Gygi, qui a travaillé sous la direction d'Alfonso et qui a été parmi les premiers à calculer la bande interdite des solides isolants dans le cadre de la DFT avec des corrections de quasi-particules [8].

Durant mon postdoctorat à l'EPFL, j'ai discuté avec Alfonso de certaines questions techniques liées au développement variationnel (c'est-à-dire, en base finie) avec une base étendue. Il m'a expliqué que la solution numérique d'un problème aux valeurs propres linéaire est généralement stable, tandis que la solution d'un problème aux valeurs propres généralisé peut facilement devenir instable (spécifiquement, la matrice de recouvrement doit être définie positive, mais elle peut ne pas l'être dans le code informatique à cause d'erreurs d'arrondi). La précision numérique devient très importante, mais il existe une astuce utile qui améliore considérablement la stabilité : l'ensemble de bases doit être choisi de manière à ce que la matrice de recouvrement soit équilibrée, c'est-à-dire avec des éléments diagonaux de l'ordre de l'unité. J'ai souvent utilisé des développements en bases finies dans mes travaux scientifiques, et cette astuce élégante s'est révélée très utile. De plus, ces discussions ont aidé à résoudre un problème spécifique, à savoir la largeur de Fano des excitons à trou léger dans des puits quantiques GaAs-GaAlAs. En dessous d'une certaine largeur,



contests where he was a committee member, and I was a candidate). It took me a long time to realize the extent and depth of his contributions to condensed matter physics, first dealing with semiconductors in the framework of effective-mass equations, then with first-principles approaches based on DFT. He is among the very few physicists having a key finding printed on a T-shirt, namely the Baldereschi point of the Brillouin zone. What I mostly remember of him is the clarity of his explanations in lectures and seminars, which resulted from an unusually deep understanding of Physics. He was never tempted by the habit of advertising or overselling his results. His approach to research was an inspiring example of scientific rigor and integrity.

- [1] J. M. Luttinger, W. Kohn, Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [2] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Direct exciton spectrum in diamond and zinc-blende semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 373 (1970).
- [3] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Energy levels of direct excitons in semiconductors with degenerate bands, *Phys. Rev. B* **3**, 439 (1971).
- [4] M. Altarelli, N. O. Lipari, Exciton dispersion in semiconductors with degenerate bands, *Phys. Rev. B* **15**, 4898 (1977).
- [5] M. Altarelli, U. Ekenberg, A. Fasolino, Calculations of hole subbands in semiconductor quantum wells and superlattices, *Phys. Rev. B* **32**, 5138 (1985).
- [6] L. C. Andreani, A. Pasquarello, F. Bassani, Hole subbands in strained GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells: Exact solution of the effective-mass equation, *Phys. Rev. B* **36**, 5887 (1987).
- [7] L. C. Andreani, A. Pasquarello, Accurate theory of excitons in GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, *Phys. Rev. B* **42**, 8928 (1990).
- [8] F. Gygi, A. Baldereschi, Quasiparticle energies in semiconductors: Self-energy correction to the local-density approximation, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2160 (1989).
- [9] A. Pasquarello, L. C. Andreani, Variational calculation of Fano linewidth: Application to excitons in quantum wells, *Phys. Rev. B* **44**, 3162 (1991).

l'exciton à trou léger devient dégénéré avec le continuum de l'exciton à trou lourd et acquiert une largeur de résonance. Cet effet pose des défis pour le calcul, car les états de continuum sont difficiles à représenter dans un ensemble de bases fini. Je travaillais sur ce problème avec Alfredo Pasquarello, et les suggestions d'Alfonso nous ont aidés à choisir une base appropriée d'ondes planes également espacées en énergie, nous permettant de calculer l'effet de résonance de Fano avec une bonne précision [9].

À la fin de l'année 1992, je suis revenu en Italie et j'ai eu peu de contacts avec Alfonso depuis lors (à part quelques concours où il était membre du jury et moi candidat). Il m'a fallu beaucoup de temps pour réaliser l'ampleur et la profondeur de ses contributions à la physique de la matière condensée, d'abord en traitant des semi-conducteurs dans le cadre des équations de masse effective, puis avec des approches *ab initio* basées sur la DFT. Il fait partie des très rares physiciens à avoir une découverte clé imprimée sur un T-shirt, à savoir le point de Baldereschi de la zone de Brillouin. Ce dont je me souviens le plus à son sujet, c'est la clarté de ses explications lors des conférences et des séminaires, qui résultait d'une compréhension particulièrement profonde de la physique. Il n'a jamais été tenté par l'habitude de faire de la publicité ou de surestimer ses résultats. Son approche de la recherche était un exemple inspirant de rigueur scientifique et d'intégrité.

# Il Maestro

## Le Maître

---

Alfredo Pasquarello

---

E di colpo era lì sulla soglia della porta. Il sole, ormai basso sull'orizzonte, lo illuminava da dietro, ma la sua grande sagoma era inconfondibile, teneva la sua postura caratteristica con i piedi leggermente divaricati. Un'ulteriore conferma della sua identità veniva dal fumo di sigaretta che lo circondava. Eravamo all'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), era un sabato, probabilmente nel 1989 o nel 1990. Come succedeva spesso, ci trovavamo alla fine della giornata tra dottorandi italiani di Fisica per organizzare la serata. Il Professor Baldereschi non era sempre a Losanna, e quando c'era, non rispettava orari regolari. Mi era stato presentato nel 1987, al mio arrivo a Losanna, ma non era consuetudine che dottorandi e professori si parlassero. Eravamo quindi sorpresi di vedere che venisse verso di noi. Manifestamente, si stava prendendo una pausa e cercava di avviare una conversazione, ma solo per parlare del più e del meno. Era un primo piccolo segnale della sua umanità, che negli anni a venire mi sarebbe diventata sempre più evidente.

L'aura di Baldereschi era già nota fin dai miei tempi a Pisa. Le storie dei normalisti precedenti si tramandavano da una generazione di studenti all'altra. Si diceva che Baldereschi fosse stato ammesso alla Normale al terzo anno, evento più che raro, riservato a studenti eccezionali. Si sapeva anche che in seguito era stato negli Stati Uniti presso i prestigiosi Bell Laboratories. All'epoca non sapevo che il Professor Franco Bassani fosse stato il relatore della tesi di laurea di Baldereschi, così come lo è stato per me.

All'EPFL svolgevo la mia tesi sotto la supervisione del Professor Antonio Quattropani, e le occasioni in cui ho interagito con Baldereschi durante i miei studi di dottorato sono state piuttosto rare. In un lavoro che

Et tout à coup, il était là, sur le seuil de la porte. Le soleil, déjà bas sur l'horizon, l'éclairait par derrière, mais sa grande silhouette était clairement reconnaissable, avec sa posture caractéristique, les pieds légèrement écartés. Une autre confirmation de son identité venait de la fumée de cigarette qui l'entourait. Nous étions à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), c'était un samedi, probablement en 1989 ou en 1990. Comme cela arrivait souvent, nous étions entre doctorants italiens en physique à la fin de la journée pour organiser la soirée. Le Professeur Baldereschi n'était pas toujours à Lausanne, et lorsqu'il était là, il ne respectait pas d'horaires réguliers. Il m'avait été présenté en 1987, à mon arrivée à Lausanne, mais il n'était pas habituel que les doctorants et les professeurs se parlent. Nous étions donc surpris de le voir venir vers nous. Manifestement, il prenait une pause et cherchait à engager une conversation, mais seulement pour échanger quelques mots sur des sujets anodins. C'était un premier petit signe de son humanité, qui allait devenir de plus en plus évidente pour moi dans les années à venir.

L'aura de Baldereschi était déjà connue depuis mes années à Pise. Les histoires des anciens normaliens se transmettaient d'une génération d'étudiants à l'autre. Le bruit courait que Baldereschi avait été admis à l'École Normale en troisième année, un événement rare, réservé aux étudiants exceptionnels. On savait aussi qu'il avait ensuite travaillé aux États-Unis, aux prestigieux Laboratoires Bell. À l'époque, je ne savais pas que le Professeur Franco Bassani avait été le directeur de thèse de Baldereschi, tout comme il l'a été pour moi.

À l'EPFL, je faisais ma thèse sous la direction du Professeur Antonio Quattropani, et les occasions où j'ai

portavo avanti parallelamente alla mia tesi di dottorato insieme a Lucio Claudio Andreani e Ryszard Bucko, studiavo i difetti accettori nei pozzi quantici utilizzando la teoria della massa effettiva, un tema di ricerca che si poteva considerare come un'estensione del problema degli accettori nei semiconduttori estesi, brillantemente trattato in precedenza da Baldereschi e Lipari [1]. Avevamo identificato l'Hamiltoniana compatibile con le simmetrie del pozzo quantico, seguendo la stessa metodologia proposta da Baldereschi e Lipari. Era la prima volta che citavo un suo lavoro nelle referenze di un mio articolo. A un certo punto, l'ho incontrato per avere un riscontro sulla nostra ricerca, ma questa prima discussione scientifica è stata un po' infelice perché ho avuto l'impressione di non essere riuscito a spiegarmi bene.

In quel periodo, Baldereschi teneva un corso per dottorandi sui gruppi finiti di simmetria. Aveva un modo molto carismatico di porsi come insegnante, introducendo delle lunghe pause nei punti chiave della presentazione. La parte che mi è rimasta più impressa riguardava l'identificazione dei parametri indipendenti nelle quantità fisiche tensoriali in presenza di una simmetria data. I concetti trasmessi da questo corso mi sono stati molto utili e sono riuscito a metterli in pratica da subito nel mio lavoro di tesi, poi successivamente anche in alcune parti della mia ricerca. Quindi, fu del tutto naturale proporre Baldereschi come membro della giuria del mio esame di tesi. Chiaramente, lui sarebbe stato in grado di scovare qualunque errore di ragionamento nella mia tesi, e la mia preoccupazione aumentò ulteriormente quando arrivò alla seduta con una copia della mia tesi da cui spuntavano almeno una dozzina di post-it gialli. Per fortuna, si limitò a pormi una sola domanda di chiarimento e l'esame scivolò via tranquillo.

Nel 1989 Baldereschi lanciò l'operazione IRRMA (Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux). L'iniziativa fu avviata prima ancora della convenzione tra le università, grazie a un finanziamento del Fondo nazionale svizzero. Vari gruppi con diversi orientamenti di ricerca computazionale furono creati dal nulla. Per me, come dottorando all'EPFL, questa operazione di così ampio respiro esercitò un grande fascino, soprattutto per la volontà evidente di perseguire l'eccellenza ai più alti

interagi con Baldereschi pendant mes études doctorales ont été assez rares. Dans le cadre d'un travail que je menais parallèlement à ma thèse de doctorat avec Lucio Claudio Andreani et Ryszard Bucko, j'étudiais les défauts accepteurs dans les puits quantiques en utilisant la théorie de la masse effective, un sujet de recherche qui pouvait être considéré comme une extension du problème des accepteurs dans les semi-conducteurs étendus, brillamment traité auparavant par Baldereschi et Lipari [1]. Nous avons identifié l'hamiltonien compatible avec les symétries du puits quantique, en suivant la même méthodologie que celle proposée par Baldereschi et Lipari. C'était la première fois que je citais un travail de Baldereschi dans les références d'un de mes articles. À un moment donné, je l'ai rencontré pour avoir un retour sur notre recherche, mais cette première discussion scientifique a été un peu malheureuse, car j'ai eu l'impression de ne pas avoir su bien m'expliquer.

À cette époque, Baldereschi donnait un cours aux doctorants sur les groupes finis de symétrie. Il avait une manière très charismatique de se présenter comme enseignant, en introduisant de longues pauses aux points clés de la présentation. La partie qui m'a le plus marqué concernait l'identification des paramètres indépendants dans les quantités physiques tensorielles en présence d'une symétrie donnée. Les concepts transmis par ce cours m'ont été très utiles et j'ai pu les mettre en pratique immédiatement dans mon travail de thèse, puis plus tard dans certaines parties de ma recherche. Il a donc été tout à fait naturel de proposer Baldereschi comme membre du jury de mon examen de thèse. Il était évident que Baldereschi aurait été capable de repérer la moindre erreur de raisonnement dans ma thèse, et ma préoccupation a augmenté encore lorsqu'il est arrivé à la séance avec une copie de ma thèse d'où dépassaient au moins une douzaine de post-its jaunes. Heureusement, il s'est limité à me poser une seule question de clarification, et l'examen s'est déroulé tranquillement.

En 1989, Baldereschi a lancé l'opération IRRMA (Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux). L'initiative a commencé avant même la convention entre les universités, grâce à un financement du Fonds national suisse. Plusieurs groupes



Maglietta distribuita all'Italian-Swiss Workshop on High-Performance Computing in Materials Science, Palau, Sardegna (2006) | T-shirt distribué à l'Italian-Swiss Workshop on High-Performance Computing in Materials Science, Palau, Sardaigne (2006).

livelli, una caratteristica costante di tutte le iniziative di Baldereschi di cui sono stato testimone. L'arrivo di Roberto Car a Losanna come direttore di IRRMA mi ha permesso di avviare la mia ricerca nell'ambito della fisica computazionale *ab initio*.

Nel riorientamento della mia linea di ricerca rispetto ai miei studi di dottorato, un ruolo può essere attribuito anche al ciclo di conferenze Italian-Swiss Workshops on Computational Materials Science, anch'esse legate a Baldereschi e organizzate intorno alla data del suo compleanno, in settembre. La prima conferenza del ciclo si tenne all'Hotel Flamingo nel 1990 e fu per me un'occasione determinante per incontrare vari scienziati di grosso calibro in quest'area di ricerca. Ricordo con piacere le magliette distribuite alla fine di questi incontri. In particolare, la maglietta della conferenza del 2006, organizzata a Palau per festeggiare il suo 60° compleanno, mette in risalto il Baldereschi point (BP) [2].

In quel periodo, mi stavo avvicinando ai metodi computazionali basati sui principi primi. Avevo stampato

ayant des orientations différentes en matière de recherche computationnelle ont été créés à partir de rien. Pour moi, en tant que doctorant à l'EPFL, cette initiative de si grande envergure a exercé une grande fascination, surtout en raison de la volonté évidente de poursuivre l'excellence au plus haut niveau, une caractéristique constante de toutes les initiatives de Baldereschi dont j'ai été témoin. L'arrivée de Roberto Car à Lausanne en tant que directeur de l'IRRMA m'a permis de commencer ma recherche dans le domaine de la physique computationnelle *ab initio*.

Dans la réorientation de ma ligne de recherche par rapport à mes études doctorales, un rôle peut être attribué au cycle de conférences Italian-Swiss Workshops on Computational Materials Science, également lié à Baldereschi et organisé autour de la date de son anniversaire en septembre. La première conférence de ce cycle s'est tenue à l'Hôtel Flamingo en 1990 et a été pour moi une occasion déterminante de rencontrer plusieurs scientifiques de haut calibre dans ce domaine de recherche. Je me souviens avec plaisir des T-shirts qui étaient distribués à la fin de ces rencontres. En particulier, le T-shirt de la conférence de 2006, organisée à Palau pour célébrer son 60<sup>e</sup> anniversaire, met en avant le point de Baldereschi (Baldereschi point « BP ») [2].

À cette époque, je m'approchais des méthodes computationnelles basées sur les premiers principes. J'avais imprimé le code en Fortran parce que je voulais comprendre en détail comment ces calculs étaient réalisés. Un travail ennuyeux, mais indispensable à mes yeux. Je l'étudiais constamment, parfois même à la cafétéria pour rompre la monotonie. Un jour à l'Arcadie, une cafétéria de l'EPFL située près du Département de physique, Baldereschi est venu s'asseoir à ma table. Bien qu'il ait fait partie du jury de ma thèse de doctorat, nous ne nous parlions presque jamais. Il m'a posé des questions sur le code Fortran, et je lui ai expliqué de quoi il s'agissait. J'ai cru apercevoir un signe d'approbation, mais c'était peut-être juste une impression. En fait, je ne me souviens pas avoir rencontré quelqu'un de plus discret que lui. Bien des années plus tard, lors d'une conversation que j'ai eue avec lui, j'ai mieux compris. Baldereschi a exprimé alors la conviction qu'il était nécessaire de s'engager durablement pour obtenir des résultats significatifs.

il codice in Fortran perché volevo capire in dettaglio come si svolgevano questi calcoli. Un lavoro noioso, ma ai miei occhi indispensabile. Lo studiavo continuamente, a volte anche in caffetteria per spezzare la monotonia. Un giorno all'Arcadie, una caffetteria dell'EPFL situata vicino al Dipartimento di Fisica, Baldereschi venne a sedersi al mio tavolo. Nonostante avesse fatto parte della giuria del mio esame di dottorato, non ci parlavamo quasi mai. Mi chiese del codice Fortran, e gli spiegai di che cosa si trattava. Mi sembrò di scorgere un cenno di approvazione, ma forse era solo un'impressione. In effetti, non ricordo di avere conosciuto persone più discrete di lui. Molti anni dopo, durante una conversazione che ebbi con lui, capii meglio. Baldereschi espresse allora la convinzione che fosse necessario impegnarsi duramente per ottenere risultati significativi.

In seguito, partii per i Bell Laboratories. Seguendo le orme del Maestro? È difficile decifrare influenze e motivazioni di scelte particolari, ma di sicuro non ci fu nessuna raccomandazione specifica in tal senso da parte di Baldereschi. Nel 1993 tornai a Losanna, nel gruppo di Roberto Car. Le interazioni dirette con Baldereschi furono sporadiche, praticamente nulle. Ho avuto invece degli scambi fruttuosi con Andrea Dal Corso, anche lui a IRRMA in quel periodo come postdoc nel gruppo di Baldereschi. Questo rapporto portò alla pubblicazione di articoli in cui Baldereschi e io figuriamo come coautori [3,4], ma non vi fu una vera collaborazione. In realtà, non mi capitò mai di partecipare personalmente a una di quelle interminabili riunioni con Baldereschi, un mito che i suoi collaboratori propagavano in maniera quasi unanime. L'unica vera interazione di quegli anni fu legata al corso di *Simulation numérique de systèmes physiques*, che Baldereschi teneva per gli studenti del quarto anno, quelli che oggi chiameremmo di "master". Baldereschi mi chiese di intervenire agli esami come esperto, un compito a cui fui poi chiamato per vari anni di fila. All'epoca, il corso era annuale e gli studenti preparavano un progetto numerico, che veniva poi presentato e discusso all'esame. Prendevo il mio incarico molto sul serio, e Baldereschi mi lasciava interrogare gli studenti in dettaglio. Dopo una discussione tra noi, i voti che Baldereschi finiva per assegnare erano regolarmente più alti di quelli che avrei inizialmente proposto io. Così mi persuasi che Baldereschi fosse

Par la suite, je suis parti pour les Laboratoires Bell. Était-ce pour suivre les traces du Maître ? Il est difficile de déchiffrer les influences et les motivations de certains choix, mais il n'y a certainement pas eu de recommandation spécifique de la part de Baldereschi dans ce sens. En 1993, je suis revenu à Lausanne, dans le groupe de Roberto Car. Les interactions directes avec Baldereschi étaient sporadiques, pratiquement inexistantes. J'ai eu en revanche des interactions fructueuses avec Andrea Dal Corso, également à IRRMA à l'époque comme postdoctorant dans le groupe de Baldereschi. Cette collaboration a conduit à la publication d'articles dans lesquels Baldereschi et moi-même figurons comme co-auteurs [3,4], mais il n'y a pas eu de véritable collaboration. En réalité, il ne m'est jamais arrivé de participer personnellement à l'une de ces interminables réunions avec Baldereschi, un mythe que ses collaborateurs propageaient quasi unanimement. La seule véritable interaction de ces années était liée au cours intitulé *Simulation numérique de systèmes physiques*, que Baldereschi donnait aux étudiants de quatrième année, ceux que l'on appellerait aujourd'hui des étudiants en master. Baldereschi m'a demandé d'intervenir lors des examens en tant qu'expert, une tâche qui s'est répétée pendant plusieurs années consécutives. À l'époque, le cours était annuel et les étudiants préparaient un projet numérique qu'ils présentaient et défendaient lors de l'examen. Je prenais cette tâche très au sérieux, et Baldereschi me laissait interroger les étudiants en détail. Après une discussion entre nous, les notes que Baldereschi attribuait finissaient régulièrement par être plus élevées que celles que j'aurais proposées initialement. Ainsi, je me suis persuadé que Baldereschi était un professeur indulgent, une personne de bon cœur, en parfaite adéquation avec son intervention lors de mon examen de thèse.

L'année 1998 a été décisive pour ma carrière de chercheur indépendant. Roberto Car était sur le point de partir pour Princeton et j'ai remporté un concours du Fonds national suisse pour mener mon activité à l'EPFL. À ce moment-là, je me suis senti pleinement adopté par Baldereschi. En effet, je n'ai pas senti cela comme une simple acceptation de la part d'un collègue senior, mais bien comme une véritable adoption : il m'a accueilli comme si j'avais toujours été



un professore indulgente, una persona di animo buono, perfettamente in sintonia con il suo intervento al mio esame di tesi.

L'anno determinante per la mia carriera da ricercatore indipendente fu il 1998. Roberto Car stava per partire per Princeton e io vinsi un concorso del Fondo nazionale svizzero per svolgere la mia attività all'EPFL. A quel punto, mi sentii pienamente adottato da Baldereschi. In effetti, non lo percepii come una semplice accettazione da parte di un collega senior, ma proprio come una vera adozione: fui accolto da lui come se fossi stato da sempre uno dei suoi dottorandi o uno dei suoi fedeli collaboratori, e questo nonostante le nostre interazioni scientifiche fossero state in realtà piuttosto limitate. Solo allora Baldereschi divenne Alfonso per me. Aveva preparato subito un piano per consentirmi di insegnare. Inizialmente, mi permise di tenere un ciclo di lezioni nell'ambito del suo corso di *Simulation*. L'anno successivo, mi cedette l'intero corso e diventai il titolare. In quella occasione, mi mise a disposizione il materiale che aveva raccolto negli anni. Inoltre, ho sempre potuto contare sui suoi consigli in tutte le fasi critiche della mia carriera all'EPFL. Mi viene in mente una occasione in particolare. Prima di sostenere il concorso per professore del Fondo nazionale svizzero, l'EPFL dovette validare la mia candidatura. Il Presidente Jean-Claude Badoux volle che tutti i candidati tenessero "una lezione professorale". Quando Alfonso seppe il titolo della lezione che dovevo preparare, mi diede delle indicazioni preziose che mi permisero di rispondere al meglio alle aspettative. Anche nelle fasi successive di promozione, insisteva per visionare il curriculum e le presentazioni, e mi dava consigli su come esporre nel miglior modo possibile tutti i punti rilevanti. Questo supporto costante che portò alla mia carriera fu del tutto disinteressato, un atto di pura generosità. In seguito, mi sono reso conto che, come Direttore dell'Institut de théorie des phénomènes physiques (ITP), si assumeva sempre la responsabilità di prendere sotto la sua ala i giovani colleghi. Il suo sostegno e la sua generosità andavano ben oltre i doveri di un direttore. Era evidente che Alfonso possedeva un'inclinazione naturale, una vocazione, che lo spingeva a promuovere le nuove generazioni. Si trattava della stessa disposizione che si manifestava anche attraverso l'insegnamento, al quale Alfonso

l'un de ses doctorants ou l'un de ses collaborateurs fidèles, et cela malgré le fait que nos interactions scientifiques aient été en réalité plutôt limitées. Ce n'est qu'à ce moment-là que Baldereschi est devenu Alfonso pour moi. Il a immédiatement préparé un plan pour me permettre d'enseigner. Au début, il m'a permis d'enseigner un cycle de leçons dans le cadre de son cours de *Simulation*. L'année suivante, il m'a cédé le cours entier, et j'en suis devenu le titulaire. À cette occasion, il m'a mis à disposition le contenu qu'il avait rassemblé au fil des années. Par ailleurs, j'ai toujours pu compter sur ses conseils à toutes les étapes critiques de ma carrière à l'EPFL. Une occasion en particulier me vient à l'esprit. Avant de passer le concours de professeur du Fonds national suisse, il a fallu que l'EPFL valide ma candidature. Le président, Jean-Claude Badoux, voulait que tous les candidats fassent une « leçon professorale ». Quand Alfonso a appris le titre de la présentation que je devais préparer, il m'a donné des indications précieuses qui m'ont permis de répondre parfaitement aux attentes. Même lors des étapes suivantes de promotion, il insistait pour revoir mon curriculum et mes présentations, prodiguant des conseils pour mettre en avant tous les points pertinents de la meilleure manière possible. Ce soutien constant qu'il apportait à ma carrière était totalement désintéressé, un acte de pure générosité. Par la suite, je me suis rendu compte qu'en tant que directeur de l'Institut de théorie des phénomènes physiques, il prenait toujours la responsabilité de prendre sous son aile les jeunes collègues. Son soutien et sa générosité allaient bien au-delà des fonctions d'un directeur. Il était évident qu'Alfonso possédait une inclination naturelle, une véritable vocation, qui le poussait à promouvoir les nouvelles générations. C'était cette même disposition qui se manifestait également dans son enseignement, auquel il avait toujours accordé une grande attention. Au-delà de ses contributions en tant que grand scientifique, j'aime surtout me souvenir de cette qualité qui, avant tout, reconnaissait l'importance des personnes et mettait en valeur son humanité.

Alfonso avait une vaste connaissance de la physique et j'aimais discuter avec lui de la recherche que mon groupe menait. Son nom apparaît très souvent dans les remerciements de mes publications.

aveva sempre dedicato una grande attenzione. Al di là dei suoi contributi da grande scienziato, a me piace ricordare proprio questa sua qualità che riconosceva *in primis* l'importanza delle persone e che esaltava la sua umanità.

Alfonso aveva una vasta conoscenza di fisica e mi faceva piacere discutere con lui la ricerca che il mio gruppo stava conducendo. Il suo nome appare molto spesso tra i ringraziamenti nelle mie pubblicazioni. Tuttavia, non ho mai avuto il piacere di portare avanti un progetto di ricerca veramente in comune con lui. C'è stata una sola occasione in cui ci sono andato vicino. Correva l'anno 2001. Alfonso mi chiese di tenere un occhio sul dottorando Rainer Haerle, che era sotto la sua responsabilità. In effetti, il suo ufficio, lo storico PH<sup>H2</sup>424, era a Fisica Teorica, mentre lo studente e io ci trovavamo all'altra estremità del campus dell'EPFL, nell'ambiente di IRRMA, che all'epoca era ospitato nell'edificio Physics Plasma Hall (PPH). Dopo alcuni incontri con Rainer, riuscimmo a definire un progetto che mettesse a profitto le nostre relative competenze. Il progetto prevedeva la generazione di varie strutture di carbonio amorfo e il calcolo degli spostamenti dei livelli 1s di carbonio, con l'obiettivo di distinguere i carboni ibridizzati  $sp^2$  e  $sp^3$ . Ottenemmo dei risultati interessanti, e riuscimmo anche a coinvolgere Elisa Riedo, che possedeva dei risultati sperimentali con cui ci potevamo confrontare. Alfonso intervenne nella fase finale, dopo che avevamo completato la prima bozza. Conoscendo le tempistiche di Alfonso, avevo messo in conto un lungo tempo di attesa e la richiesta di modifiche importanti al lavoro. Invece, tutto si svolse senza intoppi. Rainer s'incontrò con Alfonso per discutere la bozza e tornò con alcune richieste tutte volte a spiegare i risultati *ab initio* con dei modelli elettrostatici più semplici. Osservazioni giuste, da vero fisico. Eravamo sollevati che tutto il resto non richiedesse interventi. Implementammo le richieste di Alfonso e il lavoro fu rapidamente accettato [5]. Certo, ciò portò a un lavoro firmato da coautore con Alfonso, ma forse fu un'occasione persa per stabilire una vera collaborazione.

In retrospettiva, non posso fare a meno di notare che l'attività che ho svolto negli anni presenta molti punti di contatto con la ricerca di Alfonso Baldereschi. In questo paragrafo preferisco utilizzare il suo nome

Cependant, je n'ai jamais eu le plaisir de mener un projet de recherche véritablement en commun avec lui. Il n'y a eu qu'une seule occasion où je m'en suis approché. C'était en 2001. Alfonso m'a demandé de garder un œil sur le doctorant Rainer Haerle, dont il portait la responsabilité. En effet, son bureau, le légendaire PH<sup>H2</sup>424, se trouvait dans le Département de physique, tandis que l'étudiant et moi étions à l'autre extrémité du campus de l'EPFL, dans les locaux de l'IRRMA, qui était alors hébergé dans le Physics Plasma Hall (PPH). Après quelques interactions avec Rainer, nous avons réussi à définir un projet qui mettait à profit nos compétences respectives. Le projet consistait à générer différentes structures de carbone amorphe et à calculer les déplacements des niveaux 1s du carbone, dans le but de distinguer les carbones hybridés  $sp^2$  et  $sp^3$ . Nous avons obtenu des résultats intéressants et avons également réussi à impliquer Elisa Riedo, qui possédait des résultats expérimentaux avec lesquels nous pouvions nous confronter. Alfonso est intervenu dans la phase finale après que nous avons terminé le premier jet du manuscrit. Connaissant la gestion du temps d'Alfonso, je m'étais préparé à une longue attente et à des demandes de modifications importantes du travail. Cependant, tout s'est déroulé sans accroc. Rainer a rencontré Alfonso pour discuter de l'ébauche et est revenu avec quelques demandes visant à expliquer les résultats *ab initio* par des modèles électrostatiques plus simples. Des observations justes, dignes d'un vrai physicien. Nous avons été soulagés que tout le reste ne nécessitait aucune intervention. Nous avons intégré les demandes d'Alfonso et le travail a rapidement été accepté [5]. Certes, cela a donné un travail signé en tant que coauteur avec Alfonso, mais peut-être une occasion manquée d'établir une véritable collaboration.

Rétrospectivement, je ne peux m'empêcher de constater que l'activité que j'ai menée au fil des ans présente de nombreux points de contact avec la recherche d'Alfonso Baldereschi. Dans ce paragraphe, je préfère utiliser son nom complet, car le récit établit des liens avec son héritage scientifique. Pour ma part, il ne s'est jamais agi de choix conscients, et pour chaque direction que j'ai choisi de suivre, je peux invoquer de bonnes raisons scientifiques. Cependant, les correspondances sont si nombreuses qu'il n'est

completo, poiché il resoconto stabilisce legami con il suo lascito scientifico. Da parte mia, non si è mai trattato di scelte consapevoli, e per ogni direzione che ho deciso di seguire posso invocare buone ragioni scientifiche. Tuttavia, le corrispondenze sono così numerose che non è ragionevole escludere che io sia stato influenzato dal lavoro di Alfonso Baldereschi. Ho già menzionato il lavoro sugli accettori, ma non è stato l'unico in cui ho seguito, in un qualche modo, i suoi passi. Già da post-doc non ero indifferente agli importanti sviluppi sulla teoria della polarizzazione portati avanti dalla collaborazione che comprendeva Raffaele Resta, Michel Posternak e Alfonso Baldereschi [6]. Utilizzai il concetto di fase di Berry per ottenere lo spettro infrarosso della silice amorfa. Più avanti nel tempo, queste idee ispirarono anche lo sviluppo di campi elettrici finiti in supercelle sottoposte a condizioni al bordo periodiche. In seguito, mi sono interessato ai funzionali ibridi per determinare i livelli energetici dei difetti, e la referenza per lo scambio di Fock calcolato in una base di onde piane era un lavoro di François Gygi, svolto durante il suo dottorato sotto la supervisione di Alfonso Baldereschi [7]. In particolare, come non ricordare l'integrazione della divergenza negli integrali di scambio tramite la tecnica elegante che consiste nel sottrarre la dipendenza analitica dall'integrale numerico per poi integrarla separatamente, metodo successivamente precisato in un articolo di Alfonso Baldereschi, scritto in collaborazione con Sandro Massidda e Michel Posternak [8]. Questa stessa problematica è emersa nella ricerca del mio gruppo in diverse circostanze, e ci siamo appoggiati sulla metodologia introdotta nei lavori di Alfonso Baldereschi. In seguito, mi sono interessato ai *band offsets* alle interfacce semiconduttore-ossido calcolati sia con funzionali ibridi sia con metodi di teoria delle perturbazioni a molti corpi. Anche in questo caso, una delle referenze chiave era un articolo di Alfonso Baldereschi, realizzato in collaborazione con Stefano Baroni e Raffaele Resta [9]. Abbiamo utilizzato come banco di prova le eterostrutture composte da semiconduttore con parametri reticolari simili per testare schemi avanzati di struttura elettronica, e ancora una volta potevamo contare sull'ottima recensione che Alfonso Baldereschi aveva realizzato precedentemente con Maria Peressi e Nadia Binggeli utilizzando funzionali di densità semilocali [10]. Infine, come non menzionare

pas raisonnable d'exclure que j'aie été influencé par l'œuvre d'Alfonso Baldereschi. J'ai déjà mentionné le travail sur les accepteurs, mais ce n'est pas le seul dans lequel j'ai suivi, d'une manière ou d'une autre, les pas d'Alfonso Baldereschi. Déjà en tant que post-doctorant, je n'étais pas indifférent aux importants développements de la théorie de la polarisation réalisés par la collaboration entre Raffaele Resta, Michel Posternak et Alfonso Baldereschi [6]. J'ai utilisé le concept de phase de Berry pour obtenir le spectre infrarouge de la silice amorphe. Plus tard, ces idées ont également inspiré le développement de champs électriques finis dans des supercellules soumises à des conditions aux bords périodiques. Ensuite, je me suis intéressé aux fonctionnelles hybrides pour déterminer les niveaux d'énergie des défauts, et la référence pour l'échange de Fock calculé dans une base d'ondes planes était un travail de François Gygi, réalisé pendant son doctorat sous la supervision d'Alfonso Baldereschi [7]. En particulier, comment ne pas mentionner l'intégration de la divergence dans les intégrales d'échange par la technique élégante consistant à soustraire la dépendance analytique de l'intégrale numérique et à l'intégrer ensuite séparément, méthode précisée dans un article ultérieur d'Alfonso Baldereschi rédigé en collaboration avec Sandro Massidda et Michel Posternak [8]. Cette même problématique est apparue dans les recherches de mon groupe à plusieurs reprises, et nous nous sommes appuyés sur la méthodologie introduite dans les travaux d'Alfonso Baldereschi. Par la suite, je me suis intéressé aux décalages de bande aux interfaces semi-conducteur-oxyde, calculés aussi bien avec des fonctionnelles hybrides qu'avec des méthodes de théorie des perturbations à plusieurs corps. Dans ce cas également, l'une des références clés était un article d'Alfonso Baldereschi, réalisé en collaboration avec Stefano Baroni et Raffaele Resta [9]. Nous avons utilisé comme banc d'essai les hétérostructures composées de semi-conducteurs avec des paramètres de réseau similaires pour tester des schémas avancés de structure électronique, et encore une fois, nous pouvions compter sur la revue approfondie qu'Alfonso Baldereschi avait réalisée précédemment avec Maria Peressi et Nadia Binggeli, en utilisant des fonctionnelles de densité semi-locales [10]. Enfin, comment ne pas mentionner les résultats obtenus par François Gygi et Alfonso Baldereschi concernant l'effet

i risultati ottenuti da François Gygi e Alfonso Baldereschi riguardanti l'effetto dello scambio nel determinare l'apertura della banda proibita [11], poi estesi in collaborazione con Vincenzo Fiorentini [12]. Questi risultati sono tornati a essere di attualità con l'uso dei funzionali ibridi e possono essere considerati seminali per lo sviluppo di *dielectric-dependent hybrid functionals*, che permettono di ottenere stime molto accurate della banda proibita. E che ne è allora del famoso Baldereschi point [2]? In effetti, c'è stata anche nella mia ricerca un'occasione in cui questo punto è stato sfruttato per velocizzare i calcoli di convergenza nel limite di grandi supercelle di germanio. Tuttavia, con questo resoconto, ci tenevo a mettere in luce che la ricerca di Alfonso Baldereschi comprende tanti contributi importanti, alcuni dei quali, sebbene meno noti, sono comunque stati d'avanguardia. Dal mio punto di vista, rappresentano una fonte preziosissima d'ispirazione per definire nuove linee di ricerca.

I miei rapporti con Alfonso non si limitarono a questioni scientifiche o didattiche. Quando entrai all'EPFL da ricercatore indipendente, decisi di associare il mio piccolo gruppo di ricerca all'IRRMA. Dopo la partenza di Roberto Car per Princeton, Alfonso fu nominato direttore *ad interim*. In quei giorni il futuro di IRRMA era piuttosto incerto, e Alfonso aveva ben colto questo sentimento generale. Mi ricordo ancora il discorso di insediamento in cui motivava il gruppo di ricercatori: "*Que l'IRRMA continue sur sa lancée !*" [13].

Il 2003 fu un anno delicato per la Fisica Teorica a Losanna. I dipartimenti dell'EPFL furono completamente ristrutturati e, in particolare, fu realizzata la fusione tra il Dipartimento di Fisica dell'EPFL e quello dell'Università di Losanna (UNIL). Per ciò che riguarda la Fisica Teorica a Losanna, le *maître du jeu* era Alfonso. Fu lui a gestire la transizione. Scomparve lo storico Institut de physique théorique e venne inaugurato il nuovo Institut de théorie des phénomènes physiques (ITP), che comprendeva anche i fisici teorici precedentemente all'UNIL. Alfonso era il capo indiscusso di questo nuovo istituto, che chiamava la *Maison de la théorie* [14], e ne fu formalmente eletto direttore. Votammo tutti unanimemente in suo favore, ciononostante ci fu

de l'échange dans la détermination de l'ouverture de la bande interdite [11], qui ont ensuite été étendus en collaboration avec Vincenzo Fiorentini [12]. Ces résultats sont redevenus d'actualité avec l'utilisation des fonctionnelles hybrides et peuvent être considérés comme fondamentaux pour le développement des fonctionnelles hybrides non empiriques dépendant du diélectrique, qui permettent d'obtenir des estimations très précises de la bande interdite. Et qu'en est-il alors du célèbre point de Baldereschi [2] ? En effet, dans ma propre recherche, il y a eu une occasion où ce point a été utilisé pour accélérer les calculs de convergence dans les grandes supercellules de germanium. Toutefois, à travers ce récit, je tenais à mettre en lumière le fait que la recherche d'Alfonso Baldereschi comprend de nombreuses contributions importantes, dont certaines, bien que moins connues, ont été avant-gardistes. De mon point de vue, elles représentent une source précieuse d'inspiration pour définir de nouvelles lignes de recherche.

Mes interactions avec Alfonso ne se sont pas limitées uniquement à des questions scientifiques ou pédagogiques. Lorsque j'ai rejoint l'EPFL en tant que chercheur indépendant, j'ai décidé d'associer mon petit groupe de recherche à l'IRRMA. Après le départ de Roberto Car pour Princeton, Alfonso a été nommé directeur par intérim. À cette époque, l'avenir de l'IRRMA était plutôt incertain, et Alfonso avait parfaitement saisi ce sentiment général. Je me souviens encore de son discours d'investiture, où il motivait le groupe de chercheurs : « *Que l'IRRMA continue sur sa lancée !* ».

L'année 2003 a été délicate pour la Physique Théorique à Lausanne. Les Départements de l'EPFL ont été complètement réorganisés et, en particulier, la fusion entre le Département de physique de l'EPFL et celui de l'Université de Lausanne (UNIL) a été mise en place. En ce qui concerne la Physique Théorique à Lausanne, le *maître du jeu* était Alfonso. C'était lui qui a géré la transition. L'historique Institut de physique théorique a disparu et le nouvel Institut de théorie des phénomènes physiques (ITP) a été inauguré, comprenant également les physiciens théoriciens précédemment à l'UNIL. Alfonso était le chef incontesté de ce nouvel institut, qu'il appelait la *Maison de la théorie*, et il en a été formellement élu directeur. Nous avons voté à l'unanimité en sa faveur, mais il y a

una scheda bianca. Si trattava del suo voto! In quel periodo, c'erano delle questioni personali delicate che si erano venute a creare al momento della transizione, ma Alfonso seppe risolverle dietro le quinte, senza fare clamore. L'istituto poté così partire con basi sane, senza conflitti tra i suoi membri. Alfonso si rivelò un ottimo direttore, non c'erano lamentele e tutti i membri dell'istituto potevano lavorare nelle migliori condizioni.

Verso la fine del suo secondo mandato di quattro anni, si rese necessario trovare un nuovo direttore. In effetti, Alfonso non avrebbe potuto completare un terzo mandato prima del suo ritiro. In una conversazione con lui, capii che vedeva di buon occhio che io mi presentassi come candidato. Lo formulo in questo modo perché non fu un suggerimento diretto, non mi ricordo più come mi portò a percepire questa sua idea. In ogni caso, la direzione dell'istituto non era una delle mie preoccupazioni in quel momento e senza quella conversazione, apparentemente casuale, non mi sarebbe neppure venuto in mente di propormi. Dopo essermi convinto, verificai, su consiglio di Alfonso, che gli altri colleghi fossero favorevoli alla mia candidatura. All'elezione, votai anch'io scheda bianca.

Poco dopo – era ormai l'anno 2010 – ci fu il passaggio di consegne. Condussi la gestione dell'istituto con lo stesso spirito con cui aveva operato Alfonso, in piena continuità e senza mai riscontrare opposizioni all'interno dell'istituto. Una conseguenza del diventare direttore fu che avevo la responsabilità degli aspetti legati alla fine del mandato di Alfonso all'EPFL. Mi trovai subito con il compito difficilissimo di preparare una *laudatio*, poche righe che dovevano descrivere l'operato di una vita intera [15]. Poi, nel settembre del 2011, fui uno degli organizzatori di un simposio in suo onore. Vennero in tanti: collaboratori, colleghi, studenti e amici da tutto il mondo.

Dopo la fine del suo mandato all'EPFL, Alfonso veniva sempre meno spesso a Losanna. Quando ci vedevamo, era tutto come prima. Parlavamo per ore, scambiandoci le nostre idee su tante questioni diverse, dai progetti di ricerca alle faccende dell'EPFL, ma anche sui fatti quotidiani. Visto che arrivava sempre alla fine della giornata, spesso si continuava fin dopo le 8 di

tout de même eu un bulletin blanc. Il s'agissait de son propre vote ! À cette époque, des problèmes personnels délicats s'étaient présentés lors de la transition, mais Alfonso a su les résoudre en coulisses, sans faire de vagues. L'institut a ainsi pu démarrer sur des bases saines, sans conflits entre ses membres. Alfonso s'est avéré être un très bon directeur, il n'y a pas eu de plaintes et tous les membres de l'institut ont pu travailler dans les meilleures conditions.

Vers la fin de son second mandat de quatre ans, il devenait nécessaire de trouver un nouveau directeur. En effet, Alfonso ne pouvait pas compléter un troisième mandat avant son départ à la retraite. Lors d'une conversation avec lui, j'ai compris qu'il verrait d'un bon œil ma candidature. Je le formule ainsi car il ne s'agissait pas d'une suggestion explicite, je ne me souviens plus comment il m'a amené à percevoir cette idée qui était la sienne. Quoi qu'il en soit, la direction de l'institut n'était pas une de mes préoccupations à ce moment-là, et sans cette conversation apparemment fortuite, il ne me serait pas venu à l'esprit de me présenter. Après m'être convaincu, j'ai vérifié, sur les conseils d'Alfonso, que les autres collègues étaient favorables à ma candidature. Lors de l'élection, j'ai moi aussi voté blanc.

Peu de temps après – c'était déjà l'année 2010 – il y a eu le passage de relais. J'ai assumé la gestion de l'institut avec le même esprit qu'Alfonso, dans une continuité totale et sans jamais y rencontrer d'oppositions. L'une des conséquences de devenir directeur a été que j'étais responsable des aspects liés à la fin du mandat d'Alfonso à l'EPFL. Je me suis retrouvé rapidement avec la tâche extrêmement difficile de préparer une *laudatio*, quelques lignes devant décrire l'œuvre d'une vie entière (en exergue). Puis, en septembre 2011, j'ai été l'un des organisateurs d'un symposium en son honneur. De nombreuses personnes sont venues : collaborateurs, collègues, étudiants et amis du monde entier.

Après la fin de son mandat à l'EPFL, Alfonso venait de moins en moins souvent à Lausanne. Lorsque nous voyions, tout était comme avant. Nous parlions pendant des heures, échangeant nos idées sur de nombreux sujets différents, des projets de recherche aux affaires de l'EPFL, mais aussi sur les faits quotidiens. Comme il venait toujours à la fin de la journée,



## Laudatio pour Alfonso Baldereschi à la fin de son mandat de professeur à l'EPFL

*En témoignage de reconnaissance et d'admiration pour sa contribution marquante dans le domaine de la physique théorique de la matière condensée, son rôle central dans la constitution d'un pôle de recherche d'excellence en physique numérique des matériaux en Suisse romande, son profond*

*dévouement à l'enseignement de la physique tant au niveau de cours de base que de cours de spécialisation, son engagement sans faille à la tête d'instituts et du Département de physique, et son apport continuuel à la valorisation de la relève scientifique.*

sera. Ci davamo sempre appuntamento per andare a pranzo il giorno dopo. Certe volte veniva, certe volte no. Si andava regolarmente all'Atlantique, un'altra caffetteria dell'EPFL, dove venivano serviti piatti cinesi che Alfonso apprezzava. E poi, le pause caffè. Inizialmente, alla caffetteria di Fisica al terzo piano, con i gettoni gialli che mancavano regolarmente ma che finivamo sempre per trovare. Ci sedevamo in terrazza, anche d'inverno, per permettere ad Alfonso di fumare, visto che l'EPFL era diventata sempre più restrittiva con il tempo su questo punto. Ogni tanto andavamo all'Arcadie o all'Atlantique, e più recentemente ci trovavamo nel mio ufficio, dove avevo installato una macchinetta. La relazione tra mentore e allievo è cambiata nel tempo, trasformandosi in un'amicizia. Tuttavia, era chiaro che era sempre lui il Maestro, e così resterà.

nous continuions souvent jusqu'après 20 heures. Nous nous donnions toujours rendez-vous pour aller déjeuner le jour suivant. Parfois, il venait, parfois non. Nous allions régulièrement à l'Atlantique, une autre cafétéria de l'EPFL, où l'on servait des plats chinois qu'Alfonso aimait bien. Et puis, les pauses café. Initialement, à la cafétéria de physique au troisième étage, avec les jetons jaunes qui manquaient régulièrement mais que nous finissions toujours par trouver. Nous nous installions sur la terrasse, même en hiver, pour permettre à Alfonso de fumer, étant donné que l'EPFL était devenue de plus en plus restrictive avec le temps sur ce point. Parfois, nous allions à l'Arcadie ou à l'Atlantique, et plus récemment, nous nous retrouvions dans mon bureau, où j'avais installé une machine à café. La relation entre le mentor et l'élève a évolué au fil du temps, se transformant en une amitié. Cependant, il était clair qu'il était toujours le Maître, et cela restera ainsi.

- [1] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- [2] A. Baldereschi, Mean-value point in the Brillouin zone, *Phys. Rev. B* **7**, 5212 (1973).
- [3] A. Dal Corso, A. Pasquarello, A. Baldereschi, R. Car, Generalized-gradient approximations to density-functional theory: A comparative study for atoms and solids, *Phys. Rev. B* **53**, 1180 (1996).
- [4] A. Dal Corso, A. Pasquarello, A. Baldereschi, Density-functional perturbation theory for lattice dynamics with ultrasoft pseudopotentials, *Phys. Rev. B* **56**, 11369 (1997).
- [5] R. Haerle, E. Riedo, A. Pasquarello, A. Baldereschi,  $sp^2/sp^3$  hybridization ratio in amorphous carbon from C 1s core-level shifts: X-ray photoelectron spectroscopy and first-principles calculation, *Phys. Rev. B* **65**, 045101 (2002).
- [6] R. Resta, M. Posternak, A. Baldereschi, Towards a quantum theory of polarization in ferroelectrics: The case of  $\text{KNbO}_3$ , *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1010 (1993).
- [7] F. Gygi, A. Baldereschi, Self-consistent Hartree-Fock and screened-exchange calculations in solids: Application to silicon, *Phys. Rev. B* **34**, 4405(R) (1986).
- [8] S. Massidda, M. Posternak, A. Baldereschi, Hartree-Fock LAPW approach to the electronic properties of periodic systems, *Phys. Rev. B* **48**, 5058 (1993).
- [9] A. Baldereschi, S. Baroni, R. Resta, Band offsets in lattice-matched heterojunctions: A model and first-principles calculations for GaAs/AlAs, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 734 (1988).
- [10] M. Peressi, N. Binggeli, A. Baldereschi, Band engineering at interfaces: theory and numerical experiments, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31**, 1273 (1998).
- [11] F. Gygi, A. Baldereschi, Quasiparticle energies in semiconductors: Self-energy correction to the

- local-density approximation, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2160 (1989).
- [12] V. Fiorentini, A. Baldereschi, Dielectric scaling of the self-energy scissor operator in semiconductors and insulators, *Phys. Rev. B* **51**, 17196 (1995).
- [13] "L'IRRMA mantenga il suo slancio!".
- [14] "Casa della teoria".
- [15] "*Laudatio* per Alfonso Baldereschi alla fine del suo mandato di professore all'EPFL (in esergo) In segno di riconoscenza e ammirazione per il suo contributo

di rilievo nel campo della fisica teorica della materia condensata, il suo ruolo centrale nella costituzione di un polo di ricerca di eccellenza in fisica numerica dei materiali nella Svizzera romanda, il suo profondo impegno nell'insegnamento della fisica sia a livello di corsi di base sia di corsi di specializzazione, il suo impegno impeccabile alla guida di istituti e del Dipartimento di Fisica, e il suo continuo contributo alla valorizzazione delle nuove generazioni di scienziati."

## Une profonde humanité et un grand professionnalisme

Suzanne Claudet

Ce n'est pas sans émotion que j'écris ces quelques lignes au sujet du Professeur Alfonso Baldereschi, avec qui j'ai eu le privilège de collaborer, en qualité de secrétaire, près de deux décennies, de septembre 1988 à décembre 2009 à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL).

Tout au long des années durant lesquelles nous nous sommes côtoyés, Monsieur Baldereschi m'a témoigné une grande confiance. La qualité et la convivialité de nos échanges ont contribué à façonner un univers de travail aussi agréable que stimulant ; j'aime aussi

à dire que sa profonde humanité a fortement marqué de son empreinte notre relation professionnelle.

Quand je repense à ces années, son grand professionnalisme me vient aussi spontanément à l'esprit. Monsieur Baldereschi faisait preuve d'une rigueur et d'un engagement exemplaires dans tous les projets qu'il entreprenait. Sa capacité à naviguer dans des situations complexes avec un mélange de compétence et calme m'a toujours inspiré un profond respect.

# Trieste–Lausanne round trip

## Trieste–Lausanne aller-retour

---

Stefano de Gironcoli

---

*Do little things well, then will come great things  
asking to be done*

Alfonso Baldereschi is the reason I do what I'm doing. Like every young student, I fancied myself as the new Einstein, working on fundamental issues in physics, which in my mind meant studying general relativity and elementary particles (the two elective courses I selected in my study plan at the University of Trieste).

Then, in the final year of my undergraduate curriculum, Alfonso Baldereschi gave us a course entitled *Struttura della Materia* and, at variance with a parallel course held by Mario P. Tosi that dug quickly into solid-state problems (band structure, phonons, transport, conductivity, superconductivity), spent months teaching us about the hydrogen atom, the alkali metal spectra, electron correlation in the helium atom, Hartree-Fock, the adiabatic approximation... culminating in the covalent bond in the hydrogen dimer. The gist was that things can be understood in depth, from scratch, building on simple examples.

I was hooked, and at the final exam I asked him for a diploma project and started working on it. I did not work with him directly but was subcontracted to work with Stefano Baroni, therefore I didn't suffer from the fact that Baldereschi would regularly commute between Trieste and Lausanne. This commute was kind of a joke among the people that were waiting to meet him at either end of the Simplon Express line. The wait was always rewarded in the end though, and the beggar received Baldereschi's undivided attention.

After graduation I moved to Lausanne, where I was one of the first PhD students in the newly funded

*Fais bien les petites choses, puis les grandes choses  
viendront d'elles-mêmes te demander à être faites*

Alfonso Baldereschi est la raison pour laquelle je fais ce que je fais. Tout jeune étudiant que j'étais, je me voyais comme le nouvel Einstein, travaillant sur les questions fondamentales de la physique, ce qui, dans mon esprit, signifiait étudier la relativité générale et les particules élémentaires (les deux cours à option que j'avais choisis dans mon plan d'études à l'Université de Trieste).

Ensuite, au cours de la dernière année de mon cursus universitaire, Alfonso Baldereschi nous a donné un cours intitulé Structure de la matière et, à la différence d'un cours parallèle dispensé par Mario P. Tosi qui s'intéressait rapidement aux problèmes de l'état solide (structure de bandes, phonons, transport, conductivité, supraconductivité), nous a enseigné pendant des mois l'atome d'hydrogène, les spectres des métaux alcalins, la corrélation des électrons dans l'atome d'hélium, Hartree-Fock, l'approximation adiabatique... pour aboutir à la liaison covalente dans le dimère d'hydrogène. L'idée essentielle était que les choses peuvent être comprises en profondeur, à partir de zéro, en s'appuyant sur des exemples simples.

J'ai été séduit et, lors de l'examen final, je lui ai demandé un projet de diplôme et ai commencé à y travailler. Je n'ai pas travaillé directement avec lui, mais j'ai travaillé en sous-traitance avec Stefano Baroni, et je n'ai donc pas souffert du fait que Baldereschi faisait régulièrement la navette entre Trieste et Lausanne. Ce trajet faisait l'objet d'une sorte de plaisanterie parmi les personnes qui attendaient de le rencontrer à chaque extrémité de la ligne du Simplon express. L'attente était toujours récompensée à la fin, et le mendiant recevait toute son attention.

Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA). The concept of IRRMA, a cherished creature of Baldereschi, was that numerical simulation is the third paradigm of science, besides experiment and theory, allowing to measure theory in the way experiment measures reality. This concept is mainstream today but wasn't so widely accepted in the early 1990s.

The Total Energy and Force Methods conference, held in Trieste every other year to date since 1987, owes its historical success and enduring impact to Baldereschi's support and influence. The Italian-Swiss Workshops on Computational Material Science, organized in Sardinia in those and following years, were instrumental in building a community across more than a generation of young computational physicists.

In Lausanne I kept collaborating with people in Trieste, but during the long evenings spent at the Physics Department I happened to spot him smoking in his office, to stop by and talk about some irrelevant topic, or to witness him chatting with the evening cleaning personnel with absolute politeness and phlegm, as if time did not matter.

To me, Baldereschi has always remained a reference figure, present in the background, not unreachable but an oracle whose prophecies remained to be interpreted; Alessandro De Vita, a friend of mine who worked with him directly for his degree and was a postdoc at IRRMA after I left, had—I think—a closer personal interaction with Alfonso, but he too was far from having deciphered him. One characteristic I discerned in my interactions with him is that, deep down, he felt like an engineer. That what one works on should eventually be useful; not necessarily groundbreaking, but well crafted and useful.

*If you cannot in the long run tell everyone what you have been doing, your doing was worthless.*  
Erwin Schrödinger

Après avoir obtenu mon diplôme, j'ai déménagé à Lausanne où j'ai été l'un des premiers doctorants de l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), qui venait d'être financé. Le concept de l'IRRMA, une créature chère à Baldereschi, était que la simulation numérique est le troisième paradigme de la science, à côté de l'expérience et de la théorie, permettant de mesurer la théorie de la même manière que l'expérience mesure la réalité. Ce concept est aujourd'hui largement répandu, mais il n'était pas aussi largement accepté au début des années 90.

La conférence Total Energy and Force Methods, qui se tient à Trieste tous les deux ans depuis 1987, doit son succès historique et son impact durable au soutien et à l'influence de Baldereschi. Les Italian-Swiss Workshops on Computational Materials Science, organisés en Sardaigne ces années-là et les suivantes, ont joué un rôle déterminant dans la création d'une communauté regroupant plus d'une génération de jeunes physiciens computationnels.

À Lausanne, j'ai continué à collaborer avec des personnes de Trieste, mais pendant les longues soirées passées au Département de physique, il m'arrivait de l'apercevoir en train de fumer dans son bureau, de m'arrêter pour parler d'un sujet sans intérêt ou de le voir bavarder avec le personnel de nettoyage du soir avec une politesse et un flegme absolu, comme si le temps n'avait pas d'importance.

Pour moi, Baldereschi est toujours resté une figure de référence, présente en arrière-plan, pas inaccessible mais un oracle dont les prophéties restaient à interpréter ; Alessandro De Vita, un de mes amis qui a travaillé directement avec lui pour son diplôme et a été post-doctorant à l'IRRMA après mon départ, a eu, je pense, une interaction personnelle plus étroite avec Alfonso, mais lui aussi était loin de l'avoir décrypté. Une caractéristique que j'ai discernée dans mes interactions avec lui : au fond, il se voyait comme un ingénieur. Ce sur quoi l'on travaille doit finir par être utile, pas nécessairement révolutionnaire, mais bien conçu et utile.

*Si, à long terme, vous ne pouvez pas dire à tout le monde ce que vous avez fait, alors ce que vous avez fait n'avait aucune valeur.*  
Erwin Schrödinger



Présentation par Alfonso Baldereschi à la cérémonie d'inauguration de l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), le 12 juin 1989, en présence des recteurs des universités de la Suisse romande et du président de l'EPFL.



# Con Alfonso Baldereschi a IRRMA

## Avec Alfonso Baldereschi à l'IRRMA

Paolo Giannozzi

La mia interazione più propriamente scientifica con Alfonso Baldereschi inizia nel 1988 a Losanna, dove avevo da poco finito il dottorato. Avevo ovviamente già incontrato Alfonso Baldereschi nei corridoi dell'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), in particolare dell'Institut de physique théorique (IPT), che avevo frequentato per via di una fortunata collaborazione – tuttora in corso – con Stefano Baroni. Sapevo quindi dei suoi fondamentali contributi nel campo – all'epoca in forte sviluppo – dei calcoli da principi primi nell'ambito della teoria del funzionale densità, che erano peraltro l'oggetto della collaborazione sopra menzionata.

Alfonso mi propose di diventare *assistant senior* presso una struttura di nuova istituzione, chiamata IRRMA: Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux. Il nuovo istituto era il frutto di una collaborazione fra istituzioni universitarie della Svizzera romanda (Ginevra, Friburgo, Neuchâtel, Losanna, EPFL) ed era strutturato inizialmente su cinque progetti scientifici. Uno di questi (*Alloys*) era dedicato allo studio di leghe, e di questo ricevetti la responsabilità scientifica.

Il nome dell'istituto si prestava a facili ironie (*Irrma la douce*) e la sua struttura a qualche dubbio sulla solidità della costruzione. Tuttavia, l'entusiasmo non mancava fra i giovani (di allora) che costituivano il nucleo losannese di IRRMA. Tra questi, oltre ai locali, un buon numero di italiani, chi recuperato a Trieste, chi in giro per il mondo.

Alfonso si era messo d'impegno a far decollare IRRMA, che all'epoca non aveva ancora il direttore scientifico di alto livello proveniente da fuori che si voleva attrarre e si appoggiava alle competenze interne.

Mon interaction la plus proprement scientifique avec Alfonso Baldereschi a commencé en 1988 à Lausanne, où je venais de terminer mon doctorat. Je l'avais bien sûr déjà rencontré dans les couloirs de l'EPFL (École Polytechnique Fédérale de Lausanne), en particulier à l'IPT (Institut de physique théorique), que j'avais fréquenté dans le cadre d'une heureuse collaboration – toujours en cours – avec Stefano Baroni. Je connaissais donc ses contributions fondamentales dans le domaine, alors en plein développement, des calculs à partir des premiers principes en théorie de la fonctionnelle de la densité, qui faisaient d'ailleurs l'objet de la collaboration mentionnée ci-dessus.

Alfonso m'a proposé de devenir *assistant senior* dans une structure nouvellement créée, appelée IRRMA: l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux. Ce nouvel institut était le fruit d'une collaboration entre des institutions universitaires de la Suisse romande (Genève, Fribourg, Neuchâtel, Lausanne, EPFL) et s'articulait initialement autour de cinq projets scientifiques. L'un d'entre eux (*Alloys*) était consacré à l'étude des alliages et j'en ai reçu la responsabilité scientifique.

Le nom de l'institut prêtait à une ironie facile (« *Irrma la douce* ») et sa structure pouvait susciter quelques doutes sur la solidité de la construction. Cependant, l'enthousiasme ne manquait pas parmi les jeunes gens (de l'époque) qui constituaient le noyau lausannois de l'IRRMA. Parmi eux se trouvaient, outre des locaux, un bon nombre d'Italiens, certains récupérés à Trieste, d'autres dans le monde entier.

Alfonso avait déployé beaucoup d'efforts pour faire démarrer l'IRRMA qui, à l'époque, n'avait pas encore le directeur scientifique de haut niveau venant de

All'inizio il ramo losannese di IRRMA era ospitato in un blocco di tre stanze presso l'IPT, al secondo piano, alla sinistra dell'ingresso. Alfonso Baldereschi si occupò anche di dettagli minimi come l'ammobigliamento del blocco, con la sua consueta flemma e abituale puntigliosità. Pur essendo visibilmente molto impegnato, aveva sempre tempo per tutto e per tutti.

Il suo interesse per IRRMA era però piuttosto, come dire, "disinteressato": Alfonso aveva i suoi progetti, le sue collaborazioni, i suoi studenti, ma vedeva IRRMA come un'opportunità non per espandere numericamente il proprio gruppo, ma per sostenere un campo di ricerca all'epoca in forte espansione e in cui l'EPFL aveva molto da dire. Era del resto il suo stile scientifico: focalizzarsi su pochi progetti di qualità invece di cercare di pubblicare quanti più articoli possibile. Mi ha sempre lasciato la massima libertà di lavorare come meglio credevo sul progetto *Alloys*, assieme a Stefano de Gironcoli, suo ex-laureato di Trieste.

Molti anni dopo (dal 2010 in poi) i casi della vita mi hanno portato a incrociare nuovamente Alfonso, nel frattempo rientrato a tempo pieno a Trieste, nel corso di laurea magistrale interateneo (Trieste-Udine) in Fisica. Qui ho potuto nuovamente apprezzare la sua affabilità e anche un altro suo aspetto di cui avevo sentito parlare ma senza averne esperienza diretta: l'attenzione alla didattica. Sfortunatamente, solo tramite la burocrazia del "Consiglio di corso di studi" e non direttamente. Invidio non poco i colleghi che hanno avuto la fortuna di avere Alfonso come professore.

l'estérieur qu'il souhaitait attirer ; l'institut s'appuyait sur l'expertise interne.

Au début, la branche lausannoise de l'IRRMA était logée dans un bloc de trois pièces à l'IPT, au deuxième étage à gauche de l'entrée. Alfonso Baldereschi s'occupait des moindres détails, comme l'aménagement du bloc, avec son flegme usuel et sa minutie habituelle. Bien qu'il ait été visiblement très occupé, il a toujours eu du temps pour tout et pour tous.

Cependant, son intérêt pour l'IRRMA était plutôt, comment dire, « désintéressé » : Alfonso avait ses propres projets, ses propres collaborations, ses propres étudiants, mais il voyait l'IRRMA comme une opportunité non pas d'étendre numériquement son propre groupe, mais de soutenir un domaine de recherche qui était en plein essor à l'époque et dans lequel l'EPFL avait beaucoup à dire. Après tout, c'était son style scientifique de se concentrer sur quelques projets de qualité plutôt que d'essayer de publier autant d'articles que possible. Il m'a toujours laissé toute liberté de travailler comme je l'entendais sur le projet *Alloys*, avec Stefano de Gironcoli, son ancien étudiant diplômé de Trieste.

Bien des années plus tard (à partir de 2010), les événements de la vie m'ont amené à rencontrer à nouveau Alfonso, qui entre-temps était retourné à plein temps à Trieste, dans le cadre du master interuniversitaire (Trieste-Udine) en physique. J'ai pu à nouveau apprécier son affabilité et un autre aspect de sa personnalité dont j'avais entendu parler mais dont je n'avais pas eu d'expérience directe : l'importance qu'il accordait à l'enseignement. Malheureusement, ce n'était que par le biais de la bureaucratie du Conseil de cours et non directement. J'envie énormément les collègues qui ont eu la chance d'avoir Alfonso comme professeur.

# The accurate and the principled

## Le rigoureux et le principiel

Gerardo Ortiz

It was one of those crisp winter mornings, just before the whirlwind of my first days at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL)—a pivotal moment in my scientific journey, brimming with excitement, curiosity, and a hint of uncertainty. I was eager to meet my PhD mentor, Alfonso Baldereschi, whose reputation in computational electronic structure preceded him.

Upon entering his office, I was immediately struck by the warm and inviting atmosphere. Alfonso greeted me with a genuine smile and a firm handshake, instantly putting me at ease. He engaged me in conversation right away, inquiring about my interests in condensed matter physics. His deep voice and commanding presence left a lasting impression. Alfonso's measured articulation and expressive body language conveyed clarity of thought and harmonious energy. He communicated his ideas with moderate passion and remarkable effectiveness—truly a delightful mentor.

My journey at the École polytechnique has been marked by academic challenges, cultural experiences, and personal growth that have profoundly shaped my scientific future. The environment was enriched by the intellectual diversity of IRRMA (Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux) and its members, who became both colleagues and friends. Alfonso was instrumental in fostering this vibrant community of exceptional researchers. I fondly recall figures like Pietro Ballone, Stefan Goedecker (who collaborated with Klaus Maschke), Elio Moroni (working with Thomas Jarlborg), and Roberto Car—the very Car of the Car-Parinello method! Others like Luciano Colombo, Kurt Maeder, Stefano de Gironcoli, Hervé Castella, Maria

C'était l'une de ces matinées d'hiver frisquettes, juste avant le tourbillon de mes premiers jours à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) – un moment décisif dans mon parcours scientifique, rempli d'excitation, de curiosité et d'une pointe d'incertitude. J'étais impatient de rencontrer mon directeur de thèse, Alfonso Baldereschi, dont la réputation dans le domaine de la structure électronique computationnelle le précédait.

En entrant dans son bureau, j'ai immédiatement été frappé par l'atmosphère chaleureuse et accueillante. Alfonso m'a accueilli avec un sourire sincère et une poignée de main ferme, me mettant instantanément à l'aise. Il m'a tout de suite engagé dans la conversation, s'enquérant de mes intérêts en physique de la matière condensée. Sa voix profonde et sa présence imposante m'ont laissé une impression durable. L'articulation mesurée d'Alfonso et son langage corporel expressif transmettaient une clarté de pensée et une énergie harmonieuse. Il communiquait ses idées avec une passion modérée et une efficacité remarquable – vraiment un mentor des plus agréables.

Mon parcours à l'École polytechnique a été marqué par des défis académiques, des expériences culturelles et une croissance personnelle qui ont profondément façonné mon avenir scientifique. L'environnement était enrichi par la diversité intellectuelle de l'IRRMA (Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux) et de ses membres, qui sont devenus à la fois des collègues et des amis. Alfonso a joué un rôle clé dans le développement de cette communauté vibrante de chercheurs exceptionnels. Je garde un bon souvenir de figures comme Pietro Ballone, Stefan Goedecker (qui a collaboré avec Klaus Maschke), Elio Moroni (travaillant avec Thomas

Peressi, Paolo Giannozzi, Sandro Massidda, Michel Posternak, Xenophon Zotos, Giulia Galli, François Gygi, Francesco Mauri, and Gilles Zumbach (who worked with Hervé Kunz) also enriched our discussions, alongside Alfredo Pasquarello, Andrea Testa, and Lucio Claudio Andreani (collaborating with Antonio Quattropani). Regular visitors from Trieste, such as Stefano Baroni and Raffaele Resta, further enhanced this dynamic community.

My first project involved a deep dive into electronic screening at semiconductor heterojunctions, a phenomenon critical to the behavior of semiconductor materials and their interfaces. We, together with Raffaele Resta, discovered that existing theoretical macroscopic models often fell short in capturing the intricacies of microscopic local-field effects. This gap highlighted the need to refine these models; overlooking such details could lead to significant inaccuracies, impacting the design and optimization of semiconductor devices. Throughout this work, I admired Alfonso's unwavering patience and his emphasis on achieving accurate and relevant results.

Later in my thesis, I shifted the focus to foundational questions regarding quantum emergent phases of matter—Pietro Ballone was instrumental in this transition. I became captivated by the phases that emerge from the collective behavior of interacting microscopic components. This line of inquiry delved into complex phenomena such as superconductivity and magnetism, offering profound insights into the nature of matter itself. Although this area lay outside Alfonso's primary expertise, he consistently supported my exploration. His encouragement fostered an environment where I felt free to pursue new ideas and push the boundaries of my research.

In our quest for knowledge, the concepts of accuracy, underlying exactness, and truth are often intertwined, leading to nuanced discussions across various fields, especially in physics. A prime example is the tension between reductionism and emergent phenomena. Over the years, Alfonso and I navigated seemingly contrasting views on our approach to scientific knowledge: he championed reductionist accuracy, while I leaned toward exact organizing

Jarlborg) et Roberto Car – le même Car de la méthode Car-Parrinello ! D'autres comme Luciano Colombo, Kurt Maeder, Stefano de Gironcoli, Hervé Castella, Maria Peressi, Paolo Giannozzi, Sandro Massidda, Michel Posternak, Xenophon Zotos, Giulia Galli, François Gygi, Francesco Mauri et Gilles Zumbach (qui travaillait avec Hervé Kunz) ont également enrichi nos discussions, aux côtés d'Alfredo Pasquarello, Andrea Testa et Lucio Claudio Andreani (collaborant avec Antonio Quattropani). Des visiteurs réguliers de Trieste, comme Stefano Baroni et Raffaele Resta, ont encore renforcé cette communauté dynamique.

Mon premier projet a consisté en une immersion approfondie dans l'écrantage électronique aux hétérojonctions de semi-conducteurs, un phénomène crucial pour le comportement des matériaux semi-conducteurs et de leurs interfaces. Avec Raffaele Resta, nous avons découvert que les modèles théoriques macroscopiques existants avaient souvent de la peine à capturer les subtilités des effets de champ local microscopiques. Cette lacune a mis en évidence la nécessité d'un raffinement de ces modèles ; négliger de tels détails pouvait entraîner des inexactitudes significatives, impactant la conception et l'optimisation des dispositifs semi-conducteurs. Au cours de ce travail, j'ai admiré la patience indéfectible d'Alfonso et son insistance sur l'importance d'obtenir des résultats précis et pertinents.

Plus tard dans ma thèse, j'ai réorienté mes recherches vers des questions fondamentales concernant les phases émergentes quantiques de la matière – Pietro Ballone a joué un rôle clé dans cette transition. J'ai été captivé par les phases qui émergent du comportement collectif des composants microscopiques interactifs. Cette ligne de recherche explorait des phénomènes complexes tels que la supraconductivité et le magnétisme, offrant des aperçus profonds sur la nature même de la matière. Bien que ce domaine était en dehors de l'expertise principale d'Alfonso, il a toujours soutenu ma recherche. Son encouragement a favorisé un environnement où je me suis senti libre de poursuivre de nouvelles idées et de repousser les limites de ma recherche.

Dans notre quête de connaissance, les notions de précision, d'exactitude sous-jacente et de vérité

principles. Yet we both agreed that the ultimate goal of science is to uncover the truth.

What consistently impressed me was the mutual respect we held for each other's perspectives. Ultimately, I believe that both viewpoints are complementary and contribute valuable insights toward our shared aim of understanding the natural world. By acknowledging both reductionist and emergent views, one can gain a holistic understanding of complex phenomena, leading to more accurate predictions and foundational discoveries.

In those formative years, it felt as though Alfonso had welcomed me and other students into his own brood, guiding us into a world of extraordinary minds and collaborative spirit. His mentorship helped me navigate my transition to a mature scientist, and his belief in the importance of foundational questions in physics motivated me to pursue my research directions with enthusiasm and rigor.

I always knew Alfonso had a point!

sont souvent entrelacées, menant à des discussions nuancées à travers divers domaines, en particulier en physique. Un exemple majeur est la tension entre le réductionnisme et les phénomènes émergents. Au fil des ans, Alfonso et moi avons navigué entre des points de vue apparemment opposés sur notre approche à la connaissance scientifique : il défendait l'exactitude réductionniste, tandis que je penchais plutôt vers des principes d'organisation exacts. Pourtant, nous étions tous deux d'accord sur le fait que l'objectif ultime de la science est de révéler la vérité.

Ce qui m'a constamment impressionné, c'est le respect que nous avons chacun pour les perspectives de l'autre. En fin de compte, je crois que les deux points de vue sont complémentaires et apportent des éclairages précieux à notre objectif commun de comprendre le monde naturel. En reconnaissant à la fois les vues réductionnistes et émergentes, on peut obtenir une compréhension holistique des phénomènes complexes, conduisant à des prévisions plus précises et à des découvertes fondamentales.

Durant ces années formatrices, il semblait qu'Alfonso m'avait accueilli, ainsi que d'autres étudiants, comme si nous appartenions à une même famille, nous guidant dans un monde d'esprits extraordinaires et de collaboration. Son mentorat m'a aidé à naviguer dans ma transition vers un scientifique mature, et sa conviction quant à l'importance des questions fondamentales en physique m'a motivé à poursuivre mes directions de recherche avec enthousiasme et rigueur.

J'ai toujours su qu'Alfonso avait un point de vue valable !



# A thank you note to my supervisor

## Note de remerciement à mon superviseur

---

**Massimiliano Di Ventra**

---

It is on a sad occasion that I write this note. Yet, the passing of my supervisor, Alfonso Baldereschi, gives me the opportunity to express my deep gratitude to such a great scientist and man. It is an understatement to say that he has been one of the most influential people in my life. To show the reader who Baldereschi was from the eyes and recollections of one of his students, I need to start from the beginning, with a short preamble on the role of an "ideal" supervisor. The rationale for such an unusual introduction will become clear, I hope, as the reading proceeds.

### The role of an ideal supervisor

How important is an academic supervisor in the career and life of a scientist? Immensely important! The supervisor guides the research of the inexperienced student, informs him of and corrects the mistakes he has made, and rejoices in his successes. The supervisor gives the right advice when the student is stuck on some problem, encourages him to push forward despite the difficulties, and sees that he carries out his tasks for the successful completion of his degree. The supervisor's role does not end with that milestone. Instead, it lasts for the whole duration of the student's professional career and possibly beyond. The former student can always rely on his supervisor's wisdom and experience to navigate his own career, lean on him to write supporting letters of recommendation for jobs and recognitions, or simply discuss issues as a mentor and friend. Yes, the supervisor has now become a mentor and while the respect and admiration of the student for his supervisor never fades, it has merged into something much bigger and durable, a lifelong friendship.

C'est à une occasion triste que j'écris cette note. Pourtant, le décès de mon superviseur, Alfonso Baldereschi, me donne l'occasion d'exprimer ma profonde gratitude à l'égard d'un si grand scientifique et d'un si grand homme. C'est peu dire qu'il a été l'une des personnes les plus influentes de ma vie. Pour montrer au lecteur qui était Baldereschi à travers les yeux et les souvenirs d'un de ses étudiants, je dois commencer par le début, avec un bref préambule sur le rôle d'un superviseur « idéal ». La raison d'être de cette introduction inhabituelle apparaîtra clairement, je l'espère, au fur et à mesure de la lecture.

### Le rôle d'un superviseur idéal

À quel point un superviseur académique est-il important dans la carrière et la vie d'un scientifique ? Immensément important ! Le superviseur guide les recherches de l'étudiant inexpérimenté, l'informe des erreurs qu'il a commises et les corrige, et se réjouit de ses réussites. Il donne les bons conseils lorsque l'étudiant est bloqué sur un problème, l'encourage à aller de l'avant malgré les difficultés et veille à ce qu'il accomplisse ses tâches pour obtenir son diplôme avec succès. Le rôle du superviseur ne s'arrête pas à cette étape. Au contraire, il dure pendant toute la durée de la carrière professionnelle de l'étudiant et peut-être même au-delà. L'ancien étudiant peut toujours compter sur la sagesse et l'expérience de son superviseur pour orienter sa propre carrière, s'appuyer sur lui pour rédiger des lettres de recommandation en vue d'emplois ou de reconnaissances, ou simplement discuter de certaines questions en tant que mentor et ami. Oui, le superviseur est devenu un mentor et alors que le respect et l'admiration de l'étudiant pour son superviseur ne faiblissent jamais, ils se sont transformés

How important was my supervisor, Alfonso Baldereschi, in my career and life? Immensely important!

### Baldereschi's undergraduate student (1990-1991)

I first met Baldereschi as a fourth-year undergraduate student at the University of Trieste where he taught us the one-year class entitled *Struttura della Materia*, essentially a course on the quantum mechanical properties of atoms and molecules. At that time, I was still studying for and thinking about pursuing a career in theoretical high-energy physics, but his course was mandatory even for us students interested in a different field.

I was immediately impressed by Baldereschi's extremely clear, logical and precise exposition of difficult concepts. Every sentence he expressed in his characteristic deep voice seemed profoundly thought out, as if read from a well-written book he had access to in his head. Up to that point, only one other professor of mine—Giancarlo Ghirardi, who taught us quantum mechanics the year before—impressed me that much.

I still remember Baldereschi's ability to guide us from the beginning of his lectures to the end with a stream of ideas that were tied together to form a coherent flow, with no detail or small point left untouched. It was as if all the questions I had in my mind were immediately recognized and answered. His thinking was so deep that I came out of his classes with a renewed appreciation of how to approach physical problems. I cannot forget thinking: "*I want to become as good a physicist as he is*"!

After that one-year course, the final exam was not easy. We had both a written test and an oral exam. As it was typical of the Italian undergraduate education system of the time, the exams would often cover material that was not even discussed in class, challenging the student's ability to think critically with the material learned. During the oral exam, Baldereschi asked me to derive, among other things, the asymptotic behavior of Van der Waals forces between two molecules. As a follow-up question, he asked how the result would change in a world in

en quelque chose de beaucoup plus grand et durable, une amitié qui dure toute la vie.

À quel point mon superviseur académique, Alfonso Baldereschi, était-il important dans ma carrière et dans ma vie ? Immensément important !

### Étudiant de *laurea* avec Baldereschi (1990-1991)

J'ai rencontré Baldereschi pour la première fois alors que j'étais étudiant en quatrième année de mon cursus à l'Université de Trieste, où il nous donnait un cours d'un an intitulé *Struttura della Materia*, essentiellement un cours sur les propriétés quantiques des atomes et des molécules. À l'époque, j'étudiais encore la physique théorique des hautes énergies et j'envisageais d'y faire carrière, mais son cours était obligatoire, même pour les étudiants intéressés par un autre domaine.

J'ai été immédiatement impressionné par l'exposé extrêmement clair, logique et précis de Baldereschi sur des concepts difficiles. Chaque phrase qu'il exprimait de sa voix grave caractéristique semblait profondément réfléchi, comme si elle était lue dans un livre bien écrit auquel il avait accès dans sa tête. Jusqu'alors, seul un autre de mes professeurs, Giancarlo Ghirardi, qui nous avait enseigné la mécanique quantique l'année précédente, m'avait impressionné à ce point.

Je me souviens encore de la capacité de Baldereschi à nous guider, du début à la fin de ses cours, dans un flot d'idées qui s'enchaînaient pour former un flux cohérent, sans qu'aucun détail ou petit point ne soit laissé de côté. C'était comme si toutes les questions que j'avais en tête étaient immédiatement reconnues et trouvaient une réponse. Sa pensée était si profonde que je suis sorti de ses cours avec une appréciation renouvelée de la façon d'aborder les problèmes physiques. Je ne peux pas oublier que je me suis dit : « *Je veux devenir un aussi bon physicien que lui* »!

Après ce cours d'un an, l'examen final n'a pas été facile. Nous avions à la fois un test écrit et un examen oral. Comme c'était le cas dans le système éducatif italien de l'époque, les examens portaient souvent sur des

which the electron had spin 1. After almost an hour of other grueling questions, I managed to finish the exam, and he gave me the highest possible mark. I was very pleased that such a physicist would find I answered his questions satisfactorily. I was even more surprised when he asked me if I was interested in pursuing an undergraduate thesis with him in the field of condensed matter physics. I simply answered I would think about it.

My interest in pursuing a career in high-energy physics was dampened after discussing with some professors at the International Centre for Theoretical Physics (ICTP) and the Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA). Daniele Amati (Director of SISSA at the time) was particularly negative about the direction of the field and discouraged me from pursuing it. After much thought, I then decided to try my chances in condensed matter physics and contacted Baldereschi to see if his offer was still available. My admiration for him and his teaching style convinced me I could learn a lot from him. I was pleased when he told me he would take me on as his student.

At our first meeting to decide the topic of my undergraduate thesis, Baldereschi was graciously open to my preference to do more analytical than numerical work. This showed early on that he did not want to impose his research style on me. He then gave me some papers to read; two of them were the famous papers of Hohenberg and Kohn and of Kohn and Sham on density functional theory. Twelve years later I had the privilege of becoming a colleague of Lu Sham's at the University of California, San Diego. As for the research topic, he asked me to work on finding analytical solutions of the spectra of two-dimensional excitons in an external magnetic field, a topic I knew nothing about, but which I started investigating with great enthusiasm.

From then on, things took a surprising turn and revealed yet another (totally unexpected) side of my supervisor. I spent months in the ICTP library to find analytical solutions for that system, and while I could find none, I succeeded in deriving several interesting asymptotic regimes of the eigenstates and spectra relevant to experiments. However, the amount of

sujets qui n'avaient même pas été discutés en classe, mettant ainsi à l'épreuve la capacité de l'étudiant à faire preuve d'esprit critique par rapport à la matière apprise. Lors de l'examen oral, Baldereschi m'a demandé de déterminer, entre autres, le comportement asymptotique des forces de Van der Waals entre deux molécules. Il m'a ensuite demandé comment le résultat changerait dans un monde où l'électron aurait un spin de 1. Après près d'une heure d'autres questions épuisantes, j'ai réussi à terminer l'examen et il m'a donné la note la plus élevée possible. J'étais très heureux qu'un tel physicien trouve que j'avais répondu à ses questions de manière satisfaisante. J'ai été encore plus surpris lorsqu'il m'a demandé si j'étais intéressé par une thèse de *laurea* avec lui dans le domaine de la physique de la matière condensée. J'ai simplement répondu que j'y réfléchirais.

Mon intérêt pour une carrière dans la physique des hautes énergies s'est estompé après avoir discuté avec certains professeurs à l'International Centre for Theoretical Physics (ICTP) et la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA). Daniele Amati (le directeur de la SISSA à l'époque) s'est montré particulièrement négatif quant à l'orientation de ce domaine et m'a découragé de le poursuivre. Après mûre réflexion, j'ai décidé de tenter ma chance en physique de la matière condensée et j'ai contacté Baldereschi pour savoir si son offre tenait toujours. L'admiration que j'avais pour lui et son style d'enseignement m'ont convaincu que je pouvais beaucoup apprendre de lui. J'ai été ravi qu'il me dise qu'il m'accepterait comme son étudiant.

Lors de notre première rencontre pour décider du sujet de ma thèse de *laurea*, Baldereschi s'est montré gracieusement ouvert à ma préférence pour un travail plus analytique que numérique. Cela a montré très tôt qu'il ne voulait pas m'imposer son style de recherche. Il m'a ensuite donné quelques articles à lire, dont deux étaient les célèbres articles de Hohenberg et Kohn, et de Kohn et Sham sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Douze ans plus tard, j'ai eu le privilège de devenir un collègue de Lu Sham à l'Université de Californie, à San Diego. En ce qui concerne le sujet de recherche, il m'a demandé de travailler sur la recherche de solutions analytiques des spectres d'excitons bidimensionnels dans

information I collected was really overwhelming, and I needed some guidance on how to organize it into coherent results for my thesis. Unfortunately, I could not discuss any of those results with Baldereschi, let alone publish them. I realized that answering emails was not Baldereschi's strong point and apparently, he had yet to discover the valuable use of a calendar to log his meetings. My attempts to meet with him were all unsuccessful, either because he would not answer my emails or, when he finally did, he would not show up for our arranged meeting (did he forget?).

One day, I had a vision of Baldereschi in a corridor of the ICTP. To make sure that I was not hallucinating, I stopped him in his tracks and told him what I had done up to that point and that I wanted to defend my thesis (this was about six months after our initial meeting to decide on the topic). He seemed genuinely surprised but kindly agreed to let me finish. Keeping in mind Baldereschi's high standards, I then spent another four months completing several numerical and analytical calculations to compare with experiments and wrote my undergraduate thesis. Unfortunately, those results never saw the light of day in the form of a publication.

I defended my thesis in October 1991. Overall, I spent almost a year doing research on my thesis and I discussed it with Baldereschi the astronomical number of... three times. One of those highly cherished moments was during my thesis defense, when he asked me more questions than the rest of the committee! (A similar experience awaited me for my PhD defense; more on this later.)

To tell you the truth, this experience left me utterly exhausted, with a certain amount of self-doubt, and completely disillusioned about doing research. Having been left unsupervised for almost a year of undergraduate research was like having the best mountain guide in the world telling you that you must reach the summit of a very tall mountain peak and then just saying: "I'll see you at the top!" If you are lucky, you can reach the summit, but the effort is so strenuous that you may think twice before trying it again. I then spent the next few months teaching mathematics and physics at high schools in Trieste before waiting

un champ magnétique externe, un sujet que je ne connaissais pas du tout mais que j'ai commencé à étudier avec beaucoup d'enthousiasme.

À partir de là, les choses ont pris une tournure surprenante et ont révélé une autre facette (totalement inattendue) de mon superviseur. J'ai passé des mois à la bibliothèque de l'ICTP pour trouver des solutions analytiques pour ce système et, bien que je n'en aie trouvé aucune, j'ai réussi à dériver plusieurs régimes asymptotiques intéressants des états propres et des spectres pertinents pour les expériences. Cependant, la quantité d'informations que j'ai collectées était vraiment écrasante et j'avais besoin de directives sur la manière de les organiser en résultats cohérents pour ma thèse. Malheureusement, je n'ai pu discuter avec Baldereschi d'aucun de ces résultats, et encore moins les publier. Je me suis rendu compte que répondre à ses courriels n'était pas le point fort de Baldereschi et, apparemment, il n'avait pas encore découvert l'utilité d'un calendrier pour inscrire ses réunions. Mes tentatives pour le rencontrer ont toutes échoué, soit parce qu'il ne répondait pas à mes courriels, soit parce que, lorsqu'il y répondait enfin, il ne se présentait pas à notre réunion convenue (avait-il oublié ?).

Un jour, j'ai eu une vision de Baldereschi dans un couloir au ICTP. Pour m'assurer que je n'hallucinais pas, je l'ai arrêté sur son chemin, lui ai raconté ce que j'avais fait jusqu'à ce moment-là et dit que je voulais soutenir ma thèse (c'était environ six mois après notre première rencontre pour décider du sujet). Il a semblé sincèrement surpris, mais a gentiment accepté de me laisser terminer. En gardant à l'esprit les exigences élevées de Baldereschi, j'ai alors passé quatre mois supplémentaires à effectuer plusieurs calculs numériques et analytiques pour les comparer aux expériences et j'ai rédigé ma thèse de *laurea*. Malheureusement, ces résultats n'ont jamais été publiés.

J'ai soutenu ma thèse en octobre 1991. Au total, j'ai passé près d'un an à effectuer des recherches sur ma thèse et j'ai discuté avec Baldereschi le nombre astronomique de... trois fois. L'un de ces moments les plus chers a été celui de ma soutenance de thèse, lorsqu'il m'a posé plus de questions que le reste du comité !

to be shipped off to my mandatory military service. I thought my interaction with Baldereschi and my chances of doing research were over.

### Baldereschi's graduate student (1993-1997)

Here again comes another twist in the plot. While serving my one-year military service, about halfway, something totally unexpected happened. Baldereschi contacted me and asked me if I was interested in spending a year at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) to do research with him, funded by the University of Trieste. Sure, I had to pass yet another exam with him to get it, but I agreed it was a great opportunity.

In June 1993 I moved to EPFL, where I found Baldereschi very welcoming. He suggested working on a first-principles approach to quantum transport. I did not complete this work during my stay in Lausanne, but I could not have imagined that it would later become an important topic in my research and a very popular field worldwide. This shows how prescient Baldereschi was in identifying significant directions of study well before becoming "fashionable."

However, as soon as I got to Lausanne, the pattern that I experienced from my undergraduate days repeated. Baldereschi put on his typical invisibility cloak and didn't get the memo that calendars have been around for quite some time. I could not meet with him. Even if he agreed to meet, he would not show up to our meetings. And this behavior continued for months on end. Despite this, towards the end of the first year he asked me if I would stay for a regular PhD. As the saying goes, *fool me once shame on you, fool me twice shame on me*. At that point, I already knew what to expect and that I could not count on any regular feedback from him. However, I valued his stature in the field and the opportunity he was giving me. So, I accepted the position and decided that my best chance at learning to become a professional physicist was by working on my own, on topics I was really interested in. I also started collaborating with other people at EPFL and abroad, including other PhD students.

(Une expérience similaire m'attendait pour la soutenance de mon doctorat ; j'y reviendrai plus tard.)

Pour tout vous dire, cette expérience m'a laissé complètement épuisé, avec une certaine dose de doute, et complètement désillusionné quant à la recherche. Avoir été laissé sans supervision pendant près d'un an de recherche, c'était comme avoir le meilleur guide de montagne du monde qui vous dit que vous devez atteindre le sommet d'une très haute montagne et qui vous dit ensuite simplement : « Je vous verrai au sommet ». Si vous avez de la chance, vous pouvez atteindre le sommet, mais l'effort est si pénible que vous y réfléchirez à deux fois avant d'essayer à nouveau. J'ai ensuite passé les quelques mois suivants à enseigner les mathématiques et la physique dans des lycées de Trieste avant d'attendre d'être envoyé au service militaire obligatoire. Je pensais que mon interaction avec Baldereschi et mes chances de faire de la recherche étaient terminées.

### Doctorant de Baldereschi (1993-1997)

Voici un nouveau rebondissement dans l'intrigue. Alors que j'effectuais mon service militaire d'un an, à peu près à mi-parcours, un événement totalement inattendu s'est produit. Baldereschi m'a contacté et m'a demandé si j'étais intéressé à passer une année à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) pour effectuer avec lui des recherches financées par l'Université de Trieste. Bien sûr, j'ai dû passer un autre examen avec lui pour l'obtenir, mais j'ai reconnu qu'il s'agissait d'une grande opportunité.

En juin 1993, j'ai déménagé à l'EPFL, où j'ai trouvé Baldereschi très accueillant. Il m'a suggéré de travailler sur une approche *ab initio* au transport quantique. Je n'ai pas terminé ce travail pendant mon séjour à Lausanne, mais je n'aurais jamais pu imaginer qu'il deviendrait plus tard un sujet important dans mes recherches et un domaine très populaire dans le monde entier. Cela montre à quel point Baldereschi était prévoyant en identifiant des directions d'étude importantes bien avant qu'elles ne deviennent « à la mode ».

Cependant, dès que je suis arrivé à Lausanne, le schéma que j'avais connu lors de mes études de



It was an intense and difficult period, but it gave me the freedom to pursue my own interests, study a wide variety of topics and theoretical techniques, write papers, fight with referees, and learn how to collaborate with a diverse set of scientists, both theorists and experimentalists. I could not have done it if I had had a supervisor who would impose his research topic and micromanage my time by meeting with me regularly.

In the four years I spent at EPFL, I can count on the fingers of one hand the times I met Baldereschi to talk with him. Although I was in the office right next to his, it was as if we were living in two different universes. Nonetheless, on the astronomically rare occasions we met, he would always give me incredibly valuable suggestions. He was one of the most insightful people I ever met. Always of a few words, but he made sure those few counted.

What I vividly remember from our interactions are two quotes that have shaped my future career considerably. The first came when, in frustration, I complained about his supervising style. His reply explained his approach to mentoring future scientists:

*"When you are left in the middle of the ocean, either you learn how to swim, or you drown."*

I guess this was his way of making sure that students knew the difficulties of doing research and that the academic environment is not for the faint of heart. I told him I was fine with learning how to swim but I wished I could occasionally rely on some buoys to rest on during my long swim toward safe land. His characteristic long silence, while walking with his always-present cigarette in hand, was a clear indication he was not very receptive to my suggestion.

The second quote was even more enlightening. When I complained that he and I were not publishing much together he replied:

*"There are a lot of scientists in the world doing research. Among those, you want to be the signal not the noise."*

I really took his observation to heart. Although I may not have always succeeded in fulfilling such

*laurea* s'est répété. Baldereschi a revêtu sa typique cape d'invisibilité et n'a pas compris que les calendriers existaient depuis longtemps. Je n'ai pas pu le rencontrer. Même s'il acceptait de me rencontrer, il ne se présentait pas à nos réunions. Et ce comportement s'est poursuivi pendant des mois. Malgré cela, vers la fin de la première année, il m'a demandé si je resterais pour un doctorat régulier. Comme le dit le proverbe, *trompe-moi une fois, honte à toi, trompe-moi deux fois, honte à moi*. À ce moment-là, je savais déjà à quoi m'attendre et que je ne pouvais pas compter sur un retour régulier de sa part. Cependant, j'appréciais sa stature dans le domaine et l'opportunité qu'il m'offrait. J'ai donc accepté le poste et décidé que ma meilleure chance d'apprendre à devenir un physicien professionnel était de travailler seul, sur des sujets qui m'intéressaient vraiment. J'ai également commencé à collaborer avec d'autres personnes à l'EPFL et à l'étranger, y compris d'autres doctorants.

Ce fut une période intense et difficile, mais cela m'a donné la liberté de poursuivre mes propres intérêts, d'étudier une grande variété de sujets et de techniques théoriques, de rédiger des articles, de me battre avec les évaluateurs et d'apprendre à collaborer avec un ensemble varié de scientifiques, à la fois théoriciens et expérimentateurs. Je n'aurais pas pu le faire si j'avais eu un superviseur qui m'avait imposé son sujet de recherche et qui avait microgéré mon temps en me rencontrant régulièrement.

Pendant les quatre années que j'ai passées à l'EPFL, je peux compter sur les doigts d'une main les fois où j'ai rencontré Baldereschi pour discuter avec lui. Je me trouvais dans le bureau à côté du sien, mais c'était comme si nous évoluions dans deux univers différents. Néanmoins, lors des occasions astronomiquement rares où nous nous rencontrions, il m'a toujours donné des conseils incroyablement précieux. Il était l'une des personnes les plus perspicaces que j'aie jamais rencontrées. Il était toujours peu loquace, mais il veillait à ce que ses quelques mots comptent.

Ce que je retiens de nos échanges, ce sont deux citations qui ont considérablement influencé ma future carrière. La première est survenue lorsque, frustré, je me suis plaint de son style de supervision. Sa réponse a expliqué son approche de l'encadrement des futurs scientifiques :

a daunting precept, I now tell my own students the same thing. I think he foresaw the exponential increase in research productivity that makes it difficult to distinguish the signal from the noise.

Towards the middle of my fourth year at the EPFL, once again I saw his surprised face when I told him that I wanted to graduate soon. He asked me why I was not staying for another year. I told him I did not see the point: I needed a change of scenery, and the US seemed a great place where I could pursue my new research interests.

I then wrote my thesis and defended it in the summer of 1997. At EPFL there were two thesis defenses: the first and difficult one with only a committee of experts, including international ones, and an easy one for family and friends, if you passed the first one. Franco Bassani, Baldereschi's own supervisor, was one of the experts on my committee. It was really a treat to see two generations of supervisors on the same occasion.

Talk about a supervisor full of surprises: the night before my first defense, Baldereschi called me at home! I still remember I was completely shocked to hear his voice when I picked up the phone and I will never forget he asked me if everything was ready for my defense the following day, and if I needed any help. I was dumbstruck: my supervisor, whom I had barely met during my whole PhD, was asking me if I needed any help the day before my defense exam!

However, what struck me the most is what he said before he left the call. He told me: *"Massimiliano, you did a really great job during your PhD"*! Two things in that sentence were unusual. The first is that, following the tradition of Italian professors, Baldereschi had always addressed me in a formal manner, by my last name "Di Ventra", never by my first name. We students would also do the same, addressing our professors by their last name (in the American system, this habit would be considered weird). Second, I finally got encouraging words that I had never heard from him before.

I was of course elated, and I did go to the exam in high spirits. For almost two sweating hours, he

*« Quand on vous laisse au milieu de l'océan, soit vous apprenez à nager, soit vous vous noyez ».*

Je suppose que c'était sa façon de s'assurer que les étudiants connaissaient les difficultés de la recherche et que l'environnement universitaire n'était pas fait pour les âmes sensibles. Je lui ai dit que j'étais d'accord pour apprendre à nager, mais que j'aurais aimé pouvoir compter sur quelques bouées pour me reposer pendant ma longue traversée vers la terre ferme. Son long silence caractéristique, alors qu'il marchait en tenant toujours sa cigarette à la main, indiquait clairement qu'il n'était pas très réceptif à ma suggestion.

La deuxième citation est encore plus éclairante. Lorsque je me suis plaint que lui et moi ne publiions pas grand-chose ensemble, il m'a répondu

*« Il y a beaucoup de scientifiques dans le monde qui font de la recherche. Parmi eux, vous voulez être le signal et non le bruit ».*

J'ai vraiment pris son observation à cœur. Même si je n'ai pas toujours réussi à respecter un précepte aussi intimidant, je dis maintenant la même chose à mes propres étudiants. Je pense qu'il avait prévu l'augmentation exponentielle de la productivité de la recherche qui rend difficile la distinction entre le signal et le bruit.

Vers le milieu de ma quatrième année à l'EPFL, j'ai de nouveau vu la surprise sur son visage lorsque je lui ai dit que je voulais bientôt obtenir mon diplôme de doctorat. Il m'a demandé pourquoi je ne restais pas une année de plus. Je lui ai répondu que je n'en voyais pas l'intérêt : j'avais besoin de changer d'air, et les États-Unis me semblaient un endroit idéal pour poursuivre mes nouveaux intérêts de recherche.

J'ai donc rédigé ma thèse et l'ai soutenue durant l'été 1997. À l'EPFL, il y avait deux soutenances de thèse : la première, difficile, avec un comité d'experts incluant des membres internationaux, et la seconde, facile, pour la famille et les amis, si l'on réussissait la première. Franco Bassani, le superviseur de Baldereschi lui-même, était l'un des experts de mon comité. C'était vraiment un plaisir de voir deux générations de superviseurs à la même occasion.

C'était vraiment un superviseur plein de surprises : la veille de ma première soutenance, Baldereschi m'a appelé chez moi ! Je n'oublierai jamais qu'il m'a

was the one asking more questions than the rest of the committee! The good news was that he really seemed interested in what I had done in the past four years and wanted to learn more details. After graduation, he was very encouraging about my prospects in academia, and I felt closer to him than ever.

A few days later, before leaving for the US, he also graciously agreed to replace my official diploma document that had been torn to pieces by my son (then aged two) while playing during our packing. When I told Baldereschi what my son had done, his face lit up with amusement, almost as if he also experienced such moments in his family life. It was a great memory of him when we said goodbye.

## Epilogue

After leaving Lausanne in 1997, I met Baldereschi only a couple of times, including for his 60<sup>th</sup> birthday celebration. Although we did not have much time



60<sup>e</sup> anniversaire d'Alfonso à Palau, Sardaigne.

demandé si tout était prêt pour ma soutenance du lendemain et si j'avais besoin d'aide. J'étais abasourdi : mon superviseur, que j'avais à peine rencontré pendant toute la durée de mon doctorat, me demandait si j'avais besoin d'aide la veille de mon examen de soutenance !

Mais ce qui m'a le plus frappé, c'est ce qu'il a dit avant de raccrocher. Il m'a dit : « *Massimiliano, tu as fait un très bon travail pendant ton doctorat* » ! Deux choses dans cette phrase sont inhabituelles. La première est que, conformément à la tradition des professeurs italiens, Baldereschi s'était toujours adressé à moi de manière formelle, par mon nom de famille « Di Ventra », jamais par mon prénom. Nous, les étudiants, faisons de même, en nous adressant à nos professeurs par leur nom de famille (dans le système américain, cette habitude serait considérée comme bizarre). Deuxièmement, j'avais enfin reçu des mots d'encouragement que je n'avais jamais entendus de sa part auparavant.

J'étais bien sûr ravi et je me suis présenté à l'examen avec un moral d'acier. Pendant près de deux heures de sueur, c'est lui qui a posé le plus de questions que le reste de la commission ! La bonne nouvelle, c'est qu'il semblait vraiment intéressé par ce que j'avais fait au cours des quatre dernières années et qu'il voulait en savoir plus. Après la remise du diplôme, il s'est montré très encourageant quant à mes perspectives dans le monde universitaire, et je me suis senti plus proche de lui que jamais.

Quelques jours plus tard, avant de partir pour les États-Unis, il a gracieusement accepté de remplacer le document officiel de mon diplôme qui avait été déchiré par mon fils (âgé de deux ans à l'époque) alors qu'il jouait pendant que nous faisons nos valises. Lorsque j'ai raconté à Baldereschi ce qu'avait fait mon fils, son visage s'est illuminé d'amusement, comme s'il avait lui aussi vécu de tels moments dans sa vie familiale. C'était un excellent souvenir de lui lorsque nous nous sommes quittés.

## Épilogue

Après avoir quitté Lausanne en 1997, je n'ai eu l'occasion de rencontrer Baldereschi que quelques fois,

to talk on those occasions, he seemed interested in what I was doing. At the time, I was working on first principles approaches to quantum transport, the topic he suggested to me when I first got to Lausanne, but I never completed during my PhD. I told him I finally had a chance of finishing that project. I think it was the last time we spoke. I still remember his deep voice addressing me by my first name, and in return, I felt at ease calling him "Alfonso": the formal barrier between supervisor and student had disappeared and he was speaking to me as if to a peer.

This memory is also a source of some sadness now that he passed away. I never had a chance to tell him how sorry I was to have harbored some resentment towards him when I was his student. I even expressed my frustration to him on one occasion and he took it as the true gentleman he was, without showing any distress or disappointment.

I also never had a chance to thank him for being my supervisor. These recollections give me that opportunity, albeit belatedly. I can now expand on the answer to the question I put at the beginning of this essay with sincerity and from the bottom of my heart.

How important was my supervisor, Alfonso Baldereschi, in my career and life? He was *immensely important*!

Mind you, not in a nurturing way as in the "ideal" version I portrayed at the beginning of this note. Far from it. Yet his influence on me has been much more precious and profound than if he had been such a supervisor. He showed and made me experience firsthand that nothing comes easy. That determination, grit, and perseverance are important assets to acquire and the best currency to spend in our endeavors. That we need to focus our hard work on the things that really make a difference; never settle for the easy road. That we do not need to be afraid to travel off the beaten path and go against the flow, no matter what the "wisdom of the crowd" says.

Looking back, I now appreciate he put in me an enormous trust: that I could make it on my own. He trusted I would mature as a scientist and as a man even if

notamment lors de la célébration de son 60<sup>e</sup> anniversaire. Bien que nous n'ayons pas eu beaucoup de temps pour parler à ces occasions, il a semblé intéressé par ce que je faisais. À l'époque, je travaillais sur les approches du transport quantique à partir de principes premiers, le sujet qu'il m'avait suggéré lorsque je suis arrivé à Lausanne, mais que je n'ai jamais terminé pendant mon doctorat. Je lui ai dit que j'avais enfin une chance de terminer ce projet. Je pense que c'était la dernière fois que nous nous parlions. Je me souviens encore de sa voix grave qui s'adressait à moi par mon prénom, et en retour, je me sentais à l'aise en l'appelant « Alfonso » : la barrière formelle entre le superviseur et l'étudiant avait disparu et il s'adressait à moi comme à un pair.

Ce souvenir est aussi une source de tristesse maintenant qu'il est décédé. Je n'ai jamais eu l'occasion de lui dire à quel point j'étais désolé d'avoir nourri un certain ressentiment à son égard lorsque j'étais son étudiant. Je lui ai même fait part de ma frustration à une occasion et il l'a prise comme le vrai gentleman qu'il était, sans montrer la moindre détresse ou déception.

Je n'ai jamais eu l'occasion de le remercier d'avoir été mon superviseur. Ces souvenirs m'en donnent l'occasion, bien que tardivement. Je peux maintenant développer la réponse à la question que j'ai posée au début de cet essai avec sincérité et du fond du cœur.

À quel point mon superviseur académique, Alfonso Baldereschi, était-il important dans ma carrière et dans ma vie ? Il a été *immensément important* !

Attention, pas d'une manière nourricière comme dans la version « idéale » que j'ai dépeinte au début de cette note. Loin de là. Pourtant, son influence sur moi a été bien plus précieuse et profonde que s'il avait été un tel superviseur. Il m'a montré et donné une expérience directe du fait que rien n'est facile. Que la détermination, le cran et la persévérance sont des atouts importants à acquérir et la meilleure monnaie d'échange à dépenser dans nos efforts. Que nous devons concentrer nos efforts sur les choses qui font vraiment la différence et ne jamais nous contenter de la facilité. Nous ne devons pas avoir peur de sortir des sentiers battus et d'aller à contre-courant, quoi qu'en dise la « sagesse des foules ».

he was looking from afar. In fact, I now realize that this was his plan all along. In his unique way, he has always followed and has been present in my career.

The thought "I want to become as good a physicist as he is," from the very first time I met him as a teacher, has always been my professional goal and aspiration as a scientist. His personality and character have shaped me profoundly, and the memory of the great man he was will always stay with me.

For this, I thank you, Alfonso!

Avec le recul, je me rends compte qu'il m'a accordé une énorme confiance : celle de pouvoir me débrouiller seul. Il estimait que j'allais mûrir en tant que scientifique et en tant qu'homme, même s'il me regardait de loin. En fait, je réalise aujourd'hui que c'était son plan depuis le début. À sa manière unique, il m'a toujours suivi et a été présent dans ma carrière.

La pensée « *Je veux devenir un aussi bon physicien que lui* », depuis la première fois que je l'ai rencontré en tant que professeur, a toujours été mon objectif professionnel et mon aspiration en tant que scientifique. Sa personnalité et son caractère m'ont profondément marqué, et le souvenir du grand homme qu'il était restera toujours gravé dans ma mémoire.

Pour cela, je te remercie, Alfonso !

## À la mémoire d'un professeur inspirant

---

**Julien Bardi**

---

Cher Professeur,

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude pour le rôle essentiel que vous avez joué dans mon parcours académique et professionnel. Votre attitude bienveillante, votre soutien inconditionnel et la liberté que vous m'avez accordée ont été des sources d'inspiration tout au long de ma carrière.

Je vous ai rencontré lors du cours de simulation numérique. Vous m'avez laissé une forte impression grâce à vos cours didactiques et bien construits. La

partie pratique avec Michel Posternak était enrichissante et motivante, parfaitement alignée avec votre enseignement. Votre cours et la compétence de votre entourage m'ont motivé à effectuer mon travail de diplôme avec Nadia Binggeli en 1995 dans votre groupe. La qualité de nos échanges m'a encouragé à poursuivre jusqu'à ma thèse en 1999.

Votre capacité à encourager la créativité et à favoriser l'autonomie m'a permis de repousser mes limites et d'explorer des domaines qui me passionnaient. Votre confiance en mes capacités a été un moteur



puissant pour mon développement personnel et professionnel.

Votre rigueur dans le raisonnement, votre sens des priorités et votre attitude m'ont certainement forgé pour la suite de ma carrière. Vous m'avez inculqué l'importance d'un certain panache lors des présentations et l'importance de l'entourage pour l'émulation au sein d'une équipe.

Les calculs numériques massivement parallèles sont devenus courants de nos jours. Je les utilise aujourd'hui au quotidien. L'expertise acquise à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) ainsi que sur les machines du Centro Svizzero di Calcolo Scientifico (CSCS) est une base solide pour mon travail et une source de fierté lorsque je vois le succès pérenne de ces organisations.

Vous avez été un mentor et un modèle. La façon dont vous avez organisé votre succession scientifique est impressionnante. Je suis fier d'avoir eu la chance de travailler à vos côtés et d'avoir bénéficié de votre expertise. Vous avez su vous entourer de collègues brillants avec lesquels j'ai éprouvé du plaisir à échanger, apprendre et passer de bons moments.

Merci, cher Professeur, pour tout ce que vous avez apporté à ma vie professionnelle. Votre impact est durable, et je continuerai à m'inspirer de votre exemple.

Avec toute ma reconnaissance,

Julien Bardi

## Alfonso, absent et présent

---

Christophe Berthod

---

En 1994, Alfonso Baldereschi m'a invité par l'entremise de Nadia Binggeli à rejoindre son groupe pour réaliser une thèse sur le calcul *ab initio* des barrières de Schottky. Encore aujourd'hui, je me félicite d'avoir accepté cette proposition qui m'a permis, pendant les années suivantes, de bénéficier des lumières de ces deux personnalités remarquables qui ont durablement marqué mon parcours scientifique. Dès le début, Alfonso m'a accordé une autonomie inhabituelle, m'offrant la liberté de développer ma propre réflexion tout en bénéficiant de son soutien ponctuel mais décisif.

Les entretiens planifiés avec Alfonso se résumaient au rendez-vous annuel à la veille de Noël. Ils se déroulaient dans une ambiance détendue et chaleureuse. Ces échanges allaient bien au-delà des questions purement scientifiques et constituaient des moments privilégiés pour discuter aussi bien de la recherche que de sujets plus généraux. En quelques mots, Alfonso parvenait à dissiper mes doutes et à réorienter mes efforts. Le reste de l'année, sous la supervision régulière de Nadia, j'avais toute latitude pour explorer, expérimenter et parfois me perdre dans la tentative de comprendre et de modéliser mes

calculs *ab initio*, ce qui me stimulait au moins autant que de les produire. C'était un processus long et souvent infructueux où l'intervention d'Alfonso avait la capacité de délivrer une impulsion déterminante.

L'un des conseils les plus précieux qu'il m'ait prodigués fut de privilégier la recherche ancrée dans des résultats expérimentaux, plutôt que celle qui s'efforce de tirer des prédictions de la seule théorie. Cette recommandation illustre sa compréhension fine des individus et de la manière dont chacun appréhende la recherche : Alfonso avait sans doute perçu que cette approche correspondait davantage à mes aptitudes et à mes affinités intellectuelles.

Alfonso Baldereschi restera gravé dans ma mémoire comme un homme inspirant, joyeux et profondément humain. Ses anecdotes savoureuses sur l'époque des cartes perforées témoignaient de son riche parcours et de son intérêt constant pour les matériaux électroniques et leur modélisation. Ses nombreux voyages entre Lausanne et Trieste ne l'empêchaient pas d'être présent pour son équipe. Il savait, avec humour et bienveillance, rappeler sa disponibilité par une simple remarque comme : « *Je sais que tu m'as envoyé un email* » ou « *J'ai vu passer un objet à deux colonnes* ». Ces phrases lancées au détour d'un couloir révélaient une attention constante, même à distance. Son approche de la recherche, tout autant que sa personnalité, m'ont laissé leur empreinte et continueront de m'accompagner.

## Un ricordo di Alfonso Baldereschi Un souvenir d'Alfonso Baldereschi

---

Andrea Dal Corso

---

Ho conosciuto Alfonso Baldereschi nella primavera del 1993, quando mi invitò a passare un mese a Losanna per una visita all'Istitut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA). L'istituto in quel periodo era diretto da Roberto Car e molti giovani, tra cui Alfredo Pasquarello, Francesco Mauri, Giulia Galli, François Gygi, e Alessandro De Vita lavoravano là. Io avevo 28 anni, ad ottobre avrei finito il PhD alla SISSA di Trieste, e stavo cercando un post-doc. Raffaele Resta, mio relatore di tesi, collaborava già da molto tempo con Alfonso Baldereschi e quindi mi propose di iniziare il post-doc a Losanna. Pensavo che sarei rimasto in Svizzera per sei mesi, la durata iniziale del contratto, e sarei tornato subito dopo in Italia. Quei sei mesi però, prorogati di sei mesi

J'ai rencontré Alfonso Baldereschi au printemps 1993, lorsqu'il m'a invité à passer un mois à Lausanne pour une visite à l'Istitut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA). L'institut était alors dirigé par Roberto Car et de nombreux jeunes gens, dont Alfredo Pasquarello, Francesco Mauri, Giulia Galli, François Gygi et Alessandro de Vita, y travaillaient. J'avais 28 ans, en octobre j'allais terminer mon doctorat à la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) à Trieste, et je cherchais un postdoctorat. Raffaele Resta, mon directeur de thèse, travaillait déjà avec Alfonso Baldereschi depuis longtemps, et il m'a proposé de commencer un postdoctorat à Lausanne. Je pensais rester en Suisse pendant six mois, la durée initiale du contrat, et retourner en

in sei mesi, furono l'inizio di una collaborazione quinquennale con Alfonso Baldereschi che di fatto era il mio unico referente a Losanna anche se ero libero di collaborare con chiunque volessi. Il progetto iniziale era di calcolare il tensore piroelettrico dell'ossido di zinco (ZnO) usando la teoria della polarizzazione basata sulla fase di Berry appena proposta da Vanderbilt e Resta. Dovemmo accontentarci del tensore piezoelettrico [1], ma quel lavoro fu l'inizio della mia collaborazione con Alfonso Baldereschi e delle innumerevoli discussioni di fisica che ebbi con lui.

Per calcolare il tensore piroelettrico avremmo dovuto calcolare il parametro interno di ZnO in funzione della temperatura e per questo servivano i fononi. Gli proposi di estendere la teoria della risposta lineare, su cui io avevo lavorato durante la tesi di PhD, agli pseudopotenziali ultrasoffici che avrebbero permesso di trattare lo zinco e l'ossigeno. Alfonso Baldereschi mi diede il tempo di sviluppare il progetto e i miei sei mesi cominciarono a diventare anni. Nel frattempo, uscì il lavoro di Nunes e Vanderbilt [2] in cui si mostrava, in un modello tight binding, come simulare un solido in un campo elettrico usando le funzioni di Wannier, argomento su cui iniziai a lavorare con Francesco Mauri [3]. Alfonso Baldereschi vide le potenzialità del metodo e propose a uno studente di PhD (Pablo Fernández) di implementarlo *ab initio* per calcolare le funzioni di Wannier e la risposta a un campo elettrico. I primi frutti si videro solo due anni dopo quando riuscimmo a pubblicare il primo lavoro sulla Density Functional Perturbation Theory (DFPT) con gli pseudopotenziali ultrasoffici [4] e due sul calcolo delle funzioni di Wannier [5,6]

A quel punto iniziammo a cercare di usare i fononi per calcolare le vibrazioni degli adsorbati sulle superfici, un problema di interesse sperimentale. Un nuovo studente di PhD (Fabio Favot) arrivò da Trieste e iniziammo a studiare il benzene su Pd(110) [7], il CO/Cu(001) [8] e i miei sei mesi si allungarono di nuovo. Per me però diventava sempre più difficile rimanere in Svizzera, volevo tornare in Italia e quando, alla fine del 1998, mi fu offerto un posto alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) lo accettai. La collaborazione con Alfonso Baldereschi durò altri due anni fino alla fine del PhD di Fabio. Per

Italie immédiatement après. Mais ces six mois, prolongés de six mois en six mois, ont été le début d'une collaboration de cinq ans avec Alfonso Baldereschi, qui était en fait mon seul référent à Lausanne, même si j'étais libre de collaborer avec qui je voulais. Le projet initial était de calculer le tenseur pyroélectrique de l'oxyde de zinc (ZnO) en utilisant la théorie de la polarisation basée sur la phase de Berry qui venait d'être proposée par Vanderbilt et Resta. Nous avons dû nous contenter du tenseur piézoélectrique [1], mais ce travail a marqué le début de ma collaboration avec Alfonso Baldereschi et des innombrables discussions de physique que j'ai eues avec lui.

Pour calculer le tenseur pyroélectrique, il aurait fallu calculer le paramètre interne du ZnO en fonction de la température et pour cela il fallait des phonons. Je lui ai proposé d'étendre la théorie de la réponse linéaire, sur laquelle j'avais travaillé pendant ma thèse de doctorat, aux pseudopotentiels *ultrasoft* qui nous permettraient de traiter le zinc et l'oxygène. Alfonso Baldereschi m'a donné le temps de développer le projet et mes six mois se sont transformés en années. Entre-temps, le travail de Nunes et Vanderbilt [2] a été publié, dans lequel ils ont montré, dans un modèle des liaisons fortes, comment simuler un solide dans un champ électrique en utilisant des fonctions de Wannier, un sujet sur lequel j'ai commencé à travailler avec Francesco Mauri [3]. Alfonso Baldereschi a vu le potentiel de la méthode et a proposé à un doctorant (Pablo Fernández) de l'implémenter *ab initio* pour calculer les fonctions de Wannier et la réponse à un champ électrique. Les premiers fruits n'ont été visibles que deux ans plus tard, lorsque nous avons réussi à publier le premier article sur la théorie des perturbations de la fonctionnelle de la densité avec des pseudopotentiels *ultrasoft* [4] et deux sur le calcul des fonctions de Wannier [5,6].

À ce moment-là, nous avons commencé à essayer d'utiliser les phonons pour calculer les vibrations des adsorbats sur les surfaces, un problème d'intérêt expérimental. Un nouveau doctorant (Fabio Favot) est arrivé de Trieste et nous avons commencé à étudier le benzène sur Pd(110) [7], CO/Cu(001) [8] et mes six mois se sont allongés de nouveau. Cependant, il m'était de plus en plus difficile de rester en Suisse, je voulais retourner en Italie et lorsqu'on m'a proposé un poste à la SISSA à la fin de l'année 1998, je l'ai accepté.

esempio, calcolammo le proprietà CO/Ni(110) [9], ma alla fine le nostre strade si divisero.

Sfortunatamente non sono mai stato uno studente di Alfonso Baldereschi e non ho mai seguito i suoi corsi tranne uno. Nel 1998 mi propose di fargli da assistente per il corso di teoria dei gruppi applicata alla meccanica quantistica che teneva all'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). Tra le molte cose che ho imparato da Alfonso Baldereschi quel corso è stata una delle più preziose. È con molta tristezza che ho saputo della sua scomparsa e vorrei aver avuto l'occasione di dirgli il mio grazie per tutto quello che mi ha insegnato e per gli anni in cui ha condiviso un po' del suo tempo e delle sue conoscenze con me. Grazie Alfonso.

La collaborazione con Alfonso Baldereschi a duré encore deux ans, jusqu'à la fin du doctorat de Fabio. Par exemple, nous avons calculé les propriétés de CO/Ni(110) [9], mais nos chemins ont fini par se séparer.

Malheureusement, je n'ai jamais été un étudiant d'Alfonso Baldereschi et je n'ai suivi aucun de ses cours, à l'exception d'un seul. En 1998, il m'a proposé d'être son assistant pour le cours de théorie des groupes appliquée à la mécanique quantique qu'il donnait à l'EPFL. Parmi les nombreuses choses que j'ai apprises d'Alfonso Baldereschi, ce cours a été l'une des plus précieuses. C'est avec une grande tristesse que j'ai appris son décès et j'aurais aimé avoir la chance de le remercier pour tout ce qu'il m'a appris et pour les années durant lesquelles il a partagé avec moi une partie de son temps et de ses connaissances. Merci Alfonso.

- [1] A. Dal Corso, M. Posternak, R. Resta, A. Baldereschi, *Ab initio* study of piezoelectricity and spontaneous polarization in ZnO, *Phys. Rev. B* **50**, 10715 (1994).
- [2] R. W. Nunes, D. Vanderbilt, Real-Space Approach to Calculation of Electric Polarization and Dielectric Constants, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 712 (1994).
- [3] A. Dal Corso, F. Mauri, Wannier and Bloch orbital computation of nonlinear susceptibility, *Phys. Rev. B* **50**, 5756 (1994).
- [4] A. Dal Corso, A. Pasquarello, A. Baldereschi, Density-functional perturbation theory for lattice dynamics with ultrasoft pseudopotentials, *Phys. Rev. B* **56**, R11369 (1997).
- [5] P. Fernández, A. Dal Corso, F. Mauri, A. Baldereschi, First-principle Wannier functions of silicon and gallium arsenide, *Phys. Rev. B* **55**, 1909 (1997).
- [6] P. Fernández, A. Dal Corso, A. Baldereschi, *Ab initio* study of the dielectric properties of silicon and gallium arsenide using polarized Wannier functions, *Phys. Rev. B* **58**, R7480 (1998).
- [7] F. Favot, A. Dal Corso, A. Baldereschi, Absorption geometry of benzene on Pd (110): Results of first-principles calculations, *Europhys. Lett.* **52**, 698 (2000).
- [8] F. Favot, A. Dal Corso, A. Baldereschi, CO adsorbed on Cu (001): A comparison between local density approximation and Perdew, Burke, and Ernzerhof generalized gradient approximation, *J. Chem. Phys.* **114**, 483 (2001).
- [9] F. Favot, A. Dal Corso, A. Baldereschi, *Ab initio* study of CO adsorption on Ni (110): Effects on surface magnetism at low coverage, *Phys. Rev. B* **63**, 115416 (2001).

# A story of physics, humor, and inspiration: my time with Professor Alfonso Baldereschi

## Physique, humour et inspiration: mon temps avec le Professeur Alfonso Baldereschi

---

**Fabio Favot**

---

It was 1993, my third year at the University of Trieste, when I first encountered Professor Alfonso Baldereschi. I had just joined his class, *Struttura della Materia*, where quantum mechanics collided with the complexities of condensed matter. I remember feeling a mixture of excitement and intimidation, knowing that I was stepping into the realm of some of the most abstract concepts in physics. Yet, within the first few minutes of his lecture, I was utterly captivated.

Alfonso's teaching style was unlike anything I had experienced before. His explanations were clear, his pace deliberate, and he made generous use of silent pauses that somehow deepened our understanding. His "storytelling" approach brought life to the otherwise cold and complicated calculations of quantum mechanics. I recall vividly his wide arm gestures as he described the orbitals of the hydrogen atom, and his even more dramatic interpretation of the helium atom. The class was spellbound, and for many of us, it felt like we were understanding atomic-level physics for the first time.

Students were eager to talk with him after each lecture, often queuing for a chance to ask questions or seek further insights. Alfonso had a talent for making difficult concepts seem accessible, and his lectures were an absolute highlight of my Physics degree.

Two years later, when I chose to specialize in solid-state physics, I asked Alfonso if I could work with him and his team on my final degree thesis. I knew

C'est en 1993, lors de ma troisième année à l'Université de Trieste, que j'ai rencontré pour la première fois le Professeur Alfonso Baldereschi. Je venais de rejoindre son cours, *Struttura della Materia*, où la mécanique quantique entrait en collision avec les complexités de la matière condensée. Je me souviens avoir ressenti un mélange d'excitation et d'intimidation, sachant que j'entrais dans le domaine des concepts les plus abstraits de la physique. Pourtant, dès les premières minutes de son cours, j'ai été totalement captivé.

Le style d'enseignement d'Alfonso ne ressemblait à rien de ce que j'avais connu auparavant. Ses explications étaient claires, son rythme délibéré et il faisait un usage généreux des pauses silencieuses qui, d'une manière ou d'une autre, approfondissaient notre compréhension. Son approche « narrative » donnait vie aux calculs autrement froids et compliqués de la mécanique quantique. Je me souviens très bien des gestes amples de ses bras lorsqu'il décrivait les orbitales de l'atome d'hydrogène, et de son interprétation encore plus dramatique de l'atome d'hélium. La classe était sous le charme, et pour beaucoup d'entre nous, nous avions l'impression de comprendre pour la première fois la physique au niveau atomique.

Les étudiants étaient impatients de discuter avec lui après chaque cours, faisant souvent la queue pour avoir la chance de poser des questions ou d'obtenir des éclaircissements supplémentaires. Alfonso avait le talent de rendre accessibles des concepts difficiles, et ses cours ont été un moment fort de mon cursus de physique.



this was no small ask: thesis work in Italy is a rigorous, 9- to 18-month-long journey into scientific research, with the possibility of publishing a paper at the end. I was thrilled when he accepted me under his wing, and I began my journey as a researcher at the Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, where his team was based.

One of my fondest memories was when Alfonso handed me a paper he had written during his time at Bell Labs, known as the Baldereschi point—a groundbreaking work that identified a special point in the Brillouin zone such that “the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone.” I was fascinated not only by the content but also by the humility and humor in his writing style. I still remember a paragraph where he humorously admitted that calculating the exact mean value of the wave vector function would be “asking too much” and that he was just happy with “a reasonably good” approximation. It was at that moment I realized I was working with a true celebrity in the world of computational solid-state physics.

Alfonso was not the kind of project leader you saw every day, but when you did manage to steal an hour of his time, it was pure gold. His ideas were always forward thinking, and discussions with him left you buzzing with new concepts and opportunities. My day-to-day guidance came from Dr. Maria Peressi, who had the patience of a saint as she “spoon-fed” me through the intricacies of density functional theory and the challenges of computational physics. We worked on old Unix-based alphanumeric computers, some with green-crystal screens, and wrote our programs in Fortran 77. The real thrill, though, was having almost unlimited access to supercomputers like the Cray X-MP and Y-MP, where our code would run for days.

After successfully completing my thesis on the electronic properties of semiconducting junctions, I was offered a PhD position by Alfonso at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). Legend has it that Alfonso would give a class in Trieste one day, work in the night train, and be in Lausanne to

Deux ans plus tard, lorsque j’ai choisi de me spécialiser en physique du solide, j’ai demandé à Alfonso si je pouvais travailler avec lui et son équipe sur ma thèse de fin d’études. Je savais que ce n’était pas une mince affaire : en Italie, le travail de thèse est un voyage rigoureux de 9 à 18 mois dans la recherche scientifique, avec la possibilité de publier un article à la fin. J’ai été ravi qu’il m’accepte sous son aile et j’ai commencé mon parcours en tant que chercheur au Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, où son équipe était basée.

L’un de mes plus beaux souvenirs est celui où Alfonso m’a remis un document qu’il avait rédigé pendant son séjour aux Laboratoires Bell, connu sous le nom de point de Baldereschi – un travail révolutionnaire qui identifiait un point particulier de la zone de Brillouin tel que « la valeur qu’une fonction périodique donnée du vecteur d’onde prend en ce point est une excellente approximation de la valeur moyenne de la même fonction dans toute la zone de Brillouin ». J’ai été fasciné non seulement par le contenu, mais aussi par l’humilité et l’humour de son style d’écriture. Je me souviens encore d’un paragraphe où il admet avec humour que calculer la valeur moyenne exacte de la fonction du vecteur d’onde « serait trop demander » et qu’il se contente d’une approximation « raisonnablement bonne ». C’est à ce moment-là que j’ai réalisé que je travaillais avec une véritable célébrité dans le monde de la physique computationnelle de l’état solide.

Alfonso n’était pas le genre de chef de projet que l’on voyait tous les jours, mais quand on parvenait à lui voler une heure de son temps, c’était de l’or pur. Ses idées étaient toujours avant-gardistes, et les discussions avec lui vous donnaient l’impression d’avoir découvert de nouveaux concepts et de nouvelles opportunités. La Dr. Maria Peressi m’a guidé au quotidien, avec une patience d’ange, dans les méandres de la théorie de la fonctionnelle de la densité et les défis de la physique numérique. Nous travaillions sur de vieux ordinateurs alphanumériques basés sur Unix, certains avec des écrans en cristal vert, et nous écrivions nos programmes en Fortran 77. Mais ce qui était vraiment passionnant, c’était d’avoir un accès presque illimité à des superordinateurs comme les Cray X-MP et Y-MP, sur lesquels notre code pouvait tourner pendant des jours.

give another lecture within 24 hours. When I arrived in Lausanne, my office was just across from his, and I quickly noticed his room was incredibly crowded, with towering piles of papers and documents, all meticulously clustered into plastic folders, as if he had found a way to apply quantum mechanics to office organization. There, I met other PhD students under his mentorship and began to build a social life in this new country, grappling with a language I did not speak yet.

As per Alfonso's direction, my PhD research focused on the study of the structural, electronic, magnetic, and vibrational properties of molecules adsorbed on transition metal surfaces using *ab initio* calculations. I applied the same methodology as in my undergraduate thesis—density functional theory in the local density approximation—but to different systems.

As part of my doctorate, I also served as Alfonso's teaching assistant for the course entitled *Expérimentation numérique* (methods in computational physics). This role was a valuable opportunity for me to both learn and teach numerical methods, which I would later apply in my PhD thesis. Interestingly, Alfonso's teaching style in Lausanne was just as engaging and convincing as it had been five years earlier in Trieste, just in a different language.

During my PhD my interactions with Alfonso were sparse, as he soon delegated my supervision to Dr. Andrea Dal Corso. However, I cherished the moments we did have, particularly during my *soutenance publique* where Alfonso introduced my work with a hint of sarcasm. He alluded to my tendency to run the plane-wave code almost non-stop without taking enough time to interpret the results, possibly predicting that my action-oriented nature might not suit a lifelong career in fundamental research.

Twenty-five years later, with a mix of pride and regret about my decision to leave academia, I look back with immense respect and admiration for Alfonso Baldereschi. He was more than a professor or a supervisor—he was an inspiration, a mentor, and one of the few people who could light up a lecture hall or a research discussion with both brilliance and humor.

Après avoir terminé avec succès ma thèse sur les propriétés électroniques des jonctions semi-conductrices, Alfonso m'a proposé un poste de doctorant à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). Selon la légende, Alfonso donnait un jour un cours à Trieste, travaillait dans le train de nuit et était à Lausanne pour donner un autre cours dans les 24 heures. Lorsque je suis arrivé à Lausanne, mon bureau se trouvait juste en face du sien, et j'ai rapidement remarqué que sa pièce était incroyablement encombrée, avec d'énormes piles de papiers et de documents, tous méticuleusement regroupés dans des chemises en plastique, comme s'il avait trouvé un moyen d'appliquer la mécanique quantique à l'organisation d'un bureau. Là, j'ai rencontré d'autres doctorants sous son mentorat et j'ai commencé à construire une vie sociale dans ce nouveau pays, en me débattant avec une langue que je ne parlais pas encore.

Conformément aux directives d'Alfonso, mes recherches de doctorat se sont concentrées sur l'étude des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et vibratoires des molécules adsorbées sur des surfaces de métaux de transition à l'aide de calculs *ab initio*. J'ai appliqué la même méthodologie que dans ma thèse de *laurea* – la théorie de la fonctionnelle de la densité dans l'approximation de la densité locale –, mais à des systèmes différents.

Dans le cadre de mon doctorat, j'ai également été l'assistant d'Alfonso pour le cours intitulé *Expérimentation numérique*. Ce rôle m'a donné l'occasion d'apprendre et d'enseigner les méthodes numériques, que j'ai appliquées plus tard dans ma thèse de doctorat. Il est intéressant de noter que le style d'enseignement d'Alfonso à Lausanne était tout aussi engageant et convaincant qu'il l'avait été cinq ans plus tôt à Trieste, mais dans une langue différente.

Pendant mon doctorat, mes interactions avec Alfonso ont été rares, car il a rapidement délégué ma supervision au Dr. Andrea Dal Corso. Cependant, j'ai apprécié les moments que nous avons eus, en particulier lors de ma soutenance publique, au cours de laquelle Alfonso a présenté mon travail avec une pointe de sarcasme. Il a fait allusion à ma tendance à faire tourner le code des ondes planes presque sans

I am deeply honored to have worked with him and to have been part of his world, if only for a brief time. Thank you, Alfonso, for everything.

arrêt sans prendre le temps d'interpréter les résultats, prédisant peut-être que ma nature orientée vers l'action ne conviendrait pas à une carrière de toute une vie dans la recherche fondamentale.

Vingt-cinq ans plus tard, avec un mélange de fierté et de regret quant à ma décision de quitter le monde universitaire, je regarde en arrière avec un immense respect et une immense admiration pour Alfonso Baldereschi. Il était plus qu'un professeur ou un superviseur : il était une source d'inspiration, un mentor et l'une des rares personnes capables d'illuminer un amphithéâtre ou une discussion de recherche avec autant de brio que d'humour. Je suis profondément honoré d'avoir travaillé avec lui et d'avoir fait partie de son monde, ne serait-ce que pendant une brève période. Merci, Alfonso, pour tout.

## Occupiamo lo spazio con un atomo di neon Nous allons occuper l'espace avec un atome de néon

---

Giovanni Cangiani

---

Alfonso Baldereschi era come il bosone di Higgs: difficile da rivelare, ma in grado di dare peso a tutti coloro con i quali interagisce.

Un appuntamento di mezz'ora previsto per le 10 del mattino si trasformava in un incontro che cominciava alle 4 del pomeriggio e terminava a notte fonda. Quando metteva la sua attenzione su un problema, la sua concentrazione era totale ed esclusiva e il tempo gli sfuggiva di mano, con buona pace di tutti gli altri appuntamenti della giornata. Come un terno al lotto, le discussioni con lui erano tanto rare quanto fruttuose e garantivano al fortunato vincitore momenti di

Alfonso Baldereschi était comme le boson de Higgs : difficile à détecter, mais qui donne du poids à tous ceux avec qui il interagit.

Un rendez-vous d'une demi-heure prévu à 10 heures se transformait en une réunion qui commençait à 16 heures et se terminait tard dans la nuit. Lorsqu'il portait son attention sur un problème, sa concentration était totale et exclusive, et le temps lui échappait, au détriment de tous les autres rendez-vous de la journée. Comme un billet gagnant d'EuroMillions, les discussions avec lui étaient aussi rares que fructueuses et garantissaient à l'heureux gagnant des

pura estasi. Mi ricordo di ogni singolo incontro esclusivo avuto con lui e credo di non aver mai imparato tanto in così poco tempo.

Fatto sta che, con questo concetto elastico del tempo, la sua agenda era sempre sovraccarica. Così, per legittima difesa a volte egli scompariva, facendo credere a Trieste di essere a Losanna e viceversa. Inutile cercare una risposta controllando la presenza della sua auto nel parcheggio perché ne aveva due identiche (Alfa 155 V6 rossa bordeaux a dimostrazione del suo estremo buon gusto anche negli aspetti pratici della vita) parcheggiate una al Centro internazionale di fisica teorica (ICTP) di Trieste e l'altra al Politecnico di Losanna.

Aveva una capacità di "vedere" la fisica di atomi, molecole e solidi come un musicista con l'orecchio assoluto sente i suoni, ma in molte più dimensioni. Negli anni mi ha insegnato a usare il calcolatore come un apparato sperimentale, con il vantaggio di poterci eseguire degli esperimenti impossibili nella realtà ma capaci di isolare i fenomeni fisici interessanti in modo da capirli nella loro essenza.

La prima conferma che non si trattasse di una persona normale, la ebbi al suo corso di *Struttura della Materia* all'Università di Trieste. In modo sempre uguale, faceva il suo ingresso in classe camminando lentamente e inondandola di un piacevole profumo di dopobarba. Giunto in cattedra, vi poggiava il suo orologio da tasca con tutta la lunga catenella d'argento, ne apriva il coperchio e attaccava con un capolavoro di lezione che avrebbe richiesto mesi di preparazione a chiunque (salvo il fatto che lui magari era appena sceso dal "treno di Baldereschi", come ormai si chiamava il treno notturno Losanna-Trieste nel quale si diceva lui avesse una cuccetta riservata a vita): ogni equazione aveva un suo spazio predefinito nelle tre lavagne e ci restava perfettamente leggibile fintanto che poteva ancora essere utile. Era tutto talmente chiaro da farti credere che si trattasse di un corso, e quindi di un esame, "facile". Tutt'altro: passai quattro lunghi mesi a prepararmi esclusivamente per quell'esame e credo sia il solo di tutto il corso di laurea di cui mi ricordo ancora quasi tutto.

moments de pure extase. Je me souviens de chaque rencontre exclusive que j'ai eue avec lui et je crois que je n'ai jamais autant appris en si peu de temps.

Le fait est qu'avec cette conception élastique du temps, son agenda était toujours surchargé. Ainsi, comme légitime défense, parfois il disparaissait, faisant croire à Trieste qu'il était à Lausanne et vice-versa. Inutile de chercher une réponse en vérifiant la présence de sa voiture dans le parking, car il en avait deux identiques (des Alfa Romeo 155 V6 rouge bordeaux, démonstration de son très bon goût jusque dans les aspects pratiques de la vie de tous les jours) garées l'une au Centre internationale de physique théorique (ICTP) de Trieste et l'autre à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL).

Il avait la capacité de « voir » la physique des atomes, des molécules et des solides comme un musicien à l'oreille absolue entend les sons, mais en plusieurs dimensions. Au fil des années, il m'a appris à utiliser l'ordinateur comme un appareil expérimental, avec l'avantage de pouvoir y réaliser des expériences, impossibles dans la réalité, mais qui permettaient d'isoler les phénomènes physiques intéressants afin de les comprendre dans leur essence.

La première confirmation qu'il n'était pas une personne ordinaire s'est produite au tout premier contact lors de son cours de *Struttura della Materia* à l'Université de Trieste. Il entrait dans la salle de classe chaque fois de la même manière, en marchant lentement et en l'inondant d'un agréable parfum d'après-rasage. Arrivé à son bureau, il posait sa montre à gousset avec sa longue chaîne en argent, ouvrait le couvercle et commençait par un chef-d'œuvre d'exposé qui aurait pris des mois de préparation à n'importe qui (sauf que lui venait probablement de descendre du « train de Baldereschi », le train de nuit Lausanne-Trieste dans lequel on disait qu'il avait une couchette réservée à vie) : chaque équation avait son propre espace prédéfini sur les trois tableaux noirs et y restait parfaitement lisible aussi longtemps qu'elle était encore utile. Tout était si clair que l'on pouvait croire qu'il s'agissait d'un cours et donc d'un examen « facile ». Loin de là : j'ai passé quatre longs mois à me préparer

Per convincerlo a farmi da relatore per la tesi di laurea, gli dissi che me la cavavo con la programmazione e lui mi chiese in quante "schede (perforate)" consistesse il mio programma più lungo. Per fortuna giudicò sufficiente il numero che, preso un poco alla sprovvista, sparai più o meno a caso.

exclusivement à cet examen et je pense que c'est le seul de toute ma formation universitaire dont je me souviens encore presque complètement.

Pour le convaincre d'être mon directeur de thèse, je lui ai dit que je me débrouillais bien en programmation. Alors il me demanda de combien de cartes perforées se composait le programme le plus long que j'avais écrit. Heureusement, il jugea suffisant le nombre avec lequel, un peu décontenancé, je répondis plus ou moins au hasard !

## Le facteur humain avant tout

Masha Vladimirova

Ma première rencontre avec le Professeur Baldereschi a eu lieu en 1999. Pour revivre et partager le souvenir de cette rencontre, je m'imagine en 1999, une jeune femme de 26 ans. Je viens de soutenir ma thèse. Son sujet porte sur les états électroniques et photoniques dans des structures semi-conductrices périodiques. J'ai un fils de quatre ans et, pour rendre les choses encore plus compliquées, je viens de me séparer de son père, un scientifique déjà reconnu qui a encadré pratiquement tout mon travail de thèse. Je viens de démarrer un contrat temporaire en France à Clermont-Ferrand, où j'essaie de changer de thématique : je travaille sur la modélisation de la croissance cristalline par la méthode de Monte Carlo cinétique. Je cherche un postdoctorat pour continuer à faire mon métier de physicienne. Ma situation est fort compliquée. Qui aurait cru en moi ? Qui m'aurait donné la chance de rebondir, de changer de thématique de recherche, de commencer une nouvelle vie et de faire mes preuves ?

Le Professeur Baldereschi avait un grand cœur. Vincenzo Savona, qui était postdoctorant à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) à cette

époque, le savait. Il me propose alors de me présenter au Professeur Baldereschi à l'occasion de son pot de départ de l'EPFL. Je viens avec mon CV, soigneusement préparé pour cette occasion. Les présentations se passent à merveille, j'explique mes sujets de recherche, les excitons dans des microcavités et les instabilités de croissances cristallines, tout en italien, j'ai l'impression que le courant passe bien. En même temps, je suis très impressionnée de discuter avec le professeur dont je n'ai lu que les articles jusque-là.

Du premier coup d'œil sur mon CV, le Professeur Baldereschi remarque une faute d'orthographe – je rougis comme une tomate. Pendant les deux ans de notre collaboration à l'Institut romand de recherche en physique des matériaux (IRRMA), je ne vais jamais pouvoir m'habituer à son œil d'aigle, à cette capacité de voir très vite les faiblesses de la rédaction ou du raisonnement. À chaque nouvel article que nous préparions ensemble, il m'a étonné par la pertinence de ses remarques.

Afin de se convaincre de l'adéquation de ma candidature au poste de postdoctorante, et de ma



capacità a lavorare su un soggetto ben diverso da quello che ho potuto esplorare in precedenza, non c'era niente di meglio che la metodologia mediterranea: «*alla moda mediterranea*», come diceva. Si agiva di individuare nella lista dei co-autori delle mie pubblicazioni alcune persone che conoscevo e consideravo affidabili, poi di passarci un colpo di filo. E per il resto, si vedeva. Ciò che mi ha tanto sorpreso e ispirato per il resto della mia vita, è questa capacità di decidere sulla base di alcuni scambi che abbiamo avuto, e l'opinione dei colleghi con i quali ho sviluppato attività molto diverse da quelle che desideravo sviluppare

all'IRRM, in particolare la modellizzazione dell'assorbimento e dell'autoassemblaggio delle molecole sulle superfici dei metalli nobili.

La metodologia mediterranea del Professore Baldereschi si applicava in situazioni multiple e varie. Privilegiare la relazione umana, lo scambio diretto. Ciò non vuol dire ignorare le usanze, le regole e le formalità, ma piuttosto mettere l'umano al centro del progetto globale e sviluppare tutto il resto di conseguenza. Mi ha lasciato con questa metodologia un'eredità preziosa.

## Quel mezzo esame che mi valse la carriera Ce demi-examen qui m'a valu ma carrière

---

Massimiliano Stengel

---

La prima volta che ho incontrato Alfonso fu nel 1998 al Dipartimento di Fisica dell'Università di Trieste, dove frequentavo il quarto e ultimo anno del corso di laurea. Capilai nel suo corso, Teoria Quantistica della Materia, un po' per caso. Da pisciello ambizioso e mal informato qual ero, vivevo nella convinzione che la disciplina più nobile e meritevole fosse lo studio delle particelle elementari. La fisica dei solidi, essendo situata su un gradino più alto nella catena alimentare dei fenomeni (con quelli di carattere più fondamentale alla base), la vedevo come una soluzione di ripiego per studenti meno bravi. Però avevo sentito parlare molto bene di Alfonso, dunque misi un semestre del suo corso nel piano di studi, più per curiosità che per altro. E questa leggerezza, ancora non lo sapevo, avrebbe poi determinato la mia traiettoria professionale nei decenni a venire.

Il carisma e le capacità didattiche di Alfonso mi colpirono subito. Ricordo la prima lezione, sugli atomi

La prima volta che ho incontrato Alfonso, c'era nel 1998, al Dipartimento di fisica dell'Università di Trieste, dove stavo seguendo la quarta e ultima anno del mio corso. Sono caduto sul suo corso, Teoria quantistica della materia, un po' per caso. Da giovane ambizioso e mal informato che ero, credevo che la disciplina più nobile e più degna fosse lo studio delle particelle elementari. La fisica dei solidi si trovava a un livello superiore nella catena alimentare dei fenomeni (quelli di natura più fondamentale si trovavano in basso), io la consideravo come una soluzione di riserva per gli studenti meno dotati. Ma avevo sentito di cose buone su Alfonso, quindi ho messo un semestre del suo corso nel programma, più per curiosità che per altro. E questa leggerezza, che non sapevo ancora, avrebbe poi determinato la mia traiettoria professionale nei decenni a venire.

Il carisma e le competenze pedagogiche di Alfonso mi colpirono immediatamente. Io

idrogenoidi, dove ci raccontò perché i metalli alcalini hanno un potenziale di ionizzazione più basso via via che si scende nella serie. La spiegazione, di una semplicità disarmante e offerta in uno stile che “uno non può non capire neanche a volerlo”, fu un vero capolavoro. A dire il vero, mi lasciò un po' frastornato. Una parte di me si rifiutava di credere che, a un quarto anno di fisica, uno potesse digerire una lezione al volo. Le mie solide basi di pregiudizi associavano la fisica teorica “vera” con la matematica accanita, fatta di formule chilometriche e simboli astrusi: quasi una religione, a cui uno non poteva aspirare ad accedere se non dopo una vita di rassegnata disciplina ed esercizi spirituali. Al di là dei contenuti, quella lezione fu una splendida dimostrazione di chiarezza e lucidità intellettuale, due caratteristiche che sono sempre state il marchio di fabbrica di Alfonso, e il cui valore ho imparato ad apprezzare sempre di più andando avanti negli anni.

Non posso raccontare dei miei primi contatti con Alfonso senza fare il nome di Alessandro De Vita, che giocò un ruolo cruciale in quella fase delicata della mia carriera. Lo conobbi per caso, grazie al mio gruppo di amici storici che all'epoca studiavano al Dipartimento di Ingegneria dei Materiali: Sandro vi era entrato da poco come ricercatore di ruolo. Mi bastò chiacchierare con lui una mezz'oretta scarsa per capire che il mio futuro non apparteneva alla gravità quantistica; poco dopo avevamo già escogitato un piano d'azione. Avrei cominciato a lavorare con Sandro su una tesi di laurea *ab initio*, con l'idea di coinvolgere Alfonso *in itinere* come relatore ufficiale (Sandro, non essendo docente del mio dipartimento non poteva firmarla). L'occasione designata era proprio il mezzo esame con Alfonso, che ancora mi mancava: ovviamente mi presentai preparatissimo, e l'operazione andò in porto. Fu così che mi ritrovai, da un giorno all'altro, ad avere non uno ma addirittura due scienziati di altissimo livello a guidare i miei primi passi incerti nel mondo della ricerca. Però non era solo la loro bravura o profilo accademico a darmi la sensazione, quella sì forte e immediata, di “essere capitato nel posto giusto”. Era soprattutto la loro personalità, il loro stile e dimensione umana che rendevano la teoria della struttura elettronica un cammino degno di essere percorso.

me souviens du premier cours, sur les atomes hydrogénéoïdes, où il nous a expliqué pourquoi les métaux alcalins ont un potentiel d'ionisation plus faible au fur et à mesure que l'on descend dans la série. L'explication, d'une simplicité désarmante et présentée dans un style tel qu'« on ne peut pas ne pas comprendre même si on le veut », était un véritable chef-d'œuvre. À vrai dire, elle m'a laissé un peu abasourdi. Une partie de moi refusait de croire qu'un étudiant en quatrième année de physique puisse assimiler un cours à la volée. Mon solide socle de préjugés associait la « vraie » physique théorique à des mathématiques acharnées, faites de formules kilométriques et de symboles abstrus : presque une religion, à laquelle on ne pouvait aspirer à accéder qu'après une vie de discipline résignée et d'exercices spirituels. Au-delà du contenu, ce cours a été une magnifique démonstration de clarté et de lucidité intellectuelle, deux caractéristiques qui ont toujours été la marque de fabrique d'Alfonso et dont j'ai pu apprécier la valeur de plus en plus au fil des années.

Je ne peux pas raconter mes premiers contacts avec Alfonso sans mentionner le nom d'Alessandro De Vita, qui a joué un rôle crucial dans cette phase délicate de ma carrière. Je l'ai connu par hasard, grâce à mon groupe d'amis de longue date qui étudiaient à l'époque au Département de génie des matériaux : Sandro venait de le rejoindre en tant que chercheur. Il m'a suffi de discuter avec lui pendant environ une demi-heure pour comprendre que mon avenir n'était pas dans la gravité quantique ; peu après, nous avons déjà élaboré un plan d'action. J'allais commencer à travailler avec Sandro sur une thèse *ab initio*, avec l'idée d'impliquer Alfonso en cours de route comme superviseur officiel (Sandro, n'étant pas enseignant de mon Département, ne pouvait pas la signer). L'occasion désignée était précisément le demi-examen avec Alfonso, qui me manquait encore : bien sûr, je me suis présenté parfaitement préparé, et l'opération a réussi. C'est ainsi que je me suis retrouvé, du jour au lendemain, avec non pas un mais deux scientifiques de haut niveau qui guidaient mes premiers pas incertains dans le monde de la recherche. Cependant, ce n'est pas seulement leur compétence ou leur profil académique qui m'a donné le sentiment, fort et immédiat, d'avoir « atterri au bon

Quando si presentò l'opportunità, non ebbi alcun dubbio nel decidere di proseguire i miei studi con Alfonso, che diventò il mio direttore di tesi di dottorato all'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). In una prima fase continuai a lavorare con Sandro (all'epoca anche lui delocalizzato tra Losanna e Trieste), mentre Alfonso gestiva l'operazione da dietro le quinte. Le cose però cambiarono nel 2002, quando Sandro si trasferì a Londra. A quel punto, Alfonso diventò il mio supervisore diretto, e iniziò una fase in cui le nostre interazioni diventarono più frequenti e sostanziali. Certo, le occasioni per vedersi bisognava costruirle. La persona chiave in questo senso era Madame Claudet, che era l'unica ad avere accesso alla sua agenda. L'ora tipica dell'appuntamento era alle 5 del pomeriggio, che diventavano facilmente le 6: all'ingresso del Dipartimento di Fisica c'era una bacheca con un sacco di annunci interessanti, che dopo un paio di visite avevo già imparato a memoria. Nel momento in cui mettevo piede nel suo ufficio, però, le difficoltà logistiche erano rapidamente dimenticate, ed era come entrare in una realtà parallela dove lo scorrere del tempo diventava irrilevante.

La dinamica della conversazione era quasi sempre la stessa. Io racconto la mia storia, mentre Alfonso mi guarda attento, annuendo a tratti. Continuo a raccontare la mia storia, con la voce che piano piano va perdendo sicurezza. Alfonso non smette di guardarmi con quell'intensità tutta sua, fatta di occhi penetranti e una punta malcelata di arguzia. Dopo una decina di minuti ho ormai perso il filo e smetto di parlare, con la certezza di averlo definitivamente annoiato. Segue un silenzio eterno, in cui mi preparo al peggio. A quel punto, Alfonso mi fa una domanda sulla primissima frase del mio lungo e sgangherato monologo, come se non avesse neppure sentito il resto. Sorpreso e un po' spiazzato, ricomincio dall'inizio. Mi soffermo sull'introduzione per rispondere alla sua domanda, e poi sfocio nella stessa litania di prima. Vado un po' più rapido stavolta, perché abbiamo già perso tempo prezioso, e ho paura di essere messo alla porta ancora prima di arrivare al dunque. Lui ascolta impassibile, senza il minimo accenno a spazientirsi, senza che il suo sguardo tradisca l'ombra di un pensiero estraneo al contesto. Di nuovo silenzio. Arriva la seconda domanda sulla prima frase, e si riprende

endroit ». C'est avant tout leur personnalité, leur style et leur dimension humaine qui ont fait de la théorie de la structure électronique une voie digne d'être suivie.

Lorsque l'occasion s'est présentée, j'ai décidé sans aucune hésitation de poursuivre mes études avec Alfonso, qui est devenu mon directeur de thèse à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). Au début, j'ai continué à travailler avec Sandro (qui se déplaçait également entre Lausanne et Trieste à l'époque), tandis qu'Alfonso gérait les opérations en coulisses. Les choses ont changé en 2002, lorsque Sandro a déménagé à Londres. À ce moment-là, Alfonso est devenu mon superviseur direct, et une nouvelle phase s'est ouverte, au cours de laquelle nos interactions sont devenues plus fréquentes et plus substantielles. Bien sûr, il fallait créer des occasions de se voir. La personne clé à cet égard était Madame Claudet, qui était la seule à avoir accès à son agenda. L'heure de rendez-vous habituelle était cinq heures de l'après-midi, qui devenait facilement six heures : à l'entrée du Département de physique, il y avait un tableau d'affichage avec de nombreuses annonces intéressantes, que j'avais déjà appris par cœur après quelques visites. Cependant, dès que j'entrais dans son bureau, les difficultés logistiques étaient rapidement oubliées et j'avais l'impression d'entrer dans une réalité parallèle où le passage du temps n'avait plus d'importance.

La dynamique de la conversation était presque toujours la même. Je raconte mon histoire, pendant qu'Alfonso me regarde attentivement, hochant la tête par moments. Je continue à raconter mon histoire, ma voix perdant peu à peu de son assurance. Alfonso ne cesse de me regarder avec cette intensité qui lui est propre, faite d'un regard perçant et d'une pointe de malice mal dissimulée. Au bout d'une dizaine de minutes, j'ai désormais perdu le fil et j'arrête de parler, avec la certitude que je l'ai définitivement ennuyé. S'ensuit un silence éternel, dans lequel je me prépare au pire. C'est alors qu'Alfonso me pose une question sur la toute première phrase de mon long monologue décousu, comme s'il n'avait pas entendu le reste. Surpris et un peu déstabilisé, je recommence depuis le début. Je m'attarde sur l'introduction pour répondre à sa question, puis j'entame la même litanie que précédemment. Je vais un peu plus vite cette

da capo. Dopo un'oretta in cui, per iterazioni successive, arriviamo a chiarire alcune inconsistenze gravi nelle mie premesse, iniziamo a discutere sulla seconda frase.

Alfonso era così: incuteva rispetto perché dava rispetto. Ascoltava sempre quello che avevo da dire con attenzione sovrumana e senza mai interrompere. Pensava veloce e procedeva lento ma inesorabile, passetto a passetto, per essere sicuro di aver capito fino in fondo. Mai saltava a conclusioni affrettate o estrapolava concetti interi da frasi lasciate a metà. Il tempo veramente si fermava in sua presenza, e quasi senza accorgersene si finiva a discutere per ore e ore di fila. Una volta uscimmo dal suo ufficio a mezzanotte, appena in tempo per pigliare l'ultimo metrò verso il centro. E anche in quell'occasione, dopo tutta la sera passata a parlare di fisica senza mangiare né bere né riposare, mi dispiacque tornare a casa. Non so come facesse a mettere a proprio agio le persone a tal punto, a creare quell'atmosfera miracolosa. E quando, anni dopo, arrivò il mio turno di fare il direttore di tesi e lo scienziato, mi resi conto ancor più pienamente del valore di quei momenti irripetibili.

Alfonso con me era di temperamento riservato e poco incline a parlare di sé. Non ho mai saputo nulla della sua storia personale o della sua famiglia. A distanza di anni dalla tesi, facevo ancora fatica a dargli del tu. Neanche dei suoi successi professionali parlava molto volentieri, a parte in alcune rare occasioni in cui gli servivano come esempio per chiarire un punto importante. Ricordo una volta in cui si iniziò per caso a parlare di risorse computazionali e di quanto fossero essenziali per il nostro lavoro di ricerca. Mi raccontò degli anni ruggenti delle schede perforate, in cui andava di notte al laboratorio trasportando il codice in delle casse di legno. E, a proposito del suo Baldereschi point osservò come l'idea buona arrivasse proprio quando le risorse erano scarse, e uno doveva ingegnarsi a usare al meglio il poco che aveva. Una considerazione che fa riflettere, specialmente nei tempi odierni dell'intelligenza artificiale, con risorse infinite e il computer che fa tutto da solo.

Quelli del mio dottorato erano anni di transizione: gli eccessi della tecnologia attuale erano ancora lontani, ma si percepivano già i primi segni di un

fois-ci, car nous avons déjà perdu un temps précieux, et je crains d'être éjectée avant même d'en arriver au but. Il écoute impassiblement, sans le moindre signe d'impatience, sans que son regard ne trahisse l'ombre d'une pensée hors contexte. Silence encore. La deuxième question sur la première phrase arrive, et on recommence du début. Après une heure environ au cours de laquelle, par itérations successives, nous sommes parvenus à clarifier de graves incohérences dans mes prémisses, nous commençons à discuter de la deuxième phrase.

Alfonso était ainsi : il inspirait le respect parce qu'il donnait du respect. Il écoutait toujours ce que j'avais à dire avec une attention surhumaine et sans jamais m'interrompre. Il pensait vite et procédait lentement mais inexorablement, étape par étape, pour s'assurer qu'il avait compris jusqu'au bout. Il ne tirait jamais de conclusions hâtives ni n'extrapolait des concepts entiers à partir de phrases laissées en suspens. En sa présence, le temps s'arrêtait vraiment et, presque sans s'en rendre compte, nous discussions pendant des heures. Une fois, nous avons quitté son bureau à minuit, juste à temps pour prendre le dernier métro vers le centre. Et même là, après avoir passé toute la soirée à parler de physique sans manger, ni boire, ni me reposer, j'ai regretté de rentrer chez moi. Je ne sais pas comment il parvenait à mettre les gens à l'aise, à créer cette atmosphère miraculeuse. Et lorsque, des années plus tard, mon tour est venu d'être un directeur de thèse et un scientifique, j'ai réalisé encore plus pleinement la valeur de ces moments uniques.

Alfonso était d'un tempérament réservé avec moi et peu enclin à parler de lui. Je n'ai jamais rien su de son histoire personnelle ni de sa famille. Des années après ma thèse, j'avais encore du mal à le tutoyer. Il ne parlait pas non plus beaucoup de ses succès professionnels, sauf en quelques rares occasions où il avait besoin de clarifier un point important. Je me souviens d'une fois où nous avons accidentellement commencé à parler des ressources computationnelles et de leur importance pour nos travaux de recherche. Il m'a parlé des années glorieuses des cartes perforées, lorsqu'il se rendait au laboratoire la nuit en transportant le code dans des caisses en bois. Et, parlant de son point de Baldereschi, il a remarqué que la bonne idée venait juste au moment où les ressources étaient rares, et

cambiamento radicale nei contenuti e nelle modalità. Sebbene iniziasse timidamente a farsi strada il software distribuito gratis alla comunità (ABINIT uscì a fine 2000, Quantum Espresso nel 2001), molti gruppi di ricerca gestivano ancora gelosamente il loro codice di simulazione privato, investendo risorse considerevoli per svilupparlo e mantenerlo. Io dai tempi della laurea avevo sempre smanettato con LAUTREC, il codice di Sandro, a cui avevo via via aggiunto varie cosette fino a farlo diventare un po' mio. L'ultimo anno della tesi avevo passato un mese a riscriverlo quasi da zero, completando l'implementazione del metodo Projector Augmented Wave (PAW) che lo avrebbe reso ancora più preciso ed efficiente: tutto questo di mia iniziativa e all'insaputa di Alfonso. Quando finalmente lo vidi, gli annunciai con giusto orgoglio l'esito del mio lavoro, e gli proposi di farne un *package* pubblico seguendo la moda dell'epoca. La reazione di Alfonso fu una doccia fredda memorabile. In retrospettiva, ne avevo bisogno: non avevo ancora imparato che i codici e i computer sono – se uno non ne può proprio fare a meno – i mezzi, ma mai lo scopo. E la differenza è abissale.

Questi e altri episodi in cui ho avuto la fortuna di percepire, magari per un attimo fugace, come Alfonso ragionava, come viveva la Fisica, e come la comunicava ai suoi studenti e collaboratori più stretti, mi hanno segnato profondamente come essere umano e come ricercatore. Il suo stile e la sua personalità hanno continuato a guidarmi da lontano anche quando, difesa la tesi, le nostre strade si sono separate. In tutti questi anni, ogni volta che ottenevo un risultato di rilievo – o meglio, un risultato che mi piacesse abbastanza da sentirmene minimamente fiero – non potevo fare a meno di pensare che forse anche ad Alfonso sarebbe piaciuto. E di provare una punta di malinconia alla consapevolezza che probabilmente non ci sarebbe mai stata l'occasione buona per raccontarglielo. Malinconia solo alleviata dall'illusione che, da qualche parte, seguisse in silenzio quello che stavo facendo e lo apprezzasse a modo suo.

Quando seppi della sua scomparsa fu uno shock. Mi resi conto che con lui se n'era andato uno dei motivi principali per cui avevo intrapreso questa strada e poi continuato a percorrerla. Quella fu la sua ultima lezione, forse la più importante: che alla fine quello

qu'il fallait faire le meilleur usage possible du peu que l'on avait. Une réflexion qui donne à réfléchir, surtout à cette époque d'intelligence artificielle où les ressources sont infinies et où l'ordinateur fait tout.

Les années de mon doctorat étaient des années de transition : les excès de la technologie actuelle étaient encore loin, mais les premiers signes d'un changement radical de contenu et de modalités étaient déjà perceptibles. Si les logiciels distribués gratuitement à la communauté commençaient timidement à faire leur chemin (ABINIT est sorti fin 2000, Quantum Espresso en 2001), de nombreux groupes de recherche gardaient encore jalousement leur code de simulation privé, investissant des ressources considérables pour le développer et le maintenir. Depuis la fin de mes études, j'avais toujours bricolé avec LAUTREC, le code de Sandro, auquel j'avais progressivement ajouté diverses petites choses jusqu'à ce qu'il devienne un peu le mien. En dernière année de thèse, j'avais passé un mois à le réécrire presque à partir de zéro, en terminant l'implémentation de la méthode Projector Augmented Wave (PAW) qui le rendrait encore plus précis et efficace : tout cela de ma propre initiative et à l'insu d'Alfonso. Lorsque je l'ai enfin vu, je lui ai annoncé avec une fierté légitime le résultat de mon travail, et j'ai proposé d'en faire une suite de codes publique selon la mode de l'époque. La réaction d'Alfonso fut une douche froide mémorable. Rétrospectivement, j'en avais besoin : je n'avais pas encore appris que les codes et les ordinateurs sont – même si l'on ne peut vraiment pas s'en passer – les moyens, mais jamais le but. Et la différence est abyssale.

Ces épisodes et d'autres, au cours desquels j'ai eu la chance de percevoir, peut-être pour un instant fugace, comment Alfonso raisonnait, comment il vivait la physique et comment il la communiquait à ses étudiants et à ses plus proches collaborateurs, m'ont profondément marqué en tant qu'être humain et en tant que chercheur. Son style et sa personnalité ont continué à me guider de loin, même lorsque nos chemins se sont séparés après ma soutenance de thèse. Pendant toutes ces années, chaque fois que j'ai obtenu un résultat significatif – ou plutôt un résultat qui me plaisait suffisamment pour en ressentir une fierté minime – je n'ai pas pu m'empêcher de



che conta non sono i numeri o il prestigio, ma le persone. E di persone come Alfonso, che amava la fisica nella sua espressione più pura, ma soprattutto sapeva pensare e sapeva ascoltare, oggi più che mai ne abbiamo disperatamente bisogno.

penser qu'Alfonso l'aurait peut-être aimé aussi. Et de ressentir une pointe de mélancolie à l'idée qu'il n'y aurait probablement jamais eu une bonne occasion de lui en parler. Mélancolie seulement atténuée par l'illusion que, quelque part, il suivait silencieusement ce que je faisais et l'appréciait à sa manière.

Lorsque j'ai appris son décès, ce fut un choc. J'ai réalisé qu'avec lui disparaissait l'une des principales raisons pour lesquelles je m'étais engagée dans cette voie et l'avais poursuivie. C'était sa dernière leçon, peut-être la plus importante : finalement, ce qui compte, ce ne sont pas les chiffres ou le prestige, mais les personnes. Et des personnes comme Alfonso, qui aimait la physique dans son expression la plus pure, mais qui savait surtout penser et écouter, sont désespérément nécessaires aujourd'hui plus que jamais.

## Souvenirs décousus de mes années auprès du Professeur Baldereschi

Noemi Porta

En juin 2004, j'ai eu la chance d'être engagée en tant que secrétaire auprès du Professeur Baldereschi. À notre première rencontre, vu que je ne connaissais pas du tout le monde académique, je dois avouer que j'étais un peu intimidée par ce titre de Professeur, mais rapidement ce sentiment a disparu tant il a su me mettre à l'aise. J'ai tout de suite aimé sa personnalité, son regard parfois un peu malicieux. Ce regard tellement franc et direct que travailler pour lui a toujours été un réel plaisir ; il a eu beaucoup de patience avec mon apprentissage du monde académique et toutes ses directives !

Dans toutes les circonstances, il a toujours gardé un grand sens d'humour, une gentillesse, une bienveillance envers ses collaborateurs, ses étudiants et tous ceux autour de lui, prenant inmanquablement

le temps pour chacun. Doté d'une réelle humanité et d'une grande capacité d'écoute.

Je me souviens combien il appréciait commander du vin Humagne lors de nos collations, ce qui m'a toujours fait sourire sachant que le Professeur était italien ! Lors de ses derniers passages dans nos locaux, il fallait avoir parfois beaucoup de patience, car même si son arrivée était annoncée, il avait parfois un peu de retard ! Mais dès que j'entendais ses pas dans nos couloirs, je savais que j'allais pouvoir terminer le travail demandé. Et on ne va pas me contredire, certains faisaient quelques allers-retours dans mon bureau à sa recherche !

C'est un grand merci que je lui adresse pour m'avoir donné le bonheur d'entrer dans ce monde un peu particulier des professeurs !

# Una storia di dedizione e amicizia: ricordando Alfonso

## Une histoire de dévouement et d'amitié: un souvenir d'Alfonso

---

Vincenzo Savona

---

È difficile esprimere l'immensa influenza che Alfonso ha avuto sulla mia vita, sia come collega che come mentore. Ho avuto la fortuna di averlo come mentore ufficiale durante i miei primi anni da professore assistente, e negli oltre vent'anni che abbiamo condiviso, è diventato non solo una guida, ma un vero amico. L'immensa umanità di Alfonso, la sua integrità, lealtà e il suo coraggio lo definivano, e oggi porto queste qualità nel mio cuore.

Ripensando al mio tempo trascorso con Alfonso, realizzo quanto profondamente abbia plasmato il mio percorso nel mondo accademico. Da giovane professore, non era raro che restassi in ufficio fino a tardi, ma Alfonso era l'unico altro docente che vedevo lavorare ancora, a volte anche dopo mezzanotte. Passavo spesso davanti al suo ufficio e aveva sempre una ragione per essere lì, sempre dedicato al suo lavoro. Eppure, non importava quanto fosse tardi, trovavo sempre il tempo per fare due chiacchiere, per condividere una storia o una risata, rendendo quei momenti notturni e silenziosi indimenticabili.

Uno dei momenti più importanti della mia carriera è stato preparare il mio dossier per la *tenure*, un passo cruciale in ogni carriera accademica. Alfonso non solo si è offerto di aiutarmi, ma vi si è dedicato completamente. Ricordo che abbiamo iniziato a discutere del dossier nel mio ufficio alle 14 e ne siamo usciti solo alle 21. Per sette ore ha esaminato ogni dettaglio, ponendo domande, suggerendo modifiche e incoraggiandomi. Quel giorno mi ha mostrato cosa

Il est difficile de décrire l'ampleur de l'influence qu'Alfonso a eue sur ma vie, à la fois comme collègue et comme mentor. J'ai eu la chance de l'avoir comme mentor officiel durant mes premières années de professeur assistant, et au fil des plus de vingt années que nous avons passées ensemble, il est devenu non seulement un guide, mais un véritable ami. L'immense humanité d'Alfonso, son intégrité, sa loyauté et son courage le définissaient, et je porte aujourd'hui en moi ces qualités.

En repensant à mon parcours aux côtés d'Alfonso, je réalise à quel point il a façonné mon chemin dans le monde académique. Lorsque j'étais jeune professeur, il n'était pas rare que je reste tard au bureau, mais Alfonso était le seul autre professeur que je voyais encore travailler, parfois même bien après minuit. Je passais souvent devant son bureau, et il avait toujours une raison d'être là, toujours aussi dévoué à son travail. Pourtant, peu importe l'heure, il prenait toujours le temps de discuter, de partager une histoire ou un éclat de rire, rendant ces moments tardifs et silencieux inoubliables.

L'un des moments les plus marquants de ma carrière a été la préparation de mon dossier de titularisation, une étape cruciale dans toute carrière académique. Alfonso ne s'est pas contenté de m'apporter ses conseils, il s'y est entièrement consacré. Je me souviens que nous avons commencé à discuter du dossier dans mon bureau à 14 heures, et nous n'en sommes sortis qu'à 21 heures. Pendant sept heures,

significano davvero la dedizione e la passione; qualità rare che Alfonso incarnava pienamente.

Grazie ad Alfonso, ho imparato a navigare la complessa natura umana del mondo accademico, un dono che ha reso il mio percorso in questo mondo migliore. Gli devo molto – la mia comprensione di questa professione, la mia carriera e, forse più di tutto, un senso di scopo e integrità. Alfonso è stato, in molti modi, come un padre per me nella mia vita professionale, una presenza stabile e di sostegno la cui saggezza e gentilezza mi accompagneranno sempre.

il a examiné chaque détail, posant des questions, prodiguant des conseils et m'encourageant. Ce jour-là, il m'a montré ce que signifient véritablement la dévotion et la passion ; des qualités rares qu'Alfonso incarnait pleinement.

Grâce à Alfonso, j'ai appris à naviguer dans la complexité humaine de l'univers académique, un cadeau qui a rendu mon propre parcours dans ce monde plus serein. Je lui dois tant – ma compréhension de ce métier, ma carrière et, peut-être plus important encore, un sens profond de l'intégrité et du devoir. Alfonso était, en bien des aspects, comme un père pour moi dans ma vie professionnelle, une présence stable et bienveillante dont la sagesse et la gentillesse m'accompagneront toujours.

## Recollections of two “ $\hbar=0$ ” scientists of a man who believed in *grandi progetti* Souvenirs de deux scientifiques « $\hbar=0$ » d'un homme qui croyait aux «*grandi progetti*»

---

Paolo De Los Rios & Giuseppe Foffi

---

Alfonso Baldereschi is well known for his fundamental contributions to computational approaches in solid-state physics and we are confident that, in this book, these will be celebrated by his friends, colleagues, and students. However, here, we would like to remember Alfonso for his broad vision of physics, and for playing a pivotal role in the establishment of robust research initiatives in fields of physics that may seem far removed from his own: modern statistical, biological and soft matter physics. In fact, both of our academic careers have been deeply influenced by our interaction with

Alfonso Baldereschi est bien connu pour ses contributions fondamentales aux approches computationnelles en physique de l'état solide, et nous sommes convaincus que, dans ce livre, celles-ci seront célébrées par ses amis, collègues et étudiants. Cependant, ici, nous souhaitons nous souvenir d'Alfonso pour sa vision large de la physique et pour avoir joué un rôle clé dans l'établissement d'initiatives de recherche robustes dans des domaines de la physique qui peuvent sembler éloignés des siens : la physique statistique, la biophysique et la physique de

Alfonso, who supported our scientific ideas and gave us the opportunity to pursue our research at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). Our aim here is not to focus strictly on our research, but rather to reflect on our personal interactions with him.

We both fondly remember him encouraging us to aim for *grandi progetti* [1] and reminding us that good science always prevails. However, this attitude should not be mistaken for someone with merely a strong sense of management in science. Alfonso was often eager to understand the details of our work and frequently impressed us with the depth of his insight. In his scientific career, Alfonso made significant contributions to solid-state physics, but his knowledge reached well beyond his immediate research area. From these interactions, we coined an expression that became a friendly recurring joke when talking about him: “*Alfonso la Fisica la sa!*” [2].

In the early 2000s, a generational change took place at the Theoretical Physics Departments of EPFL and its sister institution, the University of Lausanne (UNIL), with several retirements taking place in the short span of about five years. In this context, Paolo was recruited as an Assistant Professor at UNIL in 2000 to start a research activity in complex and biological systems.

Surely, most newly appointed group leaders, just out of their postdoc years, can relate to the mix of fear

la matière molle modernes. En effet, nos deux carrières académiques ont été profondément influencées par notre interaction avec Alfonso, qui a soutenu nos idées scientifiques et nous a donné l’opportunité de poursuivre nos recherches à l’École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). Notre objectif ici n’est pas de nous concentrer strictement sur nos recherches, mais plutôt de réfléchir à nos interactions personnelles avec lui.

Nous nous souvenons tous les deux avec affection de lui nous encourageant à viser des *grandi progetti* [1]

et nous rappelant que la bonne science l’emporte toujours. Cependant, cette attitude ne doit pas être confondue avec celle de quelqu’un ayant simplement un sens aigu de la gestion scientifique. Alfonso était souvent désireux de comprendre les détails de notre travail et nous impressionnait fréquemment par la profondeur de son intuition. Au cours de sa carrière scientifique, Alfonso a apporté des contributions significatives à la physique de l’état solide, mais ses connaissances allaient bien au-delà de son domaine de recherche immédiat. De ces interactions, nous avons forgé une expression qui est devenue une plaisanterie amicale récurrente lorsque nous parlons de lui : « *Alfonso la Fisica la sa !* » [2].



“In Alfonso we trust,” from the presentation that Giuseppe Foffi gave at the symposium held on the occasion of Alfonso’s retirement | «*In Alfonso we trust*», extrait de la présentation donnée par Giuseppe Foffi lors du symposium organisé à l’occasion du départ à la retraite d’Alfonso.

Au début des années 2000, un changement générationnel a eu lieu au sein des Départements de physique théorique de l’EPFL et de son institution sœur, l’Université de Lausanne (UNIL), avec plusieurs





Nicolas Dorsaz defended his thesis in 2009 and was a finalist of the 2010 EPFL Doctorate Award. To the best knowledge of the authors, this was the first and only thesis in soft matter supervised by Alfonso, who was overseeing the whole operation [3]. Image by Mirko Brunder | Nicolas Dorsaz a soutenu sa thèse en 2009 et a été finaliste du Prix de doctorat de l'EPFL en 2010. À la meilleure connaissance des auteurs, il s'agissait de la première et unique thèse en matière molle supervisée par Alfonso, qui encadrait l'ensemble de l'opération [3]. Image de Mirko Brunder.

and enthusiasm (but mostly fear!) experienced by a new group leader who feels overwhelmed by the different tasks they must face, many of which they have no training for whatsoever. Paolo was exactly in this state of semi-paralysis when Alfonso contacted him for a meeting. By reaching out, Alfonso had two agendas. First and foremost, he helped him learn the ropes of his new job, from grant writing to balancing teaching and research, and how to deal with new recruits. He rapidly became a precious mentor

départs à la retraite survenant en l'espace de cinq ans. Dans ce contexte, Paolo a été recruté comme professeur assistant à l'UNIL en 2000 pour démarrer une activité de recherche sur les systèmes complexes et biologiques.

Il est certain que la plupart des chefs de groupe nouvellement nommés, à peine sortis de leurs années de postdoctorat, peuvent s'identifier à ce mélange de peur et d'enthousiasme (mais surtout de peur !) qu'éprouve une nouvelle personne responsable de groupe qui se sent dépassée par les différentes tâches auxquelles elle doit faire face, pour la plupart desquelles elle n'a reçu aucune formation. Paolo se trouvait exactement dans cet état de semi-paralysie lorsqu'Alfonso l'a contacté pour une réunion. En lui tendant la main, Alfonso avait deux objectifs. Tout d'abord, et surtout, il l'a aidé à apprendre les ficelles de son nouveau travail, de la rédaction de demandes de subventions à l'équilibre entre l'enseignement et la recherche en passant par la gestion des nouvelles recrues. Il est rapidement devenu un mentor précieux et, au fil du temps, un bon ami à qui demander conseil, et pas seulement à titre professionnel. Cependant, Alfonso voyait déjà plus loin dans l'avenir. En tant que nouveau directeur de l'Institut de théorie des phénomènes physiques (ITP) de l'EPFL, et dans la perspective de la fusion des départements de physique des deux institutions, qui devait avoir lieu en 2003, il voyait le départ à la retraite de l'ancienne génération comme une occasion d'élargir le champ de la recherche théorique à Lausanne. En plus de la physique de la matière condensée, qui était un pilier à l'EPFL, il prévoyait de développer à la fois la physique des particules et la physique statistique et biologique. L'intégration complète de Paolo était l'une des étapes du *grande progetto* d'Alfonso.

C'est à cette époque qu'Alfonso a décidé d'étendre les activités de l'Institut romand de recherche en physique numérique des matériaux (IRRMA) pour y inclure le domaine de la matière molle computationnelle. Alfonso avait fondé l'IRRMA à la fin des années 1980 dans le but de favoriser la collaboration entre les universités francophones dans le domaine



and, over time, a good friend with whom to look not only for professional advice. Yet, Alfonso was already looking further into the future. As new director of the Institute of Theoretical Physics (ITP) at EPFL, and in view of the merger of the Physics Departments of the two institutions, taking place in 2003, he saw the retirement of the old generation as an opportunity to broaden the scope of theoretical research in Lausanne. Alongside condensed matter physics, which was a staple at EPFL, he planned to grow particle physics as well as statistical and biological physics. The full integration of Paolo was one of the steps in Alfonso's *grande progetto*.

Just around that time, Alfonso decided to expand the activities of the Institut romand de recherche en physique numérique des matériaux (IRRMA) to include the domain of computational soft matter. Alfonso had founded IRRMA in the late 1980s with the aim of fostering collaboration among the French-speaking universities in the emerging field of computational solid-state physics. It was with this spirit in mind that, discussing with Peter Schurtenberger at the University of Fribourg, he had the idea to hire a senior postdoc to start a new activity in computational soft matter. Giuseppe was hired for the position and was immediately asked to write a Swiss National Foundation (SNF) proposal to secure additional workforce for the project. The grant was ultimately secured, leading to the first doctoral thesis at IRRMA in a field outside of solid-state physics. In this unique situation, Alfonso was the formal supervisor of the PhD student, while Giuseppe directed the research. Although this arrangement could have presented some challenges, it was managed with great elegance. Despite his remarkable human and scientific stature, Alfonso always offered advice in a non-patronizing way, guiding young collaborators toward personal growth. In fact, throughout this book, you will frequently hear of Alfonso's excellence as a physics teacher and mentor, but his influence extended far beyond the academic sphere. He took Giuseppe, a young postdoc, under his wing, teaching him how to become a group leader, a PhD supervisor, and how to strategically plan the next steps in his career. Ultimately, Alfonso served as a true guide, helping him apply for and secure a SNF professorship, which became the foundation for the next step in his *grande*

émergent de la physique des solides computationnelle. C'est dans cet esprit qu'en discutant avec Peter Schurtenberger à l'Université de Fribourg, il eut l'idée d'engager un postdoctorat senior pour démarrer une nouvelle activité en matière molle computationnelle. Giuseppe a été recruté pour le poste et immédiatement invité à rédiger une proposition pour le Fonds national suisse (FNS) afin d'obtenir des ressources supplémentaires pour le projet. Dans cette situation unique, Alfonso était le superviseur officiel du doctorant, tandis que Giuseppe dirigeait la recherche. Même si cet arrangement aurait pu présenter certains défis, il a été géré avec beaucoup d'élégance. La subvention a finalement été obtenue, ce qui a conduit à la première thèse de doctorat à l'IRRMA dans un domaine en dehors de la physique des solides. Malgré sa stature humaine et scientifique remarquable, Alfonso a toujours offert des conseils de manière non condescendante, guidant les jeunes collaborateurs vers leur développement personnel. En fait, tout au long de ce livre, vous entendrez souvent parler de l'excellence d'Alfonso en tant qu'enseignant et mentor en physique, mais son influence s'étendait bien au-delà de la sphère académique. Il a pris Giuseppe, un jeune postdoctorant, sous son aile, lui apprenant à devenir un chef de groupe, un superviseur de thèse, et à planifier stratégiquement les prochaines étapes de sa carrière. Finalement, Alfonso lui a servi de véritable guide en l'aidant à postuler et à obtenir un poste de professeur du FNS, qui est devenue la base de l'étape suivante de son *grande progetto* : l'établissement d'un groupe indépendant de matière molle computationnelle à l'ITP.

La physique théorique à l'EPFL ne serait pas ce qu'elle est aujourd'hui sans la vision d'Alfonso, son véritable *grande progetto*, avec des activités dynamiques dans les domaines de la matière condensée, l'information quantique, la biophysique, la physique statistique, les systèmes complexes, le *machine learning*, la physique des particules et la cosmologie. Et tandis que Giuseppe a quitté Lausanne, le mentorat d'Alfonso l'a conduit à poursuivre avec succès sa carrière de professeur à Paris. Pour ceux qui peuvent les voir, ses empreintes sont facilement détectables.

Plus important encore pour nous, en tant que scientifiques mais aussi en tant que personnes qui doivent

*progetto*: the establishment of an independent computational soft matter group at ITP.

Theoretical Physics at EPFL would not be what it is today if it were not for the vision of Alfonso, his true *grande progetto*, with vibrant activities in condensed matter, quantum information, biophysics, statistical physics, complex systems, machine learning, particle physics, and cosmology. And while Giuseppe moved on from Lausanne, Alfonso's mentoring led him to successfully continue his career as professor in Paris. For those who can see them, his fingerprints can be easily detected.

More importantly for us, as scientists but also as people who need to balance their professional and personal lives, we have been greatly impacted by Alfonso's advice. His words still help us far more often than we could have expected. He knew Physics. He knew a thing or two about science management. And he certainly knew about humanity. Today, we do our best to keep his legacy alive, passing his teachings to the new generations, who navigate an increasingly challenging research world.

trouver un équilibre entre leur vie professionnelle et leur vie personnelle, les conseils d'Alfonso ont eu un impact considérable sur nous. Ses mots nous aident encore bien plus souvent que nous n'aurions pu l'espérer. Il connaissait la Physique. Il connaissait un ou deux aspects de la gestion scientifique. Et il connaissait certainement l'humanité. Aujourd'hui, nous faisons de notre mieux pour préserver son héritage vivant, en transmettant ses enseignements aux nouvelles générations, qui naviguent dans le monde de plus en plus exigeant de la recherche.

- [1] Ed. note: "Great projects"
- [2] Ed. note: "Alfonso knows Physics!"
- [3] Nicolas Dorsaz, A colloidal approach to eye lens protein mixtures: relevance for cataract formation, EPFL Thesis, No. 4375 (2009).

- [1] N.d.E. « Grands projets »
- [2] N.d.E. « Alfonso, la Physique, il la connaît ! »
- [3] Nicolas Dorsaz, A colloidal approach to eye lens protein mixtures: relevance for cataract formation, EPFL Thesis, No. 4375 (2009).

# Alfonso Baldereschi ou l'art d'arrondir les angles

---

Frédéric Mila

---

J'ai rencontré brièvement Alfonso dans les années 90 à l'occasion d'examens oraux à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) alors que j'étais post-doctorant à Neuchâtel, mais c'est à partir de mon arrivée à Lausanne comme professeur en 2000, d'abord à l'Université de Lausanne, puis à l'EPFL, que j'ai vraiment interagi avec lui. À l'époque, il était directeur de l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), localisé à Lausanne mais géré et co-financé par les Universités de Genève, Fribourg et Neuchâtel.

La thématique sur laquelle je travaille, les systèmes fortement corrélés sur réseau, était alors représentée à l'IRRMA par Xenophon Zotos. Au départ de celui-ci, Alfonso m'a proposé de poursuivre cette thématique, et de gérer le budget associé comme bon je l'entendais. Cette possibilité m'a permis d'atteindre la masse critique pour mon groupe, et de faire venir des collaborateurs de premier plan, notamment Andreas Läuchli, désormais professeur ordinaire à l'EPFL et directeur du groupe de Physique théorique à l'Institut Paul Scherrer à Villigen.

Je n'ai jamais oublié ce geste très généreux, mais au-delà de ce geste, c'est la souplesse avec laquelle Alfonso a géré l'IRRMA qui m'a rendu la vie beaucoup plus facile. C'est bien simple, je ne me souviens pas qu'il ne m'ait jamais dit non lorsque je suis venu le voir pour lui demander un complément de budget, l'augmentation d'un collaborateur ou le financement de calculs numériques. Ce n'est pas qu'il était toujours d'accord avec tout. Je me souviens d'une facture salée reçue pour financer *a posteriori* le serveur de calcul d'un autre institut de l'EPFL. Alfonso a, comme moi, trouvé le processus peu élégant, et s'il n'avait tenu qu'à moi nous aurions refusé de payer, mais

Alfonso n'aimait pas les conflits inutiles. Rétrospectivement, je comprends qu'il avait raison. Démontrer à tout prix qu'on est dans son bon droit n'est pas toujours la meilleure solution.

Lorsqu'en 2003 l'Institut de physique de l'Université de Lausanne a été transféré à l'EPFL, et moi avec, Alfonso est devenu le directeur de ce nouvel institut, qui s'est finalement appelé l'Institut de théorie des phénomènes physiques après une séance de brainstorming mémorable. La situation était complexe, avec des groupes de tailles très différentes. En quelques mois, et tout en douceur, Alfonso a réussi à tout uniformiser, moyennant la création d'un poste joint avec l'Organisation européenne pour la recherche nucléaire (CERN) pour compenser le refus de l'EPFL de stabiliser un collaborateur du corps intermédiaire transféré depuis l'Université de Lausanne. De nouveau, Alfonso a refusé de rentrer en conflit avec l'EPFL, et le résultat net s'est révélé très positif pour tout le monde : le collaborateur qui n'a pas été stabilisé a eu dans la foulée un poste de professeur dans une très bonne université européenne, et les liens avec le CERN ont permis de faire grandir de façon spectaculaire l'activité en physique théorique des hautes énergies à l'EPFL. Le plus étonnant, c'est que tout cela s'est fait sans que personne ne s'en rende vraiment compte, et sans qu'Alfonso ne cherche à aucun moment à en retirer la moindre gloire ou le moindre bénéfice personnel.

Je n'ai jamais collaboré scientifiquement avec Alfonso, mais je sais par des collègues avec lesquels j'ai travaillé et qui sont dans le domaine des simulations *ab initio* qu'il a contribué de façon significative au développement de ce domaine. D'une certaine façon, je regrette de ne pas avoir eu cette

chance. La comunità de la théorie de la matière condensée est une communauté ultra compétitive, et elle est peuplée de collègues aux egos démesurés. Alfonso était la preuve qu'on peut être un excellent scientifique et un excellent gestionnaire

sans tomber dans ce travers, mais en arrondissant les angles dès que possible. J'ai eu beaucoup de chance qu'il soit là lorsque je suis arrivé à Lausanne, et je lui suis infiniment reconnaissant de son accueil et de son soutien.

## Galeotto fu il risotto Galehaut fut le *risotto*

---

**Riccardo Rattazzi**

---

Con questo breve testo voglio offrire la mia testimonianza su Alfonso come collega e come essere umano. La mia interazione con lui è durata solo pochi anni e non è stata di carattere genuinamente scientifico, data la diversità dei nostri campi di ricerca. La mia è dunque una piccola testimonianza. Spero però che, per quanto piccola, essa possa trovare posto come tessera nel mosaico che stiamo cercando di costruire con i nostri ricordi.

La mia traiettoria nel mondo e quella di Alfonso si avvicinarono per un tempo abbastanza breve. Ma questo bastò per portare il resto della mia vita nell'orbita dell'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). La forza di attrazione, per così dire gravitazionale, del politecnico, di cui Alfonso era paladino, ebbe una parte importante. Ma altrettanto importante fu la sapienza, direi magnetica, con cui Alfonso seppe leggermi dentro e circondarmi di argomenti che resero Losanna la meta naturale. E va considerato che a quel tempo, due decenni fa, l'EPFL non rappresentava una scelta professionale scontata per un fisico teorico delle particelle, in quanto la disciplina vi era a mala pena rappresentata e da pochissimo tempo. Ma Alfonso seppe presentarmi la

Par ce court texte, je souhaite apporter mon témoignage sur Alfonso en tant que collègue et en tant qu'être humain. Mon interaction avec lui n'a duré que quelques années et n'était pas de nature véritablement scientifique, étant donné la diversité de nos domaines de recherche. Il s'agit donc d'un petit témoignage. Cependant, j'espère que, aussi petit soit-il, il pourra trouver sa place en tant que carreau dans la mosaïque que nous essayons de construire avec nos souvenirs.

Ma trajectoire dans le monde et celle d'Alfonso se sont rapprochées pendant une période assez courte. Mais cela a suffi pour mettre le reste de ma vie dans l'orbite de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). La force attractive, pour ainsi dire gravitationnelle, de l'École polytechnique, dont Alfonso était l'un des champions, a joué un rôle important. Mais tout aussi importante a été la sagesse, pour ainsi dire magnétique, avec laquelle Alfonso a su lire en moi et m'entourer d'arguments qui ont fait de Lausanne la destination naturelle. Et il faut tenir compte du fait qu'à l'époque, il y a deux décennies, l'EPFL n'était pas un choix de carrière évident pour un physicien théorique des particules, car la discipline y

libertà e le prospettive di sviluppo che questo fatto offriva, senza eccedere nella rappresentazione e trasmettendo sincerità, perché sincero era davvero. E a distanza di molti anni non posso che apprezzare la lungimiranza di Alfonso. Tuttavia, allora non avevo le idee chiare e per molti mesi rimasi a tentennare, indeciso se scegliere Losanna o optare per un'alternativa, professionalmente più ovvia. Alla fine, alla mia ennesima visita per sondare l'ambiente, forse perché non ne poteva più o forse per un colpo di genio, mi propose di andare a pranzo fuori dal politecnico, lontano dagli ingegneri e da quell'ambiente che appariva allora un po' muffo, in un luogo con un'allure più umanistica e intellettuale. Fu così che a un certo punto mi si presentò, in fondo, il blu brillante del lago, più vicino, il verde acerbo di un grande prato e, sotto gli occhi, il nero profumato di un risotto alla seppia. Decisi in quell'istante. E probabilmente fu davvero un colpo di genio. Alfonso aveva capito in pieno che tipo ero. Fu la scelta giusta e sarò sempre infinitamente grato ad Alfonso per gli eccitanti anni che ebbi nel mio lavoro di fisico e di docente dopo essermi stabilito all'EPFL.

Tra tutti i colleghi incontrati nel corso della mia carriera e che non operano nella mia stessa area di ricerca Alfonso è stato sicuramente il più importante. Per i cinque anni in cui rimase professore all'EPFL dopo il mio arrivo, egli ebbe anche il ruolo di mentore, sempre pronto ad accogliermi nel suo ufficio per darmi consigli, ma anche per raccontarmi qualche storia. È stato così che in quegli incontri, oltre ad aiutarmi a risolvere problemi contingenti, Alfonso mi ha insegnato, credo inconsapevolmente, uno stile di interazione coi colleghi più giovani, un approccio giocoso ma fatto di suggerimenti concreti. C'è dunque un po' di Alfonso anche al di là della fisica della materia all'EPFL, nella fisica delle particelle, al Cubotron. Grazie Alfonso!

était à peine représentée et depuis très peu de temps. Mais Alfonso a su me présenter la liberté et les perspectives de développement que cela offrait, sans trop en faire et en étant sincère, car il l'était vraiment. Et bien des années plus tard, je ne peux qu'apprécier la clairvoyance d'Alfonso. Cependant, à l'époque, je n'avais pas les idées claires et pendant de nombreux mois, j'ai hésité, indécis entre choisir Lausanne ou opter pour une autre possibilité, professionnellement plus évidente. Finalement, lors de ma énième visite pour sonder l'environnement, peut-être parce qu'il n'en pouvait plus ou peut-être par un coup de génie, il m'a proposé d'aller déjeuner à l'extérieur de l'École polytechnique, loin des ingénieurs et de l'environnement qui me paraissait alors un peu moisi, dans un lieu à l'allure plus humaniste et pseudo-intellectuelle. C'est ainsi qu'à un moment donné, au fond, le bleu éclatant du lac s'est présenté à moi, plus près, le vert pas encore mûr d'une grande prairie et, sous mes yeux, le noir parfumé d'un *risotto* de seiche. J'ai pris ma décision à cet instant. Et ce fut sans doute un coup de génie. Alfonso avait parfaitement compris quel genre de personne j'étais. C'était le bon choix et je serai toujours infiniment reconnaissant à Alfonso pour les années passionnantes que j'ai vécues dans mon travail de physicien et de chargé de cours après mon établissement à l'EPFL.

De tous les collègues que j'ai rencontrés au cours de ma carrière et qui ne travaillaient pas dans le même domaine de recherche que moi, Alfonso a certainement été le plus important. Pendant les cinq années où il est resté professeur à l'EPFL après mon arrivée, il a également joué le rôle de mentor, toujours prêt à m'accueillir dans son bureau pour me donner des conseils mais aussi pour me raconter des histoires. C'est ainsi que lors de ces rencontres, en plus de m'aider à résoudre des problèmes contingents, Alfonso m'a enseigné, inconsciemment je pense, un style d'interaction avec des collègues plus jeunes, une approche ludique mais faite de suggestions concrètes. Il y a donc un peu d'Alfonso même au-delà de la physique de la matière à l'EPFL, en physique des particules, au Cubotron. Merci Alfonso !



# Alfonso Baldereschi: much more than a Physics Professor

## Alfonso Baldereschi: bien plus qu'un Professeur de physique

Željko Šljivančanin

I first met Alfonso at the end of August 2001 when I arrived in Lausanne for a job interview for a postdoc position in Alfredo Pasquarello's group. The Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA) was located at the corner of the EPFL campus, and Alfonso, as its director, would only occasionally be there. His main office was in the Physics Department building, where he also served as director of the Institute of Theoretical Physics (ITP). All I remember from our first meeting was that Alfonso was late. Immediately afterwards, Alfredo let me in his car and drove me to the train station.

A few months later, I joined Alfredo's group. Over the next two years, my interactions with Alfonso were sporadic and primarily related to administrative matters. Nevertheless, certain aspects of his personality were impossible to overlook. His scientific achievements, his age, and the way he dressed and spoke, combined with the fact that he directed two institutes at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), naturally led to respect from colleagues. This respect only deepened as one got to know him better.

From that time, I recall IRRMA seminars where Alfonso had the habit of asking questions about problems we thought were already well understood and resolved. This forced both the speaker and the audience to reconsider their positions before continuing the discussion. Later, when I joined his group and Vladan Stevanović arrived as our PhD student, our scientific discussions became regular. Our

J'ai rencontré Alfonso pour la première fois à la fin du mois d'août 2001, lorsque je suis arrivé à Lausanne pour un entretien d'embauche en vue d'un poste de postdoctorant dans le groupe d'Alfredo Pasquarello. L'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA) était situé au bout du campus de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), et Alfonso, en tant que directeur, ne s'y trouvait qu'occasionnellement. Son bureau principal se trouvait dans le bâtiment du Département de physique, où il était également le directeur de l'Institut de théorie des phénomènes physiques (ITP). Tout ce dont je me souviens de notre première rencontre, c'est qu'Alfonso était en retard. Immédiatement après, Alfredo m'a fait monter dans sa voiture et m'a conduit à la gare.

Quelques mois plus tard, j'ai rejoint le groupe d'Alfredo. Au cours des deux années suivantes, mes interactions avec Alfonso ont été sporadiques et principalement liées à des questions administratives. Néanmoins, certains aspects de sa personnalité étaient impossibles à ignorer. Ses réalisations scientifiques, son âge, sa façon de s'habiller et de parler, combinés au fait qu'il dirigeait deux instituts à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), lui valaient naturellement le respect de ses collègues. Ce respect ne faisait que se renforcer à mesure qu'on apprenait à mieux le connaître.

Je me souviens de séminaires de l'IRRMA au cours desquels Alfonso avait l'habitude de poser des questions sur des problèmes que nous pensions déjà bien

meetings were in his office, usually at 3 p.m., and we never finished before 8 p.m. He would open a folder with the material from our previous discussions, and after Vladan or I updated him on the latest results, he was ready to resume the conversation where we had left off a month or two earlier. There was always a coffee break, followed by a cigarette break, and later another one. Despite serious health issues, he opposed suggestions to quit smoking. Alfonso was not one to follow social trends, nor was he particularly fond of the aggressive activism that has become increasingly present in modern societies.

His attitude toward science was traditional—in the best sense of the word. Alfonso considered science a passion and never reduced it to a checklist of publications and grants. He rejected the idea of strict deadlines and lived life as a genuinely free spirit, guided by his own principles.

Like many Italians, Alfonso had a deep appreciation for good food. It's almost impossible to write about him without mentioning that. Dinners with him were always enjoyable—and long. *"Fast food is for fast tourists,"* he once remarked as we dined at a restaurant near Place Saint-François during one of my visits after I'd left Lausanne.

After Alfonso retired from EPFL in 2011, our communication diminished. Regrettably, I never made it to Trieste to visit him, although Belgrade wasn't far. Writing emails to him was pointless—Alfonso disliked them. He preferred face-to-face conversations, as he believed that's how real communication should be.

compris et résolu. Cela obligeait l'orateur et l'auditoire à reconsidérer leurs positions avant de poursuivre la discussion. Plus tard, lorsque j'ai rejoint son groupe et que Vladan Stevanović est devenu notre doctorant, nos discussions scientifiques sont devenues régulières. Nos réunions se tenaient dans son bureau, généralement à 15 heures, et nous ne terminions jamais avant 20 heures. Il ouvrait un dossier contenant les documents de nos discussions précédentes et, après que Vladan ou moi-même l'avions informé des derniers résultats, il était prêt à reprendre la conversation là où nous l'avions laissée un mois ou deux auparavant. Il y avait toujours une pause café, suivie d'une pause cigarette, puis d'une autre. Malgré de graves problèmes de santé, il rejetait les suggestions d'arrêter de fumer. Alfonso n'était pas du genre à suivre les tendances sociales, ni à aimer l'activisme agressif qui est de plus en plus présent dans les sociétés modernes.

Son attitude à l'égard de la science était traditionnelle, dans le meilleur sens du terme. Alfonso considérait la science comme une passion et ne la réduisait jamais à une liste de publications et de subventions. Il rejetait l'idée de délais stricts et vivait sa vie comme un véritable esprit libre, guidé par ses propres principes.

Comme beaucoup d'Italiens, Alfonso appréciait profondément la bonne cuisine. Il est presque impossible d'écrire sur lui sans le mentionner. Les dîners avec lui étaient toujours agréables – et longs. *« La restauration rapide est faite pour les touristes rapides »*, a-t-il fait remarquer un jour, alors que nous dînions dans un restaurant près de la Place Saint-François, lors d'une de mes visites après mon départ de Lausanne.

Après qu'Alfonso a pris sa retraite de l'EPFL, nos communications ont diminué. Malheureusement, je n'ai jamais pu me rendre à Trieste pour lui rendre visite, bien que Belgrade ne soit pas si éloignée. Il était inutile de lui écrire des courriels, car Alfonso ne les aimait pas. Il préférait les conversations en face à face, car il pensait que c'était ainsi que devait se dérouler une véritable communication.

# My four years with Alfonso Baldereschi

## Mes quatre ans avec Alfonso Baldereschi

Vladan Stevanović

I was a graduate student of Alfonso Baldereschi at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). My PhD started in July of 2005, and ended in October 2009. During those four years and three months, I had the opportunity to interact with Alfonso and to get to know him personally. Initially, my interactions with him were rare. When I started, I worked mostly with Željko Šljivančanin, who was Alfonso's postdoc and my "babysitter" at the time. About a year after my arrival, Željko left for Denmark. His departure left me one-on-one with Alfonso for the remaining time, slightly more than three years. It is during those years that my interactions with Alfonso became more frequent and more direct, and it is then that I got to know him a bit better. This text is a brief reflection on those years the way I remember them. There are many other people who knew Alfonso and his work much better than me and who can speak about his legacy much better than I ever could.

At that stage in his career, Alfonso was a very hands-off advisor. For example, he never had, and never even asked for, my cell phone number, which is almost unthinkable these days in the USA, at least where I live now. It was always me chasing him rather than the other way around. And it wasn't easy to catch him. At that time Alfonso was a double director—of the EPFL Institute of Theoretical Physics and of the Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA)—and a double professor—at EPFL and at the University of Trieste. The usual sign he was in Lausanne and not in Trieste was a long line of people waiting in front of his office, all with some very urgent matter that needed to be dealt with promptly. But I was never discouraged by that. Whenever I felt I needed to have a discussion, I would write to him repeatedly asking for a meeting. In typical Alfonso

J'étais un étudiant d'Alfonso Baldereschi à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL). Mon doctorat a commencé en juillet 2005 et s'est terminé en octobre 2009. Au cours de ces quatre ans et trois mois, j'ai eu l'occasion d'interagir avec Alfonso et d'apprendre à le connaître personnellement. Au début, mes interactions avec lui étaient rares. Lorsque j'ai commencé, j'ai surtout travaillé avec Željko Šljivančanin, qui était le postdoctorant d'Alfonso et mon « baby-sitter » à l'époque. Environ un an après mon arrivée, Željko est parti pour le Danemark. Son départ m'a laissé seul avec Alfonso pendant les trois années restantes. C'est au cours de celles-ci que mes interactions avec Alfonso sont devenues plus fréquentes et plus directes, et que j'ai appris à le connaître un peu mieux. Ce texte est une brève réflexion sur ces années telles que je me les rappelle. De nombreuses autres personnes ont connu Alfonso et son travail bien mieux que moi et peuvent parler de son héritage bien mieux que je ne pourrais jamais le faire.

À ce stade de sa carrière, Alfonso était un directeur de thèse très peu interventionniste. Par exemple, il ne m'a jamais demandé mon numéro de téléphone portable, ce qui est presque impensable de nos jours aux États-Unis, du moins là où je vis maintenant. C'est toujours moi qui le poursuivais, et non l'inverse. Et ce n'était pas facile de l'attraper. À l'époque, Alfonso était doublement directeur – de l'Institut de la théorie des phénomènes physiques de l'EPFL et de l'Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA) – et doublement professeur – à l'EPFL et à l'Université de Trieste. Le signe habituel qu'il était à Lausanne et non à Trieste était une longue file de personnes attendant devant son bureau, toutes avec une affaire très urgente à traiter rapidement. Mais cela ne m'a jamais découragé.



Restaurant au sommet de la Rue du Petit-Chêne aujourd'hui. Photo d'Alfredo Pasquarello.

style, those emails were never replied to. He would just show up in my office saying something like: "We should meet, correct? How about tomorrow at 4 p.m.?" 4 p.m. on the next day would turn into 5 p.m., and the meetings, though not very frequent, would typically last for four or five hours. We would start at EPFL and oftentimes end in some restaurant for dinner, the one in the building "la Banane" on the campus of the University of Lausanne (Restaurant de Dorigny), or somewhere downtown Lausanne. Conversations were broad, ranging from science and problems at hand to various Swiss affairs, global politics, and economics, usually over a glass of wine or a beer and some very Vaudois meal. I have vivid memories of us talking, with Željko as well during one of his visits, in a little restaurant downtown Lausanne atop Rue du Petit-Chêne over a *papet vaudois* that Alfonso strongly suggested we should try.

I feel very fortunate to have had Alfonso as my advisor. During those years, at least in his interactions with me, he came across as a relatively quiet person, who would often communicate much more implicitly and through his body language rather than explicitly in words. He would use words very carefully and very

Chaque fois que je sentais le besoin d'avoir une discussion, je lui écrivais à plusieurs reprises pour lui demander un rendez-vous. Dans le style typique d'Alfonso, ces courriels ne recevaient jamais de réponse. Il débarquait simplement dans mon bureau en disant quelque chose comme : « *Nous devrions nous rencontrer, n'est-ce pas ? Pourquoi pas demain à 16 heures ?* » Le lendemain, 16 heures devenaient 17 heures, et les réunions, bien que peu fréquentes, duraient généralement quatre à cinq heures. Nous commencions à l'EPFL et terminions souvent dans un restaurant pour dîner, celui du bâtiment « la Banane » sur le campus de l'Université de Lausanne (Restaurant de Dorigny), ou quelque part dans le centre de Lausanne. Les conversations étaient vastes, allant de la science et des problèmes actuels aux diverses affaires suisses, à la politique mondiale et à l'économie, généralement autour d'un verre de vin ou d'une bière et d'un repas très vaudois. Je me souviens très bien de notre conversation, avec Željko lors d'une de ses visites, dans un petit restaurant du centre de Lausanne, au sommet de la Rue du Petit-Chêne, autour d'un *papet vaudois* qu'Alfonso nous avait fortement conseillé de goûter.

J'ai beaucoup de chance d'avoir eu Alfonso comme superviseur. Au cours de ces années, du moins dans ses interactions avec moi, il est apparu comme une personne relativement discrète, qui communiquait souvent de manière plus implicite et à travers son langage corporel qu'explicitement avec des mots. Il utilisait les mots avec beaucoup de soin et de réflexion, mais aussi avec parcimonie, ce qui m'a surpris et m'a demandé un peu de temps pour m'y habituer. Les gens des Balkans sont bavards, nous aimons beaucoup parler. Alfonso n'était pas tout à fait comme ça. En revanche, les conversations avec lui étaient pleines d'informations utiles et d'idées créatives. Je lui dois beaucoup pour tout ce que j'ai fait de bien dans ma vie professionnelle. Ses phrases courtes, mais soigneusement réfléchies, m'ont incité à réfléchir en profondeur aux problèmes sur lesquels je travaillais, ce qui s'est avéré extrêmement précieux plus tard dans ma carrière. Plus important encore, lors de mes conversations avec lui, toutes les connaissances acquises au cours de mes études de premier cycle, qui avaient été stockées passivement dans mon cerveau jusqu'alors, ont commencé



thoughtfully, but also sparingly, which came as a surprise and needed some getting used to. People from the Balkans are chatty, we like to talk a lot. Alfonso was not exactly like that. On the other hand, conversations with him were packed with useful information and creative ideas. I have a great deal to thank him for whatever good I did in my professional life. His short, but carefully crafted sentences motivated me to think deeply about the problems I worked on, which turned out to be extremely valuable later in my career. Most importantly, in conversations with him, all the knowledge from my undergraduate studies, which had been passively stored in my brain until then, began to gain meaning, connect, and make real sense. All the pieces of the "puzzle" started to fall into place. That felt empowering and that, I think, is the most valuable influence Alfonso had on me.

To my recollection, Alfonso and I connected over our shared curiosity and interest in apparent paradoxes and situations that seem to produce unexpected outcomes. One such situation that was part of my thesis was related to the ground-state structure of small clusters of Ir atoms, particularly  $\text{Ir}_4$ . Our calculations on free-standing  $\text{Ir}_4$  clusters would always yield the square-planar configuration of atoms at lower energy than the tetrahedral one. But it is the tetrahedron that was found in experiments. It was unclear where the disagreement between theory and experiments was coming from: whether it was the theory that was wrong or whether there was something else happening in the experiments. Resolving this conundrum ended up taking up a good fraction of my thesis, and it was a topic of numerous discussions between Alfonso and me. As a model system, we were trying to guess what would be the preferred structure if we just had four hydrogen atoms (four  $s$  orbitals with one electron each). Initially, we were both convinced that the tetrahedron should be the lowest-energy structure. It was because we believed that the six chemical bonds that the tetrahedral geometry offers, the maximal amount that can be realised with four atoms, would give the lowest total energy for the tetrahedral configuration. However, in that case too, the square-planar geometry turns out to be lower in energy. That came as a surprise to both of us. The reasons have to do with how the antibonding and/or nonbonding molecular orbitals form and to what

à prendre du sens, à se connecter et à avoir un sens réel. Toutes les pièces du « puzzle » ont commencé à se mettre en place. Cela m'a donné un sentiment de puissance et je pense que c'est l'influence la plus précieuse qu'Alfonso ait eu sur moi.

Si je me souviens bien, Alfonso et moi avons établi un lien grâce à notre curiosité et à notre intérêt commun pour les paradoxes apparents et les situations qui semblent produire des résultats inattendus. L'une de ces situations, qui faisait partie de ma thèse, était liée à la structure de l'état fondamental de petits agrégats d'atomes d'Ir, en particulier d' $\text{Ir}_4$ . Nos calculs sur les agrégats d' $\text{Ir}_4$  isolés donnaient toujours la configuration carrée-planaire des atomes à une énergie inférieure à celle de la configuration tétraédrique. Or, c'est le tétraèdre qui a été trouvé dans les expériences. L'origine du désaccord entre la théorie et les expériences n'était pas claire : s'agissait-il d'une erreur de la théorie, ou quelque chose d'autre se produisait-il dans les expériences ? La résolution de cette énigme a représenté une bonne partie de ma thèse et a fait l'objet de nombreuses discussions entre Alfonso et moi. Comme système modèle, nous essayions de deviner quelle serait la structure préférée si nous n'avions que quatre atomes d'hydrogène (quatre orbitales  $s$  avec un électron chacune). Au départ, nous étions tous deux convaincus que le tétraèdre devait être la structure la plus basse en énergie. Nous pensions en effet que les six liaisons chimiques offertes par la géométrie tétraédrique, soit la quantité maximale pouvant être réalisée avec quatre atomes, donneraient l'énergie totale la plus faible pour la configuration tétraédrique. Or, dans ce cas également, la géométrie carrée-planaire s'est avérée plus faible en énergie. Cela nous a surpris tous les deux. Les raisons sont liées à la façon dont les orbitales moléculaires antiliantes et/ou non liantes se forment et dans quelle mesure elles sont remplies d'électrons. Ce qui, en fin de compte, rend la structure tétraédrique des agrégats d' $\text{Ir}_4$  plus stable, comme le montrent les expériences, ce sont les atomes de carbone qui restent attachés aux atomes d'Ir à la fin du processus de traitement. C'est au cours de discussions comme celles-ci, en analysant dans les moindres détails les différents effets qui pourraient être en jeu, que j'ai eu l'occasion de voir Alfonso en action et de participer à son approche unique à la



extent they are filled with electrons. What ultimately makes the tetrahedral structure of  $\text{Ir}_4$  clusters lower in energy as seen in experiments, are the carbon atoms that remain attached to Ir atoms as result of processing. It is during discussions such as those, while analyzing to the last detail various effects that might be at play, that I had the opportunity to see Alfonso in action, as well as to take part in his unique approach to solving problems. Now, looking back fifteen years later, I can only say I watched a true master of our craft. I have not met many people with such a capacity for analytic thinking and originality of their ideas.

It remains a mystery to me how much I really got to know Alfonso Baldereschi as a person. After all, he was my advisor and I, his student. At times it felt like I managed to break through to him. We both enjoyed a good laugh and had a similar sense of humor. I remember us laughing over a video showing some high-level politician visiting one of the countries in southeast Europe. The video showed the crowd in the streets cheering, and him shaking hands with a lot of people. At some point his wristwatch just disappeared. It seemed like someone in the crowd took advantage of the moment to snatch the watch from the high-level visitor. I remember us laughing hard at the sheer audacity of that event as both of us knew that region of Europe very well, with numerous pickpockets picking on tourists; but this was the next level. Alfonso was also very witty. Very often I find myself quoting him. One of his remarks that stuck with me to this day was about copying text from various sources into documents. I was working on my thesis proposal and somewhat naively mentioned how my writings could simply be copied and pasted into a paper draught, to which Alfonso replied: *"Copying is easy, but pasting you may find a little harder."* Another time, while talking in the corridors of the PH building at EPFL, a person approached us politely asking for directions to some room upstairs. But the room number was wrong. Alfonso said something like: *"The room number such-and-such is on the imaginary axis, it does not exist."* Another comment that I often quote is the one he made while discussing the possibility of having local pseudopotentials constructed from the Hartree-Fock Hamiltonian that I found some people talking about in the literature.

résolution des problèmes. Quinze ans plus tard, avec le recul, je ne peux que constater que j'ai observé un véritable maître du métier. Je n'ai pas rencontré beaucoup de personnes dotées d'une telle capacité d'analyse et d'une telle originalité dans leurs idées.

Je ne sais toujours pas dans quelle mesure j'ai vraiment réussi à connaître Alfonso Baldereschi en tant que personne. Après tout, il était mon professeur et moi, son élève. Par moments, j'ai eu l'impression d'être parvenu jusqu'à lui. Nous aimions tous les deux rire et avions le même sens de l'humour. Je me souviens que nous avons ri d'une vidéo montrant un homme politique de haut niveau en visite dans l'un des pays du sud-est de l'Europe. La vidéo montrait la foule dans les rues en train d'applaudir et le politicien en train de serrer la main de nombreuses personnes. À un moment donné, sa montre-bracelet a disparu. Il semble que quelqu'un dans la foule ait profité de l'occasion pour arracher la montre du visiteur de haut niveau. Je me souviens que nous avons beaucoup ri de l'audace de cet événement, car nous connaissions tous deux très bien cette région d'Europe, où de nombreux pickpockets s'en prenaient aux touristes ; mais là, c'était le niveau supérieur. Alfonso avait également beaucoup d'esprit. Il m'arrive très souvent de le citer. L'une de ses remarques qui m'a marqué jusqu'à aujourd'hui concernait la copie de textes provenant de diverses sources dans des documents. Je travaillais sur ma proposition de thèse et, un peu naïvement, j'ai mentionné comment mes écrits pouvaient être simplement copiés et collés dans un projet d'article, ce à quoi Alfonso a répondu : *« Copier, c'est facile, mais coller, c'est un peu plus difficile »*. Une autre fois, alors que nous discutons dans les couloirs du bâtiment PH de l'EPFL, une personne s'est approchée de nous pour nous demander poliment de lui indiquer une salle à l'étage. Mais le numéro de la salle n'était pas le bon. Alfonso a dit quelque chose comme : *« La salle numéro tant est sur l'axe imaginaire, elle n'existe pas »*. Un autre commentaire que je cite souvent est celui qu'il a fait en discutant de la possibilité de construire des pseudopotentiels locaux à partir de l'hamiltonien Hartree-Fock dont certaines personnes parlent dans la littérature. Dans le style typique d'Alfonso, son commentaire était bref, il a dit quelque chose comme : *« Hmm, vous savez, le mot "local" et Hartree-Fock sont orthogonaux l'un par rapport à l'autre »*.

In typical Alfonso style, his comment was brief; he said something to the effect of: *"Hmm, you know, the word 'local' and Hartree-Fock are orthogonal to each other."*

All my interactions with Alfonso happened during his last years at EPFL. I think I was the last PhD student whom he advised directly. I learned from him much more through his subtle "touches" than through explicit guidance. Now that I think of it, that was exactly what I needed. To be left alone to fight with the problems on my own and have the help available when I felt I really needed it. That worked for me. Alfonso once told me how: *"That way, you become independent sooner."* And he was so right (as usual). I cannot say whether his approach was intentional and crafted to whatever he thought I may need, or whether it was just who Alfonso was as an advisor. I really don't know. I never got a chance to ask him. We didn't see each other much after I finished my thesis. I left EPFL in October 2009 and came back for a short visit in the spring of 2011. That was the last time I saw Alfonso in person.

When I think of him, I feel very fortunate to have been his student, and grateful for the time he spent with me. He changed my life in many ways. I'm not sure whether he was even aware of how much those years at EPFL meant to me, and how transformative they were. A kid from eastern Serbia, who grew up surrounded by wars and economic crises. Genuinely curious and interested in science, who got an opportunity to a stable life, to organize his curiosity and make a living out of it. I am so grateful to Alfonso for that opportunity, and regret not having spent more time in conversations with him. I have so many things to tell him and so many things to ask him, especially now after having spent 15-odd years in this profession of ours. Not sure he would want to participate in that discussion, but I know I certainly would. Unfortunately, those opportunities are now gone and, as it goes, memories remain, some of which I tried reflecting on in this text. I miss discussions with Alfonso, but, on the other hand, I was among the very lucky ones who have had the chance to know him and am grateful for that.

Toutes mes interactions avec Alfonso ont eu lieu au cours de ses dernières années à l'EPFL. Je pense que j'ai été le dernier doctorant qu'il a supervisé directement. J'ai beaucoup plus appris de lui par ses « touches » subtiles que par ses conseils explicites. Maintenant que j'y pense, c'est exactement ce dont j'avais besoin. D'être laissé seul pour affronter les problèmes et d'avoir de l'aide quand j'en avais vraiment besoin. C'est ce qui a fonctionné pour moi. Alfonso m'a dit un jour : *« De cette façon, on devient plus vite indépendant »*. Et il avait tout à fait raison (comme d'habitude). Je ne peux pas dire si son approche était intentionnelle et adaptée à ce dont il pensait que j'avais besoin ou si c'était simplement la personnalité d'Alfonso en tant que professeur. Je ne sais vraiment pas. Je n'ai jamais réussi à lui demander. Nous ne nous sommes pas beaucoup vus après la fin de ma thèse. J'ai quitté l'EPFL en octobre 2009 et je suis revenu pour une courte visite au printemps 2011. C'est la dernière fois que j'ai vu Alfonso en personne.

Lorsque je pense à lui, je me sens très privilégié d'avoir été son élève et je lui suis reconnaissant du temps qu'il a passé avec moi. Il a changé ma vie à bien des égards. Je ne sais pas s'il était conscient de l'importance de ces années à l'EPFL pour moi et de la façon dont elles ont transformé ma vie. Un enfant de l'est de la Serbie, qui a grandi au milieu des guerres et des crises économiques. Un enfant véritablement curieux et intéressé par la science, qui a réussi à avoir une vie stable, à organiser sa curiosité et à en faire son gagne-pain. Je suis très reconnaissant à Alfonso pour cette opportunité et je regrette de ne pas avoir passé plus de temps à discuter avec lui. J'ai tant de choses à lui dire et tant de choses à lui demander, surtout après avoir passé à peu près 15 ans dans cette profession qui est la nôtre. Je ne suis pas sûr qu'il voudrait participer à cette discussion, mais je sais que moi certainement. Malheureusement, ces occasions se sont envolées et, comme toujours, des souvenirs persistent, dont certains que j'ai essayé d'évoquer dans ce texte. Les discussions avec Alfonso me manquent, mais, d'un autre côté, je fais partie des très privilégiés qui ont eu la chance de le connaître et je lui en suis reconnaissant.



# L'appel du pays natal







# Grazie, Alfonso!

## Merci, Alfonso!

---

Angiolino Stella

---

Il contributo di Alfonso Baldereschi alla scienza ha avuto inizio nei primi anni '70, in un clima specialmente fecondo per la fisica del nostro paese. Infatti, dopo un lungo periodo caratterizzato da un elevato investimento nel settore nucleare, si apriva allora una nuova fase che ha avuto anche uno sviluppo straordinario della fisica dello stato solido. Specificamente, la fisica dei semiconduttori ha ricevuto un eccezionale impulso grazie a scienziati illuminati come Franco Bassani, fisico teorico, reduce da un importante periodo di lavoro negli Stati Uniti. In particolare, negli anni '70, si è assistito al fiorire di talentuosi fisici teorici della materia condensata presso le università italiane, in particolare nelle sedi di Roma, Pisa e Trieste. Fra i giovani eccellenti si è distinto ben presto Alfonso Baldereschi, studente di tesi di Franco Bassani alla Scuola Normale di Pisa.

Il progresso nell'ottenimento dei risultati ha avuto evidenza nel lavoro di Alfonso in varie fasi, e ha incluso nuovi metodi e diverse aree di applicazione. Tra i sistemi fisici da lui proposti e studiati sono senz'altro da menzionare la rivelazione e caratterizzazione dei cosiddetti *interlayer states* in sistemi bidimensionali che hanno applicazioni molto importanti, soprattutto in campo elettronico.

La contribution d'Alfonso Baldereschi à la science a débuté au début des années 70, dans un climat particulièrement fécond pour la physique de notre pays. En effet, après une longue période caractérisée par un investissement élevé dans le secteur nucléaire, une nouvelle phase s'ouvrait alors, marquée par un développement extraordinaire de la physique de l'état solide. En particulier, la physique des semi-conducteurs a bénéficié d'un élan exceptionnel, grâce à des scientifiques éclairés comme Franco Bassani, physicien théoricien, de retour d'une importante période de travail aux États-Unis. Dans les années 70, on a notamment vu émerger de talentueux physiciens théoriciens de la matière condensée dans les universités italiennes, notamment à Rome, Pise et Trieste. Parmi les jeunes chercheurs prometteurs, Alfonso Baldereschi s'est rapidement distingué en tant qu'étudiant en thèse sous la direction de Franco Bassani à la École normale de Pise.

Le progrès dans l'obtention des résultats s'est manifesté dans le travail d'Alfonso à plusieurs étapes, incluant de nouvelles méthodes et différents domaines d'application. Parmi les systèmes physiques qu'il a proposés et étudiés, la détection et la caractérisation des états dits *interlayer* dans des

Pur non avendo io collaborato direttamente con Alfonso, ho avuto con lui momenti di confronto di idee e amichevoli discussioni in varie occasioni di sue visite e seminari, quando mi è capitato di incontrarlo sia in Italia che all'estero. Eccellente docente, con la sua pacatezza è stato sempre in grado di rispondere esaurientemente a molte domande e curiosità, sia mie sia di allievi e interlocutori in generale. L'ho sempre apprezzato per l'approccio sereno e collaborativo oltre alla chiarezza nelle affermazioni e analisi, doti che gli sono universalmente riconosciute. Ha dato in numerose occasioni, anche in campo internazionale, risposte chiare e convincenti a diversi quesiti che venivano posti da parte di colleghi e di studenti, in modo da soddisfare tutti con estrema semplicità. Nella sua attività in Italia, oltre alla ricerca scientifica e alla formazione di molti fisici teorici, ha dedicato non poco tempo a convegni e visite scientifiche, lasciando un segno indimenticabile.

Grazie Alfonso, non dimenticheremo mai quanto hai prodotto come fisico e come uomo. Sarai un esempio per tutti, soprattutto per i giovani ma anche per noi più anziani.

systèmes bidimensionnels méritent certainement d'être mentionnées, car ils ont des applications très importantes, notamment dans le domaine de l'électronique.

Bien que je n'aie pas collaboré directement avec Alfonso, j'ai eu avec lui des moments d'échange d'idées et des discussions amicales à plusieurs occasions, lors de ses visites et séminaires, lorsque j'ai eu l'occasion de le rencontrer, tant en Italie qu'à l'étranger. Excellent enseignant, avec son calme, il a toujours su répondre de manière exhaustive à de nombreuses questions et curiosités, tant les miennes que celles des élèves et interlocuteurs en général. Je l'ai toujours apprécié pour son approche sereine et collaborative, ainsi que pour la clarté de ses affirmations et analyses, des qualités universellement reconnues. À de nombreuses reprises, y compris sur la scène internationale, il a fourni des réponses claires et convaincantes à diverses questions posées par des collègues et étudiants, réussissant à satisfaire tout le monde avec une extrême simplicité. Dans son activité en Italie, en plus de la recherche scientifique et de la formation de nombreux physiciens théoriciens, il a consacré beaucoup de temps à des conférences et à des visites scientifiques, laissant une empreinte inoubliable.

Merci Alfonso, nous n'oublierons jamais tout ce que tu as accompli en tant que physicien et en tant qu'homme. Tu seras un exemple pour tous, surtout pour les jeunes, mais aussi pour nous, les plus âgés.

# Notturmo

## Nocturne

Lucio Braicovich

Ho conosciuto Alfonso a Trieste negli anni '60, quando entrambi frequentavamo in vario modo l'International Centre for Theoretical Physics (ICTP). Subito mi colpì il grande entusiasmo di Alfonso per la ricerca e la sua capacità di giovane teorico di parlare con gli sperimentali come me. Lì iniziammo un dialogo cui tenevamo molto, in particolare si ragionava della spettroscopia di fotoemissione di valenza, dove molto restava da fare, basti pensare al fatto che si dovette aspettare almeno una decina d'anni perché questa tecnica si consolidasse. In questo contesto, nei primi anni '70 abbiamo sperato di fare un lavoro insieme, cosa che – anticipo subito – non avvenne perché ci eravamo probabilmente posti obiettivi troppo vasti. E poi c'era la difficoltà di trovare del tempo da dedicare a questa idea. E qui arriva il colpo di teatro di Alfonso, che disse: "Vediamoci la notte, perché io cambio spesso treno alla Stazione Centrale di Milano e ho delle ore libere dalle 23 alle 6 del mattino". Essendo anch'io un nottambulo, aderii all'iniziativa con piacere. C'erano però delle difficoltà logistiche: le sale d'aspetto della stazione venivano chiuse per sicurezza, le persone erano controllate perché si era in epoca di terrorismo. Decidemmo di andare nel mio ufficio al Dipartimento di Fisica del Politecnico. Anche l'atteggiamento dei guardiani però non era benevolo e avemmo delle difficoltà a entrare nel campus. Insomma, perdemmo un po' dell'entusiasmo che avevamo e ci consolammo con il famoso aforisma di Richard Feynman: "La Fisica è quella cosa che si fa di notte fonda...". Fu un'esperienza travagliata che durò qualche settimana, poi fummo sopraffatti dalle difficoltà logistiche e dagli impegni presi in precedenza. Si tratta però di un piccolo scorcio di vita che ricordo con piacere, soprattutto perché mostra la dedizione e l'impegno di Alfonso nella ricerca, ed è per questo che oggi lo racconto. Poco dopo andai a lavorare al

J'ai rencontré Alfonso à Trieste dans les années 60, lorsque nous fréquentions tous les deux le Centre international de physique théorique (ICTP) de diverses manières. J'ai été immédiatement frappé par le grand enthousiasme d'Alfonso pour la recherche et par sa capacité, en tant que jeune théoricien, à parler à des expérimentateurs comme moi. Nous avons entamé un dialogue qui nous tenait à cœur, notamment sur la spectroscopie de photoémission de valence, pour laquelle il restait encore beaucoup à faire, sachant qu'il a fallu attendre au moins une décennie pour que cette technique s'impose. Dans ce contexte, au début des années 70, nous espérions travailler ensemble, ce qui – je l'anticipe immédiatement – ne s'est pas produit parce que nous nous étions probablement fixé des objectifs trop vastes. Et puis il y avait la difficulté de trouver du temps à consacrer à cette idée. Et c'est là qu'arriva le coup de théâtre d'Alfonso : « Rencontrons-nous la nuit, car je change souvent de train à la gare Centrale de Milan et j'ai des heures libres de 23 heures à 6 heures du matin. » Étant moi-même un noctambule, j'ai adhéré à l'initiative avec plaisir. Cependant, il y avait des difficultés logistiques : les salles d'attente de la gare étaient fermées pour des raisons de sécurité, les gens étaient contrôlés parce que c'était une période de terrorisme. Nous avons décidé de nous rendre dans mon bureau au Département de physique du Politecnico. L'attitude des gardes n'était pas non plus bienveillante et nous avons eu du mal à entrer sur le campus. Bref, nous avons perdu une partie de notre enthousiasme et nous nous sommes consolés avec le célèbre aphorisme de Richard Feynman : « La Physique est cette chose que l'on fait tard le soir... ». Ce fut une expérience troublée qui a duré quelques semaines, puis nous avons été submergés par des difficultés logistiques et des engagements antérieurs. Cependant,

sincrotrone di Stanford. Le nostre strade si erano separate ma eravamo in qualche modo *entangled*. Insomma, non posso dimenticare le emozioni di quei tempi e in particolare la vitalità e il talento di Alfonso.

c'est un petit aperçu de la vie dont je me souviens avec plaisir, surtout parce qu'il montre le dévouement et l'engagement d'Alfonso pour la recherche, et c'est pourquoi je le raconte aujourd'hui. Peu après, je suis allé travailler au synchrotron de Stanford. Nos chemins s'étaient séparés, mais nous étions en quelque sorte *entangled*. En bref, je ne peux pas oublier l'enthousiasme de cette époque et en particulier la vitalité et le talent d'Alfonso.

## A memory of Schrödinger's man Un souvenir de l'homme de Schrödinger

---

Mario Capizzi

---

Four years after graduating with a thesis on strontium titanate, a ferroelectric material that every twenty years or so turns back into fashion, I abandoned that field of research in 1972 to dedicate myself to the study of semiconductors. On this occasion I had the opportunity to get to know the brilliant work of Alfonso Baldereschi and Nunzio Lipari, sometimes in collaboration with Massimo Altarelli, on the energy levels of direct excitons in semiconductors with degenerate bands [1] and on the spherical model of shallow acceptors [2], the latter work having been later modified to take into account the cubic lattice contributions [3]. I then had enlightening exchanges on these topics and discussions in direct meetings with Alfonso, mostly in Trieste, one of Alfonso's two states: like Schrödinger's cat, Alfonso could be in Trieste or Lausanne, until a phone call or a visit located him in a specific location. I also like to remember here, among many, Alfonso's work on the "mean-value point in the Brillouin zone", determined by the crystalline structure, which allows one to calculate, with excellent approximation, the average value over

Quatre ans après avoir obtenu mon diplôme avec une thèse sur le titanate de strontium, un matériau ferroélectrique qui revient à la mode tous les 20 ans environ, j'ai abandonné en 1972 ce domaine de recherche pour me consacrer à l'étude des semi-conducteurs. À cette occasion, j'ai eu la chance de connaître les brillants travaux d'Alfonso Baldereschi et de Nunzio Lipari, parfois en collaboration avec Massimo Altarelli, sur les niveaux d'énergie des excitons directs dans les semi-conducteurs à bandes dégénérées [1] et sur le modèle sphérique des accepteurs faiblement liés [2], ce dernier travail ayant été modifié par la suite pour prendre en compte les contributions cubiques du réseau [3]. J'ai ensuite eu des échanges éclairants sur ces sujets et des discussions directes lors de réunions avec Alfonso, la plupart du temps à Trieste, l'un des deux états d'Alfonso : comme le chat de Schrödinger, Alfonso pouvait être à Trieste ou à Lausanne, jusqu'à ce qu'un appel téléphonique ou une visite le situe à un endroit précis. J'aimerais également rappeler ici, parmi beaucoup d'autres, les travaux d'Alfonso sur le point de la zone de Brillouin,

the Brillouin zone of a given periodic function of the wave vector [4], as well as his work on band offsets in lattice-matched heterojunctions [5].

In general, I always appreciated not only the clarity and depth of Alfonso as a scientist, but also, perhaps above all, his honesty, not only intellectual, and sympathy. Those qualities were well highlighted in several meetings of the Semiconductor Sector of the Gruppo Nazionale di Struttura della Materia (GNSM): to my memory, at least, in 1982, when I was coordinator of the Sector and in 1989, when I was a simple member. Similarly, I appreciated Alfonso's rigor and correctness in a couple of university contests in which we both acted as jury members. For these reasons, I always met Alfonso with great pleasure, and I still regret not having been able to meet him one last time on the occasion of the dedication of the Canneto Pavese library to the mourned Franco Bassani, just a few days before his passing.

déterminé par la structure cristalline, qui permet de calculer, avec une excellente approximation, la valeur moyenne sur la zone de Brillouin d'une fonction périodique donnée du vecteur d'onde [4], ainsi que ses travaux sur le décalage des bandes dans des hétérojonctions à maillage adapté [5].

En général, j'ai toujours apprécié non seulement la clarté et la profondeur d'Alfonso en tant que scientifique, mais aussi, et peut-être surtout, son honnêteté, pas seulement intellectuelle, et sa sympathie. Ces qualités ont été bien mises en évidence lors de plusieurs réunions du secteur des semi-conducteurs du Gruppo Nazionale di Struttura della Materia (GNSM) : à ma mémoire, au moins, en 1982, lorsque j'étais coordinateur du secteur et en 1989, lorsque j'étais simple membre. De même, j'ai apprécié la rigueur et la rectitude d'Alfonso lors de certains concours universitaires dans lesquels nous avons tous deux été commissaires. Pour ces raisons, j'ai toujours rencontré Alfonso avec grand plaisir et je regrette encore de ne pas avoir pu le rencontrer une dernière fois à l'occasion de la dédicace de la bibliothèque de Canneto Pavese au regretté Franco Bassani, quelques jours avant son décès.

- [1] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Energy levels of direct excitons in semiconductors with degenerate bands, *Phys. Rev. B* **3**, 439 (1971).
- [2] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- [3] A. Baldereschi, N. O. Lipari, Cubic contributions to the spherical model of shallow acceptor states, *Phys. Rev. B* **9**, 1525 (1974).

- [4] A. Baldereschi, Mean-value point in the Brillouin zone, *Phys. Rev. B* **7**, 5212 (1973).
- [5] A. Baldereschi, S. Baroni, R. Resta, Band offsets in lattice-matched heterojunctions: A model and first principles calculation for GaAs/AlAs, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 734 (1988).



# A courageous, lone warrior

## Un guerrier courageux et solitaire

---

Giovanni Bachelet

---

Many of those who, in the late 1970s, had been part of Bassani's research group (as students or postdocs at the University of Rome, or as visitors from Pisa, Trieste, Lausanne, Urbana...), gathered with many others in Canneto Pavese on April 13, 2024, to attend the ceremony by which the city library was named after him. Counting on his ability to appear just in time and soon disappear towards new destinations, all of us were almost sure that Alfonso Baldereschi, Bassani's first undergraduate from Pisa (and probably, as Erio Tosatti recently wrote, the brightest one) would sooner or later pop up. At the end of the day, we were quite surprised not to see him; and back home, on April 22, each of us was tragically shocked by the news of his sudden death.

I never directly collaborated with Alfonso, but between the late 1970s and early 1990s I had the privilege of a few memorable interactions.

During my thesis work on surface excitons in Rome under the supervision of Massimo Altarelli and Franco Bassani (1977-1979), before getting to know him personally, Alfonso, then ~30 years old, already stood out as a legend because of his key contributions to solid-state theory. The proceedings of the Edinburgh 1978 ICPS (International Conference on the Physics of Semiconductors) contained as many as seven Baldereschi contributions on shallow impurities, magnetic fields, degenerate bands, biexcitons, lattice vibrations, heterostructures, valley-orbit interactions, local fields in crystals, in collaboration with Altarelli, Andreoni, Bimberg, Car, Forney, Hsu, Maschke, Tosatti [1]. Moreover, in years of bohemian-hippie-casual fashion, his fame in our group stemmed from his understated elegance in dressing, too. Paola, Massimo's wife, once

Beaucoup de ceux qui, à la fin des années 1970, avaient fait partie du groupe de recherche de Bassani (soit en tant qu'étudiants ou postdoctorants à l'Université de Rome, soit en tant que visiteurs de Pise, Trieste, Lausanne, Urbana...), se sont rassemblés avec beaucoup d'autres à Canneto Pavese le 13 avril 2024, pour assister au baptême de la bibliothèque de la ville en son honneur. Comptant sur sa capacité à apparaître à temps et à disparaître rapidement vers de nouvelles destinations, nous étions tous presque sûrs qu'Alfonso Baldereschi, le premier étudiant pisan de Bassani (et probablement, comme l'a récemment écrit Erio Tosatti, le plus brillant) ferait son apparition tôt ou tard. À la fin de la journée, nous étions assez surpris de ne pas le voir ; et de retour à la maison, le 22 avril, chacun d'entre nous a été tragiquement choqué par la nouvelle de sa mort soudaine.

Je n'ai jamais collaboré directement avec Alfonso, mais entre la fin des années 70 et le début des années 90, j'ai eu le privilège d'avoir quelques interactions mémorables.

Pendant ma thèse sur les excitons de surface à Rome sous la direction de Massimo Altarelli et de Franco Bassani (1977-1979), avant de le connaître personnellement, Alfonso, alors âgé d'une trentaine d'années, était déjà une légende en raison de ses contributions essentielles à la théorie de l'état solide. Les actes de l'ICPS (Conférence internationale sur la physique des semi-conducteurs) d'Édimbourg de 1978 contenaient pas moins de sept contributions de Baldereschi sur les impuretés peu profondes, les champs magnétiques, les bandes dégénérées, les biexcitons, les vibrations du réseau, les hétérostructures, les interactions vallée-orbite, les champs locaux dans les cristaux, en collaboration

praised me for finally buying myself a “Baldereschi-style sweater.”

I met Alfonso in person for the first time as he visited Bassani’s group in 1979. I had just been hired by Michael Schlüter as a postdoc and was about to leave Rome for Bell Labs. In those very Labs, at the age of 26, Alfonso had published his milestone, single-author paper on the “mean-value point in the Brillouin zone” [2]. I was both excited and scared by my future job, but Alfonso washed out my fears. First, he shared his good memories of Summit, New Jersey, the town where I was about to move, by telling me that his son was born there, at the Overlook Hospital. Then he resolved with crystal-clear clarity some doubts I had on the connection between Hartree-Fock and pseudopotential theory (thereby also getting me to discover his peculiar discourse marker, “trac!”). Finally, he encouraged me to hold on and trust myself. True, Bill Brinkman, as director, was supposed to evaluate my research each fall, within the “Merit Review”; true, P. W. Anderson would sometimes join the Theory Department meeting, where tea was prepared and served by Gene Blount; at seminars, parties, or late “squalor dinners” at the vending machines of the sixth floor, colleagues slightly older than I like Federico Capasso, Cherry Murray, Horst Störmer or Bob Laughlin would pop out. Yes, there might be some truth in Massimo Altarelli’s humorous warning (“*When at Bell Labs, keep your back to the wall*”), but on Schlüter’s friendly guidance—Alfonso said—I could safely rely, and, besides, another former student of Bassani’s temporarily visiting Bell Labs, Wanda Andreoni, would certainly be of great support both in science and daily life. Both predictions turned out to be accurate.

Another vivid and happy memory is the most sumptuous physics conference I ever attended, beautifully organized in 1987 by Franco Meloni and the Cagliari group at the Forte Village resort in Pula. The program was excellent. Many prominent solid-state theorists came from both sides of the ocean and gave great talks. But in addition to the scientific content and to the natural wonders of Sardinia (sea, sun, beach, food and wine), participants would, for example, enjoy a string quartet playing live Mozart and Vivaldi at the breakfast table, or underwater

avec Altarelli, Andreoni, Bimberg, Car, Forney, Hsu, Maschke, Tosatti [1]. De plus, dans des années de mode bohème-hippie-décontractée, sa renommée au sein de notre groupe découlait également de son élégance discrète en matière d’habillement. Paola, la femme de Massimo, m’a félicité un jour de m’être enfin acheté un « pull style Baldereschi ».

J’ai rencontré Alfonso en personne pour la première fois lorsqu’il a visité le groupe de Bassani en 1979. Je venais d’être embauché par Michael Schlüter comme postdoctorant et j’étais sur le point de quitter Rome pour me rendre les Bell Labs. C’est dans ces mêmes laboratoires, à l’âge de 26 ans, qu’Alfonso avait publié son article phare, rédigé par un seul auteur, sur le « point de valeur moyenne dans la zone de Brillouin » [2]. J’étais à la fois excité et intimidé par mon futur poste, mais Alfonso a dissipé mes craintes. D’abord, il a partagé ses bons souvenirs de Summit, New Jersey, la ville où j’allais m’installer, en me disant que son fils y était né, à l’hôpital Overlook. Ensuite, il a résolu avec une clarté cristalline certains doutes que j’avais sur la connexion entre la théorie de Hartree-Fock et la théorie des pseudopotentiels (me faisant ainsi découvrir son marqueur discursif particulier, « trac ! »). Enfin, il m’a encouragé à tenir bon et à avoir confiance en moi. Certes, Bill Brinkman, en tant que directeur, était censé évaluer mes recherches chaque automne, dans le cadre de l’« évaluation des mérites » ; certes, l’après-midi, P. W. Anderson se joignait parfois à la réunion du Département de théorie, où le thé était préparé et servi par Gene Blount ; lors des séminaires, des fêtes ou des « dîners de misère » tardifs aux distributeurs automatiques du sixième étage, des collègues légèrement plus âgés que moi, comme Federico Capasso, Cherry Murray, Horst Störmer ou Bob Laughlin, auraient pu apparaître. Oui, l’avertissement humoristique de Massimo Altarelli (« *Quand tu es aux Bell Labs, reste dos au mur* ») était peut-être vrai, mais je pouvais compter sur les conseils amicaux de Schlüter – disait Alfonso – et, en outre, une autre ancienne élève de Bassani en visite temporaire aux Bell Labs, Wanda Andreoni, me serait certainement d’un grand soutien, tant dans le domaine scientifique que dans la vie quotidienne. Les deux prédictions se sont avérées exactes.

Un autre souvenir vif et heureux est celui de la conférence de physique la plus somptueuse à laquelle j’aie

music in one of the available swimming pools. The conference was concluded by a merry party in honor of Alfonso's birthday, at which, at the age of 40, he was assigned the Sardinian name "su Alfonsu Balderiscu," and celebrated as undisputed leader in our field and a bright guide not only for his students, but also for colleagues of any age scattered around the world.

A few years later, in 1990, I was very honored by Alfonso's invitation to give a talk at the workshop he had organized on electronic correlations in condensed matter in Ascona, Switzerland, and by his encouragement to some of his brightest students, in particular Alessandro De Vita, to attend the spring meeting on condensed matter theory of Fai della Paganella, Trento, Italy, which together with Gianni Jacucci and Mario Tosi I used to coordinate, or the workshop of the Centre européen de calcul atomique et moléculaire (CECAM) on Quantum Monte Carlo for atoms, molecules, and condensed-matter systems which, in the same year, I had organized in Paris. After that summer, Alfonso called and asked me: *"How did you like Alessandro? If you did like him, please write a reference letter to Mike Gillan."* Which I did. And I still can't believe that Alessandro left us even sooner than Alfonso.

The last memory I would like to mention dates back to my Bell Labs years and concerns an extraordinary Italian scandal that erupted in Italy in the early 1980s, leading to a major political crisis. A secret Masonic lodge, Propaganda Due (P2), was uncovered, and found to have influential members in politics, the military, and the media, covertly fostering anti-democratic activities, corruption, and crime. I was shocked by this news, and, as an Italian far from home, felt deeply ashamed. We met at the APS March Meeting (whether Phoenix 1981 or Dallas 1982 I can't remember), and I asked Alfonso: *"How could this possibly happen? Should we all run away from Italy?"* He replied in his low, baritone voice *"A dreadful mess. But beware, Giovanni: both in Italy and abroad, those who have the courage of fighting alone are not too numerous."* I have repeatedly gone back to such a terse response, both as a physicist and, later, as a member of the Italian Parliament. After Alfonso's premature passing, I would like to commemorate

jamais assisté, magnifiquement organisée en 1987 par Franco Meloni et le groupe de Cagliari au Forte Village Resort à Pula. Le programme était excellent. De nombreux théoriciens de l'état solide sont venus des deux côtés de l'océan et ont donné d'excellentes conférences. Mais en plus du contenu scientifique et des merveilles naturelles de la Sardaigne (mer, soleil, plage, nourriture et vin), les participants ont pu, par exemple, apprécier un quatuor à cordes jouant Mozart et Vivaldi à la table du petit-déjeuner, ou de la musique sous-marine dans l'une des piscines disponibles. La conférence s'est terminée par une joyeuse fête en l'honneur de l'anniversaire d'Alfonso qui, à l'âge de 40 ans, s'est vu attribuer le nom sarde «su Alfonsu Balderiscu», et a été célébré comme un leader incontesté dans notre domaine et un guide brillant, non seulement pour ses étudiants, mais aussi pour ses collègues de tous âges dispersés dans le monde entier.

Quelques années plus tard, en 1990, j'ai été très honoré par l'invitation d'Alfonso à donner une conférence dans le cadre du workshop qu'il avait organisé sur les corrélations électroniques dans la matière condensée à Ascona, en Suisse, et par ses encouragements à certains de ses étudiants les plus brillants, en particulier Alessandro De Vita, à participer à la réunion de printemps sur la théorie de la matière condensée de Fai della Paganella, dans la province de Trente, en Italie, que je coordonnais avec Gianni Jacucci et Mario Tosi, ou au workshop du Centre européen de calcul atomique et moléculaire (CECAM) sur la méthode Monte Carlo quantique pour les atomes, les molécules et les systèmes de matière condensée que j'avais organisé à Paris la même année. Après cet été, Alfonso m'a appelé et m'a demandé: *«Qu'as-tu pensé d'Alessandro? Si tu l'as bien apprécié, pourrais-tu écrire une lettre de recommandation à Mike Gillan, s'il te plaît?»*. Ce que j'ai fait. Et je n'arrive toujours pas à croire qu'Alessandro nous a quittés même plus tôt qu'Alfonso.

Le dernier souvenir que je voudrais évoquer remonte à mes années aux Bell Labs et concerne un extraordinaire scandale italien, qui a éclaté en Italie au début des années 1980, entraînant une crise politique majeure. Une loge maçonnique secrète, Propaganda Due (P2), a été découverte, et il s'est avéré qu'elle comptait des membres influents dans la politique, l'armée et les médias, encourageant secrètement

his brilliant mind, but also his big heart: the heart of an austere, fatherly teacher, of a courageous, lone warrior.

- [1] A. Baldereschi *et al.*, Proceedings of the 14<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Semiconductors, Edinburgh (B. L. H. Wilson, Ed.); *Inst. Phys. Conf. Ser.* **43** (Inst. Phys. London), pp. 399, 403, 635, 673, 733, 1167, and 1207 (1979).
- [2] A. Baldereschi, Mean-value point in the Brillouin zone, *Phys. Rev. B* **7**, 5212 (1973).

les activités antidémocratiques, la corruption et la criminalité. J'ai été choqué par cette nouvelle et, en tant qu'Italien loin de chez moi, j'ai eu profondément honte. Nous nous sommes rencontrés lors de la réunion de mars de la Société américaine de physique (à Phoenix en 1981 ou à Dallas en 1982, je ne me souviens plus), et j'ai demandé à Alfonso : « *Comment cela a-t-il pu se produire ? Devrions-nous tous fuir l'Italie ?* ». Il m'a répondu de sa voix grave de baryton : « *Un désordre épouvantable. Mais attention, Giovanni : en Italie comme à l'étranger, ceux qui ont le courage de se battre seuls ne sont pas trop nombreux* ». Cette réponse laconique m'est revenue à plusieurs reprises, à la fois en tant que physicien et, plus tard, en tant que membre du Parlement italien. Après la disparition prématurée d'Alfonso, je voudrais commémorer son esprit brillant, mais aussi son grand cœur : le cœur d'un professeur austère et paternel, celui d'un guerrier courageux et solitaire.



Alfonso Baldereschi, Wanda Andreoni et Giovanni Bachelet (de gauche à droite) à un dîner lors de la 7<sup>th</sup> General Conference of the Condensed Matter Division de la European Physical Society, 7-10 avril 1987, Pise.

# Il biossido di titanio è trasparente, ma è anche IL bianco!

## Le dioxyde de titane est transparent, mais il est aussi LE blanc!

---

**Valter Sergio**

---

Pur non avendo mai voluto il gioco del “Piccolo Chimico”, avevo deciso che all’università mi sarei iscritto a Chimica quando ero in seconda media, a dodici anni. Ebbi un momento di dubbio in quarta liceo, prendendo in considerazione gli studi in Fisica, ma al termine dell’esame di maturità, al momento decisivo, optai per Chimica e mi iscrissi al relativo corso di laurea, a Trieste, nel 1979.

Piuttosto contraddittoriamente per essere uno studente di Chimica, compresi ben presto che non mi piacevano le attività di laboratorio e cominciai a spostarmi verso la chimica teorica. Dato che si trattava, di fatto, di meccanica quantistica, e non trovando a Chimica abbastanza corsi complementari in materia, andai a vedere che cosa offrivano i corsi di fisica. Senza valutare molto attentamente che, come esami complementari di chimica, sarei andato a seguire corsi fondamentali molto difficili anche per gli stessi studenti di Fisica, misi nel piano studi il corso di Istituzioni di Fisica Teorica, tenuto dal Professor Giancarlo Ghirardi e quello di Struttura della Materia.

In realtà esistevano due corsi di Struttura della Materia: uno tenuto da un docente poi trasferitosi alla Normale di Pisa e l’altro offerto dal Professor Baldereschi. Gli studenti di Fisica non potevano scegliere perché dovevano seguire il corso previsto dal loro indirizzo di studi, ma io ero un fuori casta e potevo decidere di seguire il corso che più mi andava. Andai a un paio di lezioni del corso dell’indirizzo delle Alte Energie e poi a una lezione di Alfonso Baldereschi: decisi di seguire il suo corso dopo cinque minuti!

Bien que je n’aie jamais voulu jouer au « Petit Chimiste », j’avais décidé de m’inscrire en chimie à l’université lorsque j’étais en septième année, à l’âge de 12 ans. J’ai eu un moment de doute en quatrième année de lycée, envisageant d’étudier la physique, mais à la fin du baccalauréat, au moment décisif, j’ai opté pour la chimie et me suis inscrit dans le cursus correspondant, à Trieste, en 1979.

De manière assez contradictoire pour un étudiant en chimie, je me suis vite rendu compte que je n’aimais pas les activités de laboratoire et j’ai commencé à m’orienter vers la chimie théorique. Comme il s’agissait en fait de mécanique quantique, et ne trouvant pas assez de cours complémentaires sur le sujet en chimie, je suis allé voir ce que proposaient les cours de physique. Sans me rendre compte que, en parallèle des examens de chimie, je suivrais des cours fondamentaux qui seraient très difficiles même pour les étudiants en physique, j’ai mis au programme le cours Institutions de la physique théorique, enseigné par le Professeur Giancarlo Ghirardi, et celui de Structure de la matière.

Il y avait en fait deux cours de Structure de la matière, l’un dispensé par un professeur qui a ensuite déménagé à la Ecole normale de Pise et l’autre dispensé par le Professeur Baldereschi. Les étudiants en physique ne pouvaient pas choisir parce qu’ils devaient suivre le cours indiqué sur leur plan d’études, mais j’étais hors casta et je pouvais décider de suivre le cours qui me convenait le mieux. J’ai assisté à quelques cours du plan d’études des Hautes énergies, puis à une leçon d’Alfonso Baldereschi : j’ai décidé de suivre son cours au bout de cinq minutes !



Era chiarissimo, efficace e coinvolgente; lo fu allora e per tutto il corso; dire che noi discenti eravamo estasiati può essere considerato eccessivamente apologetico, ma risponde a realtà che non volava mai una mosca in classe, ed eravamo rapiti al punto che la fine delle sue lezioni ci sorprendevo spessissimo con un "già finita?".

Noi studenti commentavamo, veramente ammirati, sostanza e forma delle lezioni di Alfonso; di tre di questi colleghi studenti, poi diventati a loro volta ordinari di Fisica – Giovanni Comelli, Alberto Morgante e Maria Peressi –, sono amico da allora, e Maria è stata collaboratrice di Baldereschi fino alla fine. Tra laurea, master e dottorato, ho seguito lezioni di almeno cinquanta docenti, alcuni di questi veramente eccellenti, ma nella mia personalissima classifica, Alfonso è stato il migliore (a pari merito con il Professor D. W. Readey, mio relatore di Master alla Ohio State University).

Andai a sostenere l'esame del corso al Centro internazionale di fisica teorica (ICTP), a Miramare, e c'era in commissione anche un giovanissimo Stefano Baroni, allora ai suoi primissimi esami dall'altra parte, cioè come docente. L'esame andò bene (almeno per me!), 27/30; al momento di scrivere il voto sul libretto Alfonso si accorse che ero studente di Chimica, non di Fisica, e quindi si fermò a discutere con ancora maggior passione con un "ircocervo" come me, eterodosso rispetto all'ambiente dei fisici. Ci mettemmo a parlare di metodi computazionali in chimica quantistica ("ci mettemmo a parlare" è chiaramente esagerazione retorica, dato il mio contributo alla discussione, se paragonato al suo!), e questo stabilì un legame che in realtà durò molto a lungo ed ebbe conseguenze importanti nella vita di varie persone, come si vedrà più avanti.

Per quanto riguardava i miei studi, mi laureai con una tesi su conti di *configuration interaction* (si chiamava così allora), cioè sui calcoli delle correzioni sui risultati Hartree-Fock per avvicinarsi ai dati sperimentali delle energie di fotoionizzazione (il tutto applicato alla importantissima molecola biatomica di litio...!). In sé la tesi era assolutamente normale, ma la parte di introduzione al metodo, principalmente frutto del corso di Alfonso Baldereschi (e in parte, per onestà,

Il était très clair, efficace et captivant ; il l'a été à ce moment-là et pendant toute la durée du cours ; dire que nous, les étudiants, étions en extase peut être considéré comme trop apologétique, mais cela correspond à la réalité : pas une mouche ne volait la salle de classe, et nous étions enchantés au point que la fin de ses cours nous surprenait souvent par un « c'est déjà fini ? ».

Nous, les étudiants, avons l'habitude de commenter ensemble, avec une réelle admiration, le fond et la forme des conférences d'Alfonso ; depuis lors, je suis resté ami avec trois de ces camarades étudiants, devenus par la suite professeurs ordinaires de physique – Giovanni Comelli, Alberto Morgante et Maria Peressi –, et Maria a été la collaboratrice de Baldereschi jusqu'à la fin. Entre la licence, la maîtrise et le doctorat, j'ai assisté aux cours d'au moins 50 enseignants, dont certains étaient vraiment excellents, mais dans mon classement très personnel, Alfonso était le meilleur (*ex æquo* avec le Professeur D. W. Readey, mon superviseur de master à l'Université d'État de l'Ohio).

Je suis allé passer l'examen pour le cours au Centre international de physique théorique (ICTP) de Miramare, et il y avait aussi un très jeune Stefano Baroni dans le comité, à l'époque dans ses tout premiers examens de l'autre côté, c'est-à-dire en tant qu'enseignant. L'examen s'est bien passé (du moins pour moi !), 27/30 ; au moment d'écrire la note sur le livret, Alfonso s'est rendu compte que j'étais un étudiant en chimie, et non en physique, et il s'est donc arrêté pour discuter avec encore plus de passion avec un « hircocerf » comme moi, étant hétérodoxe par rapport à l'environnement des physiciens. Nous avons commencé à parler de méthodes informatiques en chimie quantique (« nous avons commencé à parler » est clairement une exagération rhétorique, étant donné ma contribution à la discussion, comparée à la sienne !), et cela a établi un lien qui a duré très longtemps et a eu des conséquences importantes dans la vie de plusieurs personnes, comme nous le verrons plus tard.

En ce qui concerne mes études, j'ai obtenu mon diplôme avec une thèse sur des calculs de *configuration interaction* (c'est ainsi qu'on l'appelait à l'époque), c'est-à-dire sur les calculs des corrections

di quello di Chimica-Fisica 2 del Professor Giancarlo De Alti), fu ritenuta talmente buona dai docenti di chimica teorica che ancora parecchi anni dopo la laurea, la mia tesi veniva passata, come avvicinamento alla materia, ai potenziali tesisti e dottorandi di chimica teorica.

Come doloroso contrappasso Dantesco al mio amore per la chimica teorica, alcuni anni dopo finii in un Istituto di Chimica Applicata, alla Facoltà di Ingegneria dell'Università di Trieste: a Chimica non avevano nulla da offrirmi per restare all'università, mentre un docente di chimica applicata mi offrì un posto di dottorato nel settore della scienza e tecnologia dei materiali ceramici. Come dire, che io precipitai dalle vette  $\hat{H}\psi = E\psi$  alle tazzine da caffè... In realtà sia Alfonso Baldereschi che il mio relatore di tesi, il già citato Professor Giancarlo De Alti, qualche volta mi avevano detto che se quello che mi piaceva era la ricerca, la materia specifica contava poco: avevano ragione e io sono diventato spettroscopista di materiali.

Ricordo che una volta andai da Baldereschi a chiedergli un parere sugli spettri Raman e le deviazioni stechiometriche nel biossido di titanio,  $\text{TiO}_2$ . Mi fece delle perfette considerazioni energetiche sul perché il  $\text{TiO}_2$  è assolutamente trasparente anche per rilevanti deviazioni dal rapporto 1:2 tra titanio e ossigeno, e rimase alquanto sorpreso quando, quasi incidentalmente, gli dissi che è biossido di titanio tutto il bianco attorno a noi: dalle strisce pedonali alla carta delle fotocopiatrici, in pratica, il biossido di titanio è IL bianco! (Per i curiosi, come subito ben motivato da Baldereschi nella discussione, il biossido di titanio è otticamente trasparente come grosso cristallo singolo, ma appare bianco per lo scattering della luce a tutte le interfacce dei singoli piccoli grani, delle dimensioni attorno al micrometro, presenti nelle vernici e sulla carta.)

Il legame con Alfonso Baldereschi, certamente non strettissimo, ma comunque presente e solido, tornò a incidere positivamente, sulla mia vita professionale e su quella dell'ateneo di Trieste, pochi anni dopo il mio ingresso all'Università di Trieste come ricercatore, nel 1990. Alla Facoltà di Ingegneria si era deciso di avviare un corso di laurea in Ingegneria dei Materiali ed era nostra idea che le due anime

des résultats de Hartree-Fock pour approcher les données expérimentales des énergies de photoionisation (le tout appliqué à la très importante molécule diatomique de lithium... !). En soi, la thèse était tout à fait normale, mais la partie introduisant la méthode, qui était principalement le résultat du cours d'Alfonso Baldereschi (et en partie, par souci d'honnêteté, du cours Chimie-Physique 2 du Professeur Giancarlo De Alti), a été jugée si bonne par les professeurs de chimie théorique que, même plusieurs années après l'obtention de mon diplôme, ma thèse a été transmise à des étudiants potentiels en thèse de master et de doctorat de chimie théorique comme introduction au sujet.

Comme un douloureux contrepois dantesque à mon amour pour la chimie théorique, je me suis retrouvé quelques années plus tard dans un Institut de chimie appliquée, à la Faculté d'ingénierie de l'Université de Trieste: en chimie, ils n'avaient rien à m'offrir pour rester à l'université, tandis qu'un enseignant en chimie appliquée m'offrait un poste de doctorant dans le domaine de la science et de la technologie des matériaux céramiques. J'ai dégringolé des sommets de  $\hat{H}\psi = E\psi$  aux tasses de café.... En fait, Alfonso Baldereschi et mon directeur de thèse, le Professeur Giancarlo De Alti, déjà cité, m'avaient parfois dit que si ce que j'aimais, c'était la recherche, le sujet spécifique importait peu: ils avaient raison et je suis devenu spectroscopiste des matériaux.

Je me souviens d'être allé une fois voir Baldereschi pour lui demander son avis sur les spectres Raman et les écarts stœchiométriques dans le dioxyde de titane,  $\text{TiO}_2$ . Il a parfaitement expliqué pourquoi le  $\text{TiO}_2$  est absolument transparent même pour des écarts importants par rapport au rapport 1:2 entre le titane et l'oxygène, et il a été quelque peu surpris lorsque, presque par hasard, je lui ai dit que tout le blanc qui nous entoure est du dioxyde de titane: du passage piéton au papier des photocopieuses, dans la pratique, le dioxyde de titane est LE blanc par excellence! (Pour les curieux, comme Baldereschi l'a immédiatement expliqué dans la discussion, le dioxyde de titane est optiquement transparent en tant que grand monocristal, mais apparaît blanc en raison de la diffusion de la lumière à toutes les interfaces des petits grains individuels, d'une taille de l'ordre du micromètre, que l'on trouve dans les peintures et sur le papier.)

della nuova laurea avrebbero dovuto essere il corso di Scienza delle Costruzioni (per i materiali strutturali, quelli che sopportano un carico) e quello di Struttura della Materia (per i materiali funzionali, quelli che conducono elettricità, luce etc.). Contattai Alfonso Baldereschi e gli chiesi se fosse in grado di segnalarmi qualche laureato in Struttura della Materia, fisico, a cui proporre un dottorato in Scienza e Tecnologia dei Materiali e a cui poi offrire un posto come ricercatore della Facoltà di Ingegneria. Testualmente, Alfonso mi disse che aveva un potenziale candidato che era "dinamite", quanto a brillantezza, e mi passò il contatto di Alessandro De Vita. Alessandro entrò così nel nostro gruppo di ricerca (e nella nostra vita, come stretto amico troppo presto pianto), diventando a tutti gli effetti il primo e miglior esperto italiano di scienza dei materiali computazionale. Alessandro si unì a noi alla condizione che lo lasciassimo anche lavorare part-time a Losanna, dove continuava a collaborare con Alfonso Baldereschi, e così fece per molti anni.

Mi è sempre piaciuto considerare il *mentoring* accademico come un vero e proprio albero genealogico scientifico; in questo senso, il corso di laurea in Ingegneria dei Materiali all'Università di Trieste è stato un successo perché parecchi "figli" di Alessandro De Vita e miei, quindi "nipoti" di Alfonso Baldereschi, hanno poi avuto brillantissime carriere scientifiche: tra questi, Lucio Colombi Ciacchi, medaglia Emmy Noether e ordinario di Scienza dei Materiali a Brema, e Stefano Fabris, direttore del Dipartimento di Scienze Fisiche e Tecnologie della Materia del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR).

Dopo tantissimi anni, qualche mese fa, ho rivisto Alfonso a una cena con qualche collega del Centro internazionale di fisica teorica (ICTP): vivido, spiritoso, brillante oratore, ci aveva fatto ripercorrere con leggerezza e acume, arricchendoli di divertente aneddotica, alcuni decenni di progressi nel settore dei metodi computazionali.

Grazie di cuore, Professor Baldereschi, con il sincero augurio che ora Lei si stia occupando di Hamiltoniane, cioè di energie, celesti!

Le lien avec Alfonso Baldereschi, certes pas très étroit, mais néanmoins présent et solide, est revenu influencer positivement ma vie professionnelle et celle de l'Université de Trieste quelques années après mon entrée à l'université en tant que chercheur, en 1990. À la Faculté d'ingénierie, il avait été décidé de lancer un cursus en Ingénierie des matériaux et notre idée était que les deux noyaux du nouveau diplôme devaient être le cours Science de la construction (pour les matériaux structurels, ceux qui supportent une charge) et le cours Structure de la matière (pour les matériaux fonctionnels, ceux qui conduisent l'électricité, la lumière, etc.) J'ai contacté Alfonso Baldereschi et lui ai demandé s'il pouvait me recommander un diplômé en Structure de la matière, un physicien, à qui je pourrais proposer un doctorat en Science et technologie des matériaux et à qui je pourrais ensuite offrir un poste de chercheur à la Faculté d'ingénierie. Textuellement, Alfonso m'a dit qu'il avait un candidat potentiel qui était « dynamite » en termes de brillance et m'a transmis le contact d'Alessandro De Vita. Alessandro est donc entré dans notre groupe de recherche (et dans notre vie, un ami proche que nous avons dû pleurer trop tôt), devenant à toutes fins utiles le premier et le meilleur expert italien en science computationnelle des matériaux. Alessandro nous a rejoints à la condition que nous le laissions travailler à temps partiel à Lausanne, où il a continué à collaborer avec Alfonso Baldereschi, ce qu'il a fait pendant de nombreuses années.

J'ai toujours aimé considérer le mentorat académique comme un véritable arbre généalogique scientifique ; en ce sens, le cours d'Ingénierie des matériaux à l'Université de Trieste a été un succès, car plusieurs « enfants » d'Alessandro De Vita et de moi-même, donc « petits-enfants » d'Alfonso Baldereschi, ont poursuivi une brillante carrière scientifique : parmi eux, Lucio Colombi Ciacchi, médaillé Emmy Nöther et professeur de Science des matériaux à Brême, et Stefano Fabris, directeur du Département des sciences physiques et de la technologie de la matière au Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR).

Après de nombreuses années, j'ai revu Alfonso il y a quelques mois lors d'un dîner avec quelques collègues du Centre international de physique théorique (ICTP) : orateur vif, spirituel et brillant, il nous a fait

parcourir plusieurs décennies de progrès dans le domaine des méthodes de calcul avec légèreté et perspicacité, en les enrichissant d'anecdotes amusantes.

Un grand merci, Professeur Baldereschi, avec le souhait sincère que vous vous occupiez maintenant d'hamiltoniennes, c'est-à-dire d'énergies, célestes !

## Un vero maestro, un amico prezioso Un vrai maître, un ami précieux

---

Giovanni Comelli

---

Ho conosciuto Alfonso nei primi anni '80, quando, iniziati gli studi in Fisica a Trieste, lo incontravo ogni tanto aggirandomi per i corridoi del dipartimento. Fra noi studenti lo chiamavamo "La Pantera Rosa", per quella che a noi sembrava un'evidente somiglianza con la protagonista del noto cartone animato e per quel suo incedere silenzioso e "felpato", in cui muoveva alternativamente le lunghe braccia tenendole lungo il corpo (per lo più non quello intento a reggere l'eterna sigaretta). Ricordo che tra gli studenti si diceva fosse uno molto bravo, una specie di genio, ma in quei primi anni non ho mai osato parlare con lui. Al terzo anno invece ho avuto la fortuna di frequentare, assieme ad alcuni compagni di studio, il suo corso di Struttura della Materia. Quelle lezioni rimangono nella mia memoria come una delle esperienze più belle ed emozionanti di tutta la mia carriera di fisico. Alfonso aveva una visione a un tempo semplice e profondissima della materia che insegnava e la sapeva comunicare in modo straordinariamente efficace, suscitando e mantenendo con maestria l'interesse e l'attenzione di noi studenti. Durante quelle ore non

J'ai rencontré Alfonso pour la première fois au début des années 1980, lorsque, ayant commencé à étudier la physique à Trieste, je le rencontrais de temps à autre dans les couloirs du département. Parmi les étudiants, nous avons l'habitude de l'appeler « la Panthère rose », pour ce qui nous semblait être une ressemblance évidente avec le protagoniste du célèbre dessin animé et pour sa démarche silencieuse et « feutrée », dans laquelle il déplaçait alternativement ses longs bras en les tenant le long de son corps (du moins celui qui ne tenait pas l'éternelle cigarette). Je me souviens que l'on disait parmi les étudiants qu'il était très brillant, une sorte de génie, mais dans ces premières années, je n'ai jamais osé lui parler. Au cours de ma troisième année, cependant, j'ai eu la chance d'assister à son cours de Structure de la matière avec quelques camarades de classe. Ces leçons restent dans ma mémoire comme l'une des expériences les plus belles et les plus passionnantes de toute ma carrière de physicien. Alfonso avait une vision à la fois simple et profonde de la matière qu'il enseignait et il savait la communiquer d'une manière

si sentiva volare una mosca, rimanevamo tutti affascinati e grati per quella che capivamo essere un'occasione privilegiata di imparare da un vero maestro a guardare con l'occhio del fisico fino al fondo delle cose, cercando e cogliendo concetti, collegamenti, spunti di approfondimento. Dopo l'esame io ho proseguito il mio percorso scegliendo di svolgere una tesi sperimentale, e ci siamo per un po' persi di vista. Tuttavia, ricordo che dopo la laurea, in procinto di partire per un periodo come *post-doc* negli Stati Uniti, ero andato a cercarlo per chiedergli consiglio, e lui mi aveva dato delle indicazioni che poi si sono rivelate preziose per il prosieguo della mia carriera. Ci siamo incontrati di nuovo qualche anno più tardi, dopo il mio rientro dall'estero, quando ho preso servizio come ricercatore presso il Dipartimento di Fisica. Lo vedevo tipicamente nei corridoi, tra una lezione e l'altra, mentre passeggiava fumando, immerso nei suoi pensieri. Ci fermavamo spesso a scambiare due parole, su varie questioni, e su ogni cosa aveva un'opinione originale e interessante. Soprattutto, mi ha sempre colpito l'interesse con cui ascoltava e valutava seriamente le osservazioni altrui, prendendosi il tempo necessario per meditare e formulare il suo punto di vista, che non era mai banale. Questo era uno degli aspetti più caratteristici di Alfonso: il suo interlocutore aveva sempre tutta la sua attenzione, era come se il tempo si fermasse e lui rimanesse concentrato esclusivamente su quello che gli veniva detto in quel momento. Non aveva mai fretta, voleva sempre approfondire, e questo rendeva speciale ogni incontro. Confesso di aver sempre ammirato questa sua disponibilità e serenità assolute nel dare la priorità al "qui e ora" rispetto a qualunque altro impegno o agenda, anche se questa caratteristica aveva dei risvolti negativi, in particolare per i malcapitati che a volte lo attendevano inutilmente altrove, anche per ore.

Dal 2007 in avanti abbiamo anche avuto modo di collaborare scientificamente: Maria Peressi (mia compagna di corso e oggi collega al Dipartimento di Fisica, che ha seguito la strada della fisica computazionale lavorando proprio con Alfonso) lo aveva infatti coinvolto in alcuni progetti comuni, in cui loro effettuavano simulazioni basate su calcoli *ab initio* per interpretare i risultati sperimentali da noi acquisiti su sistemi di superficie, arrivando a pubblicare diversi

extraordinariamente efficace, en suscitant et en maintenant magistralement l'intérêt et l'attention des étudiants. Pendant ces heures, pas une mouche ne volait, nous étions tous fascinés et reconnaissants de ce que nous réalisions être une occasion privilégiée d'apprendre d'un véritable maître comment regarder avec l'œil d'un physicien au fond des choses, en cherchant et en saisissant des concepts, des connexions et des idées. Cependant, je me souviens qu'après l'obtention de mon diplôme, alors que j'étais sur le point de partir pour une période de postdoctorat aux États-Unis, je suis allé le trouver pour lui demander conseil, et il m'avait donné quelques indications qui se sont avérées précieuses pour la suite de ma carrière. Nous nous sommes revus quelques années plus tard, après mon retour de l'étranger, lorsque j'ai pris mes fonctions de chercheur au Département de physique. Je le voyais généralement dans les couloirs, entre les cours, se promenant en fumant, plongé dans ses pensées. Nous nous arrêtons souvent pour discuter, sur des sujets divers, et il avait un avis original et intéressant sur toute chose. Surtout, j'ai toujours été frappé par l'intérêt avec lequel il écoutait et considérait sérieusement les observations des autres, prenant le temps de réfléchir et de formuler son point de vue, qui n'était jamais banal. C'est l'un des aspects les plus caractéristiques d'Alfonso : son interlocuteur avait toujours toute son attention, c'était comme si le temps s'arrêtait et qu'il restait concentré exclusivement sur ce qui se disait à ce moment-là. Il n'était jamais pressé, il voulait toujours aller plus loin, ce qui rendait chaque rencontre spéciale. J'avoue que j'ai toujours admiré sa volonté absolue et sa sérénité à donner la priorité au « ici et maintenant » sur tout autre engagement ou agenda, même si cette caractéristique avait ses inconvénients, notamment pour les malheureux qui l'attendaient parfois inutilement ailleurs, même pendant des heures.

À partir de 2007, nous avons également eu l'occasion de collaborer sur le plan scientifique : Maria Peressi (ma camarade de classe, aujourd'hui collègue au Département de physique, qui a suivi la voie de la physique computationnelle en travaillant avec Alfonso) l'avait en effet impliqué dans quelques projets conjoints, dans lesquels ils effectuaient des simulations basées sur des calculs *ab initio* pour interpréter les résultats expérimentaux que nous



lavori assieme. Di questa fase ricordo le discussioni scientifiche, in cui nuovamente lui dimostrava questa tendenza a “scavare” per arrivare al cuore del problema che aveva davanti. Non si accontentava mai di una spiegazione zoppicante, se vedeva una qualunque anche piccola inconsistenza nel percorso interpretativo, la sottolineava impietosamente fino a che non si trovava una via di uscita.

Ricordo infine gli ultimi anni: gli incontri nei corridoi del dipartimento si sono un po’ rarefatti perché da un lato lui, ormai in quiescenza, aveva diminuito la sua attività didattica, dall’altro io, essendo diventato Direttore, mi trovavo spesso impegnato in riunioni istituzionali. Ma nelle occasioni in cui ci si incontrava il suo consiglio e la sua saggezza risultavano per me illuminanti, mi sembrava diventato ancor più capace di cogliere il nocciolo delle questioni che gli rappresentavo e di rivelarmelo con parole semplici, fornendo osservazioni, spunti, suggerimenti.

Nella mia memoria Alfonso resterà semplicemente come il miglior docente che io abbia mai incontrato, e una delle persone più sagge e profonde con cui abbia avuto a che fare nella mia vita. Considero un dono immeritato essere stato prima suo studente e poi suo collega/amico. Pensando alla mia personale esperienza come docente e ai frutti che lascerà, sarei davvero felice se qualcuno dei miei studenti potesse trovare in quello che ho cercato di insegnargli almeno qualche debole traccia dei segni indelebili che lui ha lasciato in me e in centinaia di altri suoi allievi.

avons obtenus sur des systèmes de surface, et nous avons fini par publier plusieurs articles ensemble. De cette phase, je me souviens des discussions scientifiques, au cours desquelles il a de nouveau démontré cette tendance à « creuser » pour aller au cœur du problème qui se présentait à lui. Il ne se contentait jamais d’une explication boiteuse, s’il voyait la moindre incohérence dans la voie interprétative, il la soulignait impitoyablement jusqu’à ce qu’une issue soit trouvée.

Enfin, je me souviens des dernières années : les rencontres dans les couloirs du département se sont quelque peu raréfiées car d’une part, lui, désormais retraité, avait réduit ses activités d’enseignement, et d’autre part, moi, devenu directeur, j’étais souvent engagé dans des réunions institutionnelles. Mais les fois où nous nous sommes rencontrés, ses conseils et sa sagesse m’étaient éclairants ; il semblait être devenu encore plus capable de saisir le cœur des questions que je lui présentais et de me le révéler avec des mots simples, en me faisant part de ses observations, de ses idées et de ses suggestions.

Dans ma mémoire, Alfonso restera simplement le meilleur enseignant que j’aie jamais rencontré, et l’une des personnes les plus sages et les plus profondes que j’aie côtoyées dans ma vie. Je considère comme un cadeau immérité le fait d’avoir été d’abord son élève, puis son collègue et ami. En pensant à ma propre expérience d’enseignant et aux fruits qu’il laissera derrière lui, je serais très heureux si l’un de mes étudiants pouvait trouver dans ce que j’ai essayé de lui enseigner au moins quelques traces légères des marques indélébiles qu’il a laissées en moi et dans des centaines d’autres étudiants.

# It all began with the Baldereschi point

## Tout a commencé avec le point de Baldereschi

Fulvio Parmigiani

My first meeting with Alfonso was *virtual*. It was 1983, and I was in Palo Alto, CA, since the Director of the Physics Division of the IBM Research Center, located at that time in Cattle Road, San Jose, CA, had invited me for a job interview. In those years, I published experiments on the anomalous optical properties of metal clusters induced by quantum confinement effects, which attracted some curiosity. The matter also interested Theodore Geballe at Stanford University, who, in turn, invited me to give a seminar at the Department of Applied Physics. Young people sometimes are also oblivious of the risks of playing in the lions' cage. The seminar was crowded and attended, among others, by Sebastian Doniach and Walter Harrison, asking several questions, during and after the talk, especially Harrison. Afterwards, Harrison invited me to continue the discussion in his office, and on the way, he asked: "Since you are Italian, what do you think of the Baldereschi point?" "Oh my God, I don't know what to say. I don't know what it is." Then, insisting, he summoned: "But do you know Baldereschi?" I shyly replied: "I've heard of him but don't know him personally."

As soon as I could, I went to check out what this damned Baldereschi point was. The abstract of the paper reads:

*A new special point in the Brillouin zone is introduced. It is defined as the point such that the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone. This special point is termed the "mean-value point," and is dictated by the crystal symmetry. The coordinates of the mean-value point for cubic lattices are explicitly given. – A. Baldereschi, Phys. Rev. B 7, 5212 (1973).*

Ma première rencontre avec Alfonso a été *virtuelle*. C'était en 1983, et je me trouvais à Palo Alto, en Californie, car le directeur de la division de physique du Centre de recherche IBM, situé à l'époque à Cattle Road, San Jose, m'avait invité à un entretien d'embauche. Au cours de ces années, j'ai publié des expériences sur les propriétés optiques anormales des agrégats métalliques induites par des effets de confinement quantique, qui ont suscité une certaine curiosité. La question a également intéressé Theodore Geballe de l'Université de Stanford, qui, à son tour, m'a invité à donner un séminaire au Département de physique appliquée. Les jeunes sont parfois inconscients des risques qu'ils encourent en jouant dans la cage aux lions. Le séminaire a attiré beaucoup de monde, notamment Sebastian Doniach et Walter Harrison, qui ont posé plusieurs questions pendant et après l'exposé, en particulier Harrison. Harrison m'a ensuite invité à poursuivre la discussion dans son bureau et, en chemin, il m'a demandé : « Puisque vous êtes italien, que pensez-vous du point de Baldereschi ? » « Oh mon Dieu, je ne sais pas quoi dire. Je ne sais pas ce que c'est. » Puis, insistant, il a demandé : « Mais connaissez-vous Baldereschi ? » J'ai répondu timidement : « J'ai entendu parler de lui, mais je ne le connais pas personnellement ».

Dès que j'ai pu, j'ai cherché à savoir ce qu'était ce fichu point de Baldereschi. Le résumé de l'article est le suivant :

*A new special point in the Brillouin zone is introduced. It is defined as the point such that the value which any given periodic function of wave vector assumes at this point is an excellent approximation to the average value of the same function throughout the Brillouin zone. This special point is termed the "mean-value*

That was how I met Alfonso on the *imaginary axis*. On the *real axis*, I met him in 2004 when I was put in charge of the scientific direction of FERMI (Free Electron laser Radiation for Multidisciplinary Investigations), a new free electron laser (FEL) facility under construction at Elettra in Trieste. To facilitate the job, my chair was transferred from the Catholic University of Brescia to the Physics Department of the University of Trieste. It was he who approached me a few months later. I already had deep esteem and sympathy for this man, this theoretical physicist of condensed matter, for his calm and intelligent manner during department councils. When Alfonso took the buzz, boredom and distraction, that always dominate those logorrheic meetings, dissolved into a silence propelled by everyone's attention to what Baldereschi was about to say. Soon, a deep friendship arose between us leading to frequentation in social life, if not assiduous, attentive and profound. Both from Lombardy. Both with interesting childhood and youth experiences to tell during our endless dinners which remain footprints on the path of my memory.

Then, one day, he told me: "*Why don't we lecture a course together? You do the experimental part, and I'll do the theoretical part.*" I replied: "*And what course should we teach together?*" Having already in mind his plan, he replied: "*How about a class on optical spectroscopy? I've seen your notes, and my lectures could be a good theoretical complement.*" An experimental physicist and a theoretical physicist teaching the same course at an Italian university is heresy. There is theoretical physics at the top of the pyramid, whereas experimental physics stays at the bottom. This is the dogma. But for both of us, physics had no adjectives. There is only physics, that is, knowledge of Nature. The idea materialized. For a few years, we taught the course Spectroscopy together.

Alfonso was an anarchist with class schedules. So I would often start my lecturing even an hour late, because he never ended his. Often, I would quietly settle at the rearmost desk in the classroom and listen to Alfonso teaching. They were masterly lectures, delivered by a *magister* of physics. The hands, the expression of the face, the tone of voice, the artfully chosen pauses, the crucial words punctuated with histrionic art, were a theatrical action boosting

*point," and is dictated by the crystal symmetry. The coordinates of the mean-value point for cubic lattices are explicitly given.* – A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* **7**, 5212 (1973).

C'est ainsi que j'ai rencontré Alfonso sur l'*axe imaginaire*. Sur l'*axe réel*, je l'ai rencontré en 2004 lorsque j'ai été chargé de la direction scientifique de FERMI (Free Electron laser Radiation for Multidisciplinary Investigations), une nouvelle installation de laser à électrons libres (FEL) en cours de construction à Elettra, à Trieste. Pour faciliter le travail, ma Chaire a été transférée de l'Université catholique de Brescia au Département de physique de l'Université de Trieste. C'est lui qui m'a contacté quelques mois plus tard. J'avais déjà une profonde estime et sympathie pour cet homme, ce physicien théoricien de la matière condensée, pour son calme et son intelligence lors des conseils de département. Lorsque Alfonso prenait la parole, l'ennui et la distraction, qui dominent toujours ces réunions logorrhéiques, se dissolvaient dans un silence propulsé par l'attention que chacun portait à ce que Baldereschi allait dire. Rapidement, une profonde amitié est née entre nous, qui s'est traduite par une fréquentation dans la vie sociale sinon assidue, du moins attentive et profonde. Tous deux originaires de Lombardie. Tous deux avec d'intéressantes expériences d'enfance et de jeunesse à raconter au cours de nos interminables dîners qui restent des empreintes sur le chemin de ma mémoire.

Un jour, il m'a dit : « *Pourquoi ne ferions-nous pas un cours ensemble ? Tu t'occupes de la partie expérimentale et moi de la partie théorique* ». Je lui ai répondu : « *Et quel cours devrions-nous donner ensemble ?* » Ayant déjà son plan en tête, il a répondu : « *Pourquoi pas un cours sur la spectroscopie optique ? J'ai vu tes notes, et mes cours pourraient être un bon complément théorique* ». Un même cours enseigné par un physicien expérimental et un physicien théorique dans une université italienne, c'est une hérésie. Il y a la physique théorique au sommet de la pyramide, tandis que la physique expérimentale reste en bas. C'est le dogme. Mais pour nous deux, la physique n'avait pas d'adjectif. Il n'y a que la physique, c'est-à-dire la connaissance de la Nature. L'idée s'est concrétisée. Pendant quelques années, nous avons enseigné ensemble le cours Spectroscopie.

the concepts and formalisms expressed verbally or written on the blackboard. Marcel Marceau would not have done better. At the end of the lecture, a few clear and perfect pages of a condensed matter textbook were written on the blackboard, standing as the antithesis of his anarchy and intolerance of lecture scheduling. Teaching classes after him was the most complex and challenging test of my professional life. The handwritten notes from those lectures are still on my table, watching me. Perhaps they are waiting to become a book... With this hope in mind, I would love to honor you, my friend.

I have a few more things to tell. One day, I learned that Alfonso had suddenly given up teaching the course on symmetries that he had been tutoring for a few years after retirement. No one understood his sudden and improvident decision, since the course was already on the calendar for the semester. A few months later, Alfonso explained to me—I should say confessed to me—why he quit teaching. In the last classes he lectured, he faced steps in the demonstrations that he no longer coped with well. He had to juggle with the art of experience rather than with the clarity of the mathematics. No one noticed, but his great esteem for the craft of teaching, his sense of ethics and respect for physics, compelled him to stop teaching. One day, I asked him why he had never taken Swiss citizenship. “*Why should I have?*” was his answer. “*I am italiano e lombardo, from the inside of my soul!*” These two seemingly insignificant anecdotes to show that his ethics were at least as great as his science.

Dearest friend, you left without saying goodbye, although we had talked many times about life and death and the fate that binds them. I hope we will meet again someday, under “*Quel cielo di Lombardia, così bello quand'è bello, così splendido, così in pace,*” as Don Lisander writes in his master novel *I Promessi Sposi* [1].

[1] Ed. note: “*That Lombard sky, which is so beautiful when it is beautiful, so radiant, so peaceful,*,” from “The Betrothed” by Alessandro Manzoni, translated by D. J. Connor.

Alfonso était un anarchiste des horaires de cours. Il m'arrivait donc souvent de commencer mon cours avec une heure de retard, parce qu'il ne terminait jamais le sien. Souvent, je m'installais tranquillement au dernier banc de la classe et j'écoutais Alfonso enseigner. C'étaient des cours magistraux, donnés par un *magister* de la physique. La gestuelle des mains, l'expression du visage, le ton de la voix, les pauses savamment choisies, les mots cruciaux ponctués avec un art histrionique étaient une action théâtrale qui renforçait les concepts et les formalismes exprimés verbalement ou écrits au tableau. Marcel Marceau n'aurait pas fait mieux. À la fin du cours, quelques pages claires et parfaites d'un manuel de matière condensée étaient écrites au tableau, comme l'antithèse de son anarchie et de son intolérance à l'égard de l'horaire des cours. Donner des cours après lui a été l'épreuve la plus complexe et la plus difficile de ma vie professionnelle. Les notes manuscrites de ces cours sont toujours sur ma table et m'observent. Peut-être attendent-elles de devenir un livre... C'est avec cet espoir en tête que j'aimerais t'honorer, mon ami.

J'ai encore quelques choses à raconter. Un jour, j'ai appris qu'Alfonso avait soudainement renoncé à donner le cours sur les symétries qu'il donnait depuis quelques années après sa retraite. Personne n'a compris sa décision soudaine et imprévoyante, puisque le cours était déjà inscrit au calendrier du semestre. Quelques mois plus tard, Alfonso m'a expliqué – je devrais dire avoué – pourquoi il avait arrêté d'enseigner. Dans les derniers cours qu'il avait donnés, il s'est trouvé confronté à des étapes de démonstration qu'il ne maîtrisait plus bien. Il devait jongler avec l'art de l'expérience plutôt qu'avec la clarté des mathématiques. Personne ne l'a remarqué, mais sa grande estime pour la profession d'enseignant, son sens de l'éthique et son respect pour la physique l'ont contraint à cesser d'enseigner. Un jour, je lui ai demandé pourquoi il n'avait jamais pris la nationalité suisse. Il m'a répondu : « *Pourquoi l'aurais-je fait ? Je suis italiano e lombardo, du plus profond de mon âme !* » Ces deux anecdotes apparemment insignifiantes montrent que son éthique était au moins aussi grande que sa science.

Très cher ami, tu es parti sans dire au revoir, bien que nous ayons parlé plusieurs fois de la vie et de la mort et du destin qui les lie. J'espère que nous nous reverrons un jour, sous « *Quel cielo di Lombardia, così bello quand'è bello, così splendido, così in pace* », comme l'écrit *Don Lisander* dans son grand roman *I Promessi Sposi* [1].

- [1] N.d.E.: « *C'était ce ciel de Lombardie, si beau quand il est dans sa beauté, et si calme* », tiré de « *Les Fiancés* » par Alessandro Manzoni, traduit par Jean-Baptiste de Montgrand.





# Ricordo e gratitudine

## Souvenir et gratitude

Fabio Benatti

---

Sono stati mia fortuna e privilegio l'aver avuto Alfonso come insegnante del corso di *Struttura della Materia* al Dipartimento di Fisica dell'Università di Trieste nel lontano 1983 e, poi, diventare, qualche anno dopo, suo collega di dipartimento. Come insegnante è stato fondamentale nello sviluppo del mio profilo di ricercatore, in quanto esempio di chiarezza e profondità scientifica: il suo è uno dei pochi corsi di cui io ricordi il piacere e l'arricchimento culturale che la sua passione per la fisica e la chiarezza del suo ragionare dispensavano. La stessa nitidezza mentale e rigore logico di pensiero li ho potuti poi apprezzare nel modo autorevole e tranquillo con cui interveniva nella gestione delle vicende extra-scientifiche inerenti alla vita del dipartimento. Queste le ragioni per cui, nonostante non avessimo interessi di ricerca comuni, l'impatto di Alfonso sul mio sviluppo scientifico è stato profondo e difficilmente dimenticabile.

J'ai eu la chance et le privilège d'avoir Alfonso comme professeur du cours *Struttura della Materia* au Département de physique de l'Université de Trieste en 1983 et, quelques années plus tard, de devenir son collègue au sein du département. En tant qu'enseignant, il a joué un rôle fondamental dans le développement de mon profil de chercheur en tant qu'exemple de clarté et de profondeur scientifique : c'est l'un des rares cours dont je me souviens du plaisir et de l'enrichissement culturel que sa passion pour la physique et la clarté de son raisonnement dispensaient. J'ai pu apprécier la même clarté mentale et la rigueur logique de sa pensée dans la manière autoritaire et calme avec laquelle il intervenait dans la gestion des événements extra-scientifiques inhérents à la vie du département. Telles sont les raisons pour lesquelles, bien que nous n'ayons pas eu d'intérêts de recherche communs, l'impact d'Alfonso sur mon développement scientifique a été profond et difficile à oublier.

# La copertina amaranto: memorie del Professor Alfonso Baldereschi

## La couverture amarante: souvenirs du Professeur Alfonso Baldereschi

---

Roberto Siagri

---

Ho avuto il privilegio di conoscere Alfonso Baldereschi come mio professore all'Università di Trieste nel 1984 e, più tardi, come relatore della mia tesi. Fu in quell'occasione che incontrai Stefano Baroni, che mi seguì durante il lavoro di stesura e con cui poi sono sempre rimasto in contatto. Fu lui il mio tramite per i successivi incontri con il Professore. All'epoca, non ero in grado di valutare appieno la sua straordinarietà come fisico, ma la sua eccezionalità umana traspariva in ogni aspetto.

Assistere alle lezioni del Professor Baldereschi era, per me, come andare a uno spettacolo, aspettando sempre una sorpresa. Non c'era un libro di testo e non era sempre ovvio come la storia sarebbe continuata, ma di sicuro sarebbe stata sorprendente. Prendere appunti era relativamente facile, grazie alla flemma del Professore, un suo tratto distintivo. La sua conoscenza della fisica era superba e la imperturbabilità e serenità erano contagiose, facendo di lui, per me studente del secondo biennio di Fisica, una figura scesa dall'Olimpo a confondersi con noi mortali. L'unica sua "debolezza" era l'interruzione per la sigaretta, l'unica ragione per lasciare l'Olimpo, dove molto probabilmente fumare era già allora proibito. In realtà credo che a lui piacesse insegnare perché si percepiva che ci teneva che noi capissimo, si vedeva chiaramente che non faceva il professore per caso o per dovere.

Avevo dedicato particolare attenzione nella stesura degli appunti delle lezioni, che avevo riportato su due quaderni A4. Li prestai poi a un amico di studi di cui purtroppo ho perso le tracce. Quando penso a quei due quaderni mi rattristo, ma solo per un attimo;

J'ai eu le privilège de connaître Alfonso Baldereschi comme mon professeur à l'Université de Trieste en 1984 et, plus tard, comme directeur de ma thèse. C'est à cette occasion que j'ai rencontré Stefano Baroni, qui m'a suivi durant le travail de rédaction et avec qui je suis resté en contact par la suite. C'est lui qui m'a permis d'organiser les rencontres suivantes avec le Professeur. À l'époque, je n'étais pas en mesure d'évaluer pleinement son extraordinaire talent en tant que physicien, mais son exceptionnelle humanité transparaissait dans chaque aspect.

Assister aux cours du Professeur Baldereschi était, pour moi, comme aller à un spectacle, attendant toujours une surprise. Il n'y avait pas de livre de cours, et il n'était pas toujours évident comment l'histoire allait se poursuivre, mais elle serait certainement étonnante. Prendre des notes était relativement facile, grâce au flegme du Professeur, qui était un de ses traits distinctifs. Sa connaissance de la physique était superbe, et son imperturbabilité et sa sérénité étaient contagieuses, faisant de lui, pour moi, étudiant en deuxième année de physique, une figure descendue de l'Olympe pour se mêler à nous autres mortels. Sa seule « faiblesse » était l'interruption pour la cigarette, la seule raison de quitter l'Olympe, où il était très probablement déjà interdit de fumer à l'époque. En réalité, je pense qu'il aimait enseigner, car il était évident qu'il tenait à ce que nous comprenions; il était clair qu'il n'était pas professeur par hasard ou par devoir.

J'avais accordé une attention particulière à la rédaction des notes de cours que j'avais consignées dans

poi emerge il ricordo del colore della copertina del primo dei due, e tutto si rasserenava. Era di color amaranto, un colore che denota una forte personalità, la capacità di infondere sicurezza e serenità, lasciando al contempo spazio per la meraviglia e la sorpresa. Il quaderno lo comprai non facendo molto caso al colore della copertina. È stato solo con il tempo che associai le cose. È incredibile il caso: il significato psicologico del colore della copertina si adattava alla perfezione, almeno per me, con la figura del Professore che conoscevo.

Delle sue lezioni, ricordo con particolare affetto quella sulla fluorescenza. Per me, giovane studente pervaso dall'idea del riduzionismo, scoprire che le proprietà di un sistema molecolare non sono semplicemente la somma delle proprietà dei singoli atomi che lo compongono fu come ricevere una scarica elettrica. La scoperta di nuovi fenomeni emergenti dal comportamento collettivo di tutte le parti e non ricavabili dallo studio delle singole parti, in questo caso i singoli atomi, trasformò la mia visione del mondo. Fu il suo modo di insegnare le cose e la passione che trasmetteva che mi spinsero a chiedergli la possibilità di fare la tesi con lui.

Il giorno degli esami era un vero e proprio rito di passaggio. Era noto tra noi allievi che la domanda del Professore, in realtà un problema da risolvere sul momento, ti avrebbe inizialmente tramortito, fatto impallidire e lasciato con la gola secca. Non c'era un libro di testo, gli studenti erano pochi e dunque le domande sempre diverse. Ricordo ancora la sensazione di smarrimento iniziale, la tua mente che si isola alla ricerca della soluzione, uno stato di *trance* da cui venivi tolto dalla voce rassicurante del Professore che ti guidava verso la soluzione. Quel problema che sembrava una montagna di granito si trasformava in neve al sole, che si scioglieva sotto il "punto di vista speciale" del Professore. Nel mio caso, tutto quel problemone, alla fine si poteva semplificare così tanto da ricondursi agli orbitali della molecola di idrogeno.

Devo dire che questo modo di condurre gli esami era un'abitudine condivisa dai professori di Fisica della Materia che stavano allora all'International Centre for

deux cahiers A4. Je les ai ensuite prêtés à un ami d'études dont j'ai malheureusement perdu la trace. Quand je pense à ces deux cahiers, je ressens de la tristesse, mais seulement un instant; puis le souvenir de la couleur de la couverture du premier des deux émerge, et tout s'apaise. Elle était de couleur amarante, une couleur qui dénote une forte personnalité, la capacité d'inspirer confiance et sérénité, tout en laissant de la place pour l'émerveillement et la surprise. J'avais acheté le cahier sans vraiment faire attention à la couleur de la couverture. Ce n'est qu'avec le temps que j'ai associé les choses. C'est incroyable, ce hasard: le sens psychologique de la couleur de la couverture s'accordait parfaitement, du moins pour moi, avec la figure du Professeur que je connaissais.

Parmi ses cours, je me souviens de celui sur la fluorescence. Pour moi, jeune étudiant imprégné de l'idée du réductionnisme, découvrir que les propriétés d'un système moléculaire ne sont pas simplement la somme des propriétés des atomes individuels qui le composent fut comme recevoir une décharge électrique. La découverte de nouveaux phénomènes émergents du comportement collectif de toutes les parties et ne pouvant être déduites à partir de l'étude des parties individuelles, dans ce cas les atomes, transforma ma vision du monde. Ce fut sa façon d'enseigner et la passion qu'il transmettait qui me poussèrent à lui demander la possibilité de faire ma thèse avec lui.

Le jour des examens était un véritable rite de passage. Il était connu parmi nous, les élèves, que la question du Professeur, en réalité un problème à résoudre sur le moment, te laisserait initialement abasourdi, pâle et la gorge sèche. Il n'y avait pas de livre de cours, les étudiants étaient peu nombreux et donc les questions étaient toujours différentes. Je me souviens encore de la sensation de désorientation initiale, ton esprit qui s'isole à la recherche de la solution, un état de transe dont tu étais tiré par la voix rassurante du Professeur qui te guidait vers la solution. Ce problème, qui semblait une montagne de granit, se transformait en neige au soleil, fondant sous le « point de vue spécial » du Professeur. Dans mon cas, tout ce gros problème, à la fin, pouvait se

Theoretical Physics (ICTP). La sede di Fisica dell'Università di Trieste era occupata principalmente dai fisici legati all'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN) e che lavoravano agli esperimenti dell'Organizzazione europea per la ricerca nucleare (CERN). Non mi dispiaceva andare a Miramare all'ICTP: si respirava aria di grande fisica. Ho avuto la fortuna di vivere il periodo di tesi quando, nella stanza del Professor Michele Parrinello condivisa con il Professor Stefano Baroni, il Professor Parrinello e il Professore Roberto Car stavano formulando il famoso metodo Car-Parrinello della dinamica molecolare. Posso solo dire: "io ero là". Ed è, per me, già tanto. Ho anche assistito a una conversazione animata tra il Professor Parrinello e il Professor Car sui limiti computazionali dell'allora Cray. Una frase che mi restò in testa, e che è ancora un chiodo fisso, fu pronunciata dal Professor Parrinello e, parafrasata, diceva: *"Qualunque calcolatore per quanto potente voi possiate costruirlo, noi siamo in grado di saturarlo"*. Ecco perché adesso mi occupo di calcolatori quantistici, chissà che non possa sorprendere il Professor Parrinello.

Il Professor Baldereschi aveva la straordinaria capacità di far sentire importanti le idee di ogni studente. La sua pazienza e il suo approccio metodico mi hanno insegnato che la fisica non si risolve con la fretta, ma con la perseveranza. Questo è un insegnamento di vita che mi sono sempre portato dentro. Tento anche di imitare la sua flemma e la sua calma, ma la cosa non mi riesce; io però, nonostante l'età, continuo a provarci.

Rividi il Professore alla festa per i suoi sessant'anni, un bell'evento che si tenne a Palau, in Sardegna, nel 2006. Ebbi l'onore di parlare, da ex studente del Professore, della mia carriera nel mondo industriale e durante la relazione affrontai anche il tema della crescita esponenziale della tecnologia. Dopo l'intervento, ho avuto la fortuna di conversare con lui proprio sugli esponenziali e le singolarità. Era incredibile come riuscisse, tramite la giusta domanda, a trovare soluzioni eleganti a problemi complessi. Credo che il suo metodo del punto speciale per il campionamento della zona di Brillouin, il Baldereschi point, ne è un esempio lampante.

Nessuno di noi rimane qui fisicamente in eterno, ma lo spirito di curiosità e l'amore per la scienza

simplifier au point de se ramener aux orbitales de la molécule d'hydrogène.

Je dois dire que cette manière de conduire les examens était une habitude partagée par les professeurs de physique de la matière qui se trouvaient alors au Centre international de physique théorique (ICTP). Le Département de physique de l'Université de Trieste était principalement occupé par des physiciens liés à l'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN) et qui travaillaient sur les expériences de l'Organisation européenne pour la recherche nucléaire (CERN). Cela ne me dérangeait pas d'aller à Miramare à l'ICTP : on y respirait l'air de la grande physique. J'ai eu la chance de faire ma thèse à l'époque où, dans le bureau du Professeur Michele Parrinello, partagé avec le Professeur Stefano Baroni, le Professeur Parrinello et le Professeur Roberto Car étaient en train de formuler la fameuse méthode Car-Parrinello de dynamique moléculaire. Je peux juste dire : « j'étais là ». Et pour moi, c'est déjà beaucoup. J'ai aussi assisté à une conversation animée entre le Professeur Parrinello et le Professeur Car sur les limites de calcul du Cray de l'époque. Une phrase qui m'est restée en tête, et qui est devenue une véritable idée fixe, venait du Professeur Parrinello. Paraphrasée, elle disait : *« Quel que soit l'ordinateur, aussi puissant que vous puissiez le construire, nous sommes capables de le saturer »*. C'est pourquoi maintenant je m'occupe d'ordinateurs quantiques, qui sait, peut-être que je pourrais surprendre le Professeur Parrinello.

Le Professeur Baldereschi avait la capacité extraordinaire de faire paraître importantes les idées de chaque étudiant. Sa patience et son approche méthodique m'ont appris que la physique ne se résout pas dans la précipitation, mais avec persévérance. C'est un enseignement de vie que j'ai toujours gardé en moi. J'essaie aussi d'imiter son flegme et son calme, mais je n'y parviens pas. Cependant, malgré mon âge, je continue d'essayer.

Je revis le Professeur à la fête de ses 60 ans, un bel événement qui s'est tenu à Palau, en Sardaigne, en 2006. J'ai eu l'honneur de prendre la parole, en tant qu'ancien étudiant du Professeur, sur ma carrière dans le monde industriel et j'ai également abordé le

del Professor Baldereschi vivranno per sempre nei cuori di chi ha avuto la fortuna di incontrarlo. Per me, resterà sempre quella copertina di colore amaranto dei miei quaderni di appunti: un simbolo di forza, sicurezza e serenità, ma anche di meraviglia e sorpresa. Non solo un fisico straordinario, ma un maestro che ha saputo trasmettere la sua passione per la scienza e la voglia di trovare per ogni problema la domanda giusta da farsi.

thème de la croissance exponentielle de la technologie. Après mon intervention, j'ai eu la chance de discuter avec lui précisément sur les exponentielles et les singularités. C'était incroyable de voir comment, par la bonne question, il parvenait à trouver des solutions élégantes à des problèmes complexes. Je crois que sa méthode du point spécial pour l'échantillonnage de la zone de Brillouin, le point de Baldereschi, en est un exemple frappant.

Personne d'entre nous ne reste ici physiquement éternellement, mais l'esprit de curiosité et l'amour de la science du Professeur Baldereschi vivront pour toujours dans le cœur de ceux qui ont eu la chance de le rencontrer. Pour moi, il restera toujours cette couverture de couleur amarante de mes cahiers de notes : un symbole de force, de confiance et de sérénité, mais aussi d'émerveillement et de surprise. Non seulement un physicien extraordinaire, mais un maître qui a su transmettre sa passion pour la science et l'envie de trouver pour chaque problème la bonne question à se poser.

## The seafront from Miramare to Barcola Le front de mer de Miramare à Barcola

---

**Giulia Galli**

---

It has been forty years, and I still remember the clarity and intellectual excitement of Professor Baldereschi's lectures. They were well worth the long walks from Miramare to Barcola.

Cela fait quarante ans et je me souviens encore de la clarté et de l'excitation intellectuelle des cours du Professeur Baldereschi. Elles valaient bien les longues marches de Miramare à Barcola.

It is past 9:30 in the evening and we are slowly walking from Miramare to Barcola. It is a nice walk, the sea is always different, except that on some winter evenings the wind is terribly cold and most definitely you would like to go to Trieste by bus. But we missed the

Il est 21 h 30 passées et nous marchons lentement de Miramare à Barcola. C'est une belle promenade, la mer est toujours différente, sauf que certains soirs d'hiver, le vent est terriblement froid et on aimerait vraiment aller à Trieste en bus. Mais nous avons



last 36 bus of the day. Professor Baldereschi arrives late, and he finishes teaching extremely late. I should say, though, that "late" is not exactly the right word. The time of his lectures is always a vague indication of when he might show up. There is no real timetable. Rather there are speculations and bets on when he might arrive. Hence, the concept of being on time or late does not really apply. Also, it is never clear where he comes from, whether the University of Trieste, Lausanne or somewhere else. The mystery is carefully crafted.

It is past dinner time by almost all standards. Professor Baldereschi starts lecturing without mentioning the time of the day or even how long he would lecture for. He speaks of solid-state physics and group theory as if they were exactly the only things one should be thinking about at that moment and, in fact, they are. Every now and then he turns his back to us and looks at the blackboard he has been writing on with his arms slightly open upward, and for a minute you think that Celentano may start singing *Yuppi du*. He speaks slowly, with clarity and impeccable logic that to this day remain pretty much unmatched; he creates excitement in a peculiar way that comes from the desire to solve multiple puzzles and get to the end of a complex story.

When we start walking towards Barcola, we are frustrated by the long walk ahead. We talk about the lecture that Alfonso just gave and quickly the frustration dissipates. We start marveling at the lecture, asking each other questions, debating on what he taught, commenting on the problems that he proposed to us; yes, they appear to be difficult but after all they are so clever and interesting. We are already willing to miss the bus again, to attend his next lecture, ask questions, listen to the next pieces of the puzzle.

We are the lucky graduate students of the Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) who learned solid-state physics and group theory from Professor Alfonso Baldereschi.

manqué le dernier bus 36 de la journée. Le Professeur Baldereschi arrive tard et termine son cours extrêmement tard. Je dois dire que le mot « tard » n'est pas tout à fait approprié. L'heure de ses cours est toujours une vague indication de l'heure à laquelle il pourrait se présenter. Il n'y a pas de véritable horaire. Il s'agit plutôt de spéculations et de paris sur l'heure à laquelle il pourrait arriver. Par conséquent, le concept d'être à l'heure ou en retard ne s'applique pas vraiment. De même, on ne sait jamais très bien d'où il vient, de l'Université de Trieste, de Lausanne ou d'ailleurs. Le mystère est soigneusement entretenu.

L'heure du dîner est passée selon presque toutes les normes. Le Professeur Baldereschi commence son cours sans mentionner ni l'heure, ni même la durée de son exposé. Il parle de physique du solide et de théorie des groupes comme s'il s'agissait exactement des seules choses auxquelles il fallait penser à ce moment-là et, de fait, c'est le cas. De temps en temps, il nous tourne le dos et regarde le tableau noir sur lequel il écrit, les bras légèrement ouverts vers le haut, et pendant une minute, on pense que Celentano va se mettre à chanter *Yuppi du*. Il parle lentement, avec une clarté et une logique impeccable qui, à ce jour, restent pratiquement sans égales ; il crée l'excitation d'une manière particulière qui provient du désir de résoudre de multiples énigmes et d'arriver à la fin d'une histoire complexe.

Lorsque nous commençons à marcher vers Barcola, nous sommes frustrés par la longueur de la marche. Nous parlons du cours qu'Alfonso vient de donner et la frustration se dissipe rapidement. Nous commençons à nous émerveiller, à nous poser des questions, à débattre de ce qu'il a enseigné, à commenter les problèmes qu'il nous a proposés ; oui, ils semblent difficiles, mais après tout, ils sont si intelligents et intéressants. Nous sommes déjà prêts à rater le bus à nouveau, pour assister à son prochain cours, poser des questions, écouter les prochaines pièces du puzzle.

Nous sommes les étudiants diplômés de la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) qui avons eu la chance d'apprendre la physique de l'état solide et la théorie des groupes auprès du Professeur Alfonso Baldereschi.

# Arrivederci, Alfonso!

## Au revoir, Alfonso!

Maria Peressi

Scrivo in italiano, nel tentativo di riuscire a esprimere meglio quello che mi sta a cuore. Il Professor Baldereschi ce lo faceva presente negli incontri in cui discutevamo su vantaggi e svantaggi di tenere le lezioni in inglese: è nella propria lingua madre che si riesce a comunicare al meglio una passione per qualcosa, con le sfumature e i dettagli più fini. Quindi ora in particolare seguo il suo consiglio.

Ci sono state tre persone particolarmente significative per la mia vita a cui ho sempre dato del "Lei", nonostante si trattasse di legami che via via negli anni si sono fatti sempre più profondi e preziosi: la mia maestra delle elementari, un sacerdote, Alfonso Baldereschi.

Il Professor Baldereschi mi ha fatto cambiare il percorso di studi quando, quarant'anni fa, da studentessa di Fisica all'Università di Trieste nell'indirizzo nucleare, ho seguito il suo corso di *Struttura della Materia*. Ho capito ben presto che volevo imparare da lui ad avere quello sguardo così curioso e profondo sulla realtà che ci circonda, e così, non senza fatiche e dubbi, ho deciso di cambiare i miei piani e concludere la laurea in Fisica affrontando un campo per me nuovo.

Le sue lezioni mi affascinavano perché invitava a ragionare, seguendolo nel suo pacato ma profondo percorso. I tratti del gesso sulla lavagna, disegni e formule, pure rispecchiavano l'ordine e la chiarezza del suo pensiero. Ed era meraviglioso per me prendere appunti, avendo anche il tempo di ritornare su un termine, su una formula, che seguendo il suo approfondimento passavo e ripassavo a penna, finché diventavano miei.

J'écris en italien, pour essayer de mieux exprimer ce qui me tient à cœur. Le Professeur Baldereschi nous l'a fait remarquer lors des réunions au cours desquelles nous avons discuté des avantages et des inconvénients des cours en anglais: c'est dans sa langue maternelle que l'on peut le mieux communiquer sa passion pour quelque chose, avec les nuances et les détails les plus fins. C'est donc maintenant en particulier que je suis son conseil.

Il y a trois personnes particulièrement importantes dans ma vie que j'ai toujours vouvoyées, même si au fil des années ces liens sont devenus plus profonds et plus précieux: mon institutrice à l'école primaire, un prêtre, Alfonso Baldereschi.

Le Professeur Baldereschi m'a fait changer d'orientation quand, il y a quarante ans, étudiante en physique à l'Université de Trieste dans le domaine nucléaire, j'ai suivi son cours *Struttura della Materia*. Je me suis vite rendue compte que je voulais apprendre de lui à avoir un regard aussi curieux et profond sur la réalité qui nous entoure et j'ai donc décidé, non sans efforts et doutes, de changer mes plans et de terminer mon diplôme de physique en abordant un domaine qui était nouveau pour moi.

Ses cours me fascinaient parce qu'il invitait à raisonner, à suivre son chemin calme mais profond. Les traits de craie sur le tableau noir, les dessins et les formules reflétaient également l'ordre et la clarté de sa pensée. Et c'était merveilleux pour moi de prendre des notes, d'avoir même le temps de revenir sur un terme, une formule, que, suite à son étude approfondie, je passais et repassais au stylo, jusqu'à ce qu'ils deviennent miens.

Il tempo: mi sono più volte chiesta quale fosse la sua unità di misura del tempo. Spesso anche noi studenti e collaboratori dovevamo usare la sua stessa unità di misura... e non era sempre facile. La nostra pazienza era messa a dura prova mentre lo attendevamo nel corridoio del secondo piano a Miramare, finché si materializzava quando ormai avevamo quasi perso ogni speranza. Ma a quel punto non era un problema per lui dedicare due o tre ore, anziché qualche minuto, se doveva spiegare qualcosa o rispondere a qualche domanda. Il tempo non era mai un problema, neppure agli esami. Ricordo che il mio esame di *Struttura della Materia* è iniziato attorno all'ora di cena e finito con calma a un'ora in cui tipicamente ci si accinge ad andare a dormire. Ricordo poi la vigilia della discussione della tesi... all'ultimo momento, d'accordo, ma c'è stato tutto il tempo di ridiscutere uno alla volta i lucidi (sì, i famosi lucidi di una volta), e cancellare e ritoccare le imperfezioni.

Ho avuto il privilegio di poterlo seguire poi ancora per anni e anni, durante il dottorato alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), poi in vari periodi con borse di studio e infine stabilmente in università. Tanti sono i lavori fatti con lui, tanti i progetti scientifici, tanti anche gli studenti che ho seguito assieme a lui nel loro percorso di tesi: non ho mai finito di imparare. Gli sono grata, non solo per tutto ciò che ho appreso, ma perché mi sono costantemente sentita rispettata e valorizzata. È sempre stato attento a non farmi pesare errori che certamente ho fatto, e ha sempre rispettato pienamente le mie scelte e i miei desideri di avere una vita che non fosse solo dedicata al lavoro.

Ora è come se qualcosa fosse rimasto in sospeso: ho ancora cose da imparare, pareri da scambiare, opinioni da confrontare, dialoghi da proseguire. Sono certa che ne avremo il tempo, caro Professor Baldereschi, non ora, non qui, ma altrove, dove mi permetterà di passare al "tu". Arrivederci, dunque, Alfonso, con affetto e gratitudine.

Le temps : je me suis souvent demandé quelle était son unité de mesure du temps. Nous, étudiants et collègues, devions souvent utiliser son unité de mesure également... et ce n'était pas toujours facile. Notre patience a été mise à rude épreuve lorsque nous l'attendions dans le couloir du deuxième étage à Miramare, jusqu'à ce qu'il se matérialise alors que nous avions presque perdu tout espoir. Mais à ce moment-là, il n'avait aucun problème à passer deux ou trois heures au lieu de quelques minutes s'il devait expliquer quelque chose ou répondre à quelques questions. Le temps n'a jamais été un problème, même pour les examens. Je me souviens que mon examen de *Struttura della Materia* a commencé à l'heure du dîner et s'est terminé tranquillement à l'heure où l'on va généralement se coucher. Je me souviens ensuite de la veille de la discussion de la thèse... au dernier moment, d'accord, mais on avait tout le temps de rediscuter les transparents un par un (oui, les fameux transparents d'antan), de gommer et de retoucher les imperfections.

J'ai eu le privilège de pouvoir le suivre pendant des années et des années, pendant mon doctorat à la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), puis à plusieurs reprises dans le cadre de bourses et enfin de façon permanente à l'université. Tant de travaux réalisés avec lui, tant de projets scientifiques, tant d'étudiants que j'ai suivis avec lui dans leur thèse : je n'ai jamais fini d'apprendre. Je lui suis reconnaissante, non seulement pour tout ce que j'ai appris, mais aussi parce que je me suis toujours sentie respectée et valorisée. Il a toujours veillé à ne pas me faire peser les erreurs que j'ai certainement commises, et il a toujours pleinement respecté mes choix et mes désirs d'avoir une vie qui ne soit pas uniquement dédiée au travail.

Maintenant, c'est comme si quelque chose était resté en suspens : j'ai encore des choses à apprendre, des opinions à échanger, des dialogues à poursuivre. Je suis sûre que nous aurons le temps pour cela, cher Professeur Baldereschi, pas maintenant, pas ici, mais ailleurs, où je me permettrai de passer au « tu ». Au revoir, donc, Alfonso, avec affection et gratitude.

# From the sidelines

## Depuis la marge

Vincenzo Fiorentini

As a young man, I did not have much of a knack for recognizing significant people. At one point I was very much into climbing and sailing and ended up as crew on the boat that won the 1981 Barcolana race. There I met in passing an aging gentleman whom I categorized as distinctly unimpressive, amidst all my late-teen and twentysomething fellow crew. It turned out, besides being an important writer and theatre director, he was the last survivor and witness of a legendary group of Trieste climbers who had made climbing history in the Eastern Alps in the years astride WW2. So much for my character judgment and my being into climbing.

The same happened in my final years in university. When I saw him go by in the hallway of the Physics Department, to me Alfonso was an elegant middle-aged gentleman who, so I heard, taught atomic and molecular physics—and that was the end of it.

How wrong I was. For one, he was just over 35, and second, he'd been for a while an international star in solid-state physics. In my defence—shall we say—I was equally clueless as to who those other fellows were who orbited the International Centre for Theoretical Physics (ICTP) in Trieste: Tosi, Tosatti, Parrinello, Car, and a young Stefano Baroni.

Be that as it may, when the time came, I was entirely mesmerized by his lectures. It was a soothing experience, like certain spa treatments. Utter clarity, a relaxed but consistent pace that seemed the very definition of maximal retention, a detached and simultaneously friendly way of dealing with us rookies—and exciting physics, for youngsters who had barely glimpsed quantum mechanics. Normally terrible at note taking, I spawned a set of notes that was

Dans ma jeunesse, je n'étais pas très doué pour reconnaître les personnes importantes. À un moment donné, j'étais très attiré par l'escalade et la voile, et j'ai fini par faire partie de l'équipage du bateau qui a remporté la régate Barcolana en 1981. C'est là que j'ai rencontré en passant un homme d'un certain âge que j'ai considéré comme peu impressionnant, au milieu de tous les autres membres de l'équipage qui étaient dans la fin de leur adolescence ou au début de la vingtaine. Il s'est avéré qu'en plus d'être un écrivain et un metteur en scène important, il était le dernier survivant et témoin d'un groupe légendaire d'alpinistes de Trieste qui avaient marqué l'histoire de l'escalade dans les Alpes orientales dans les années qui ont précédé la Seconde Guerre mondiale. Voilà pour ce qui est de mon jugement de caractère et de ma passion pour l'escalade.

La même chose s'est produite au cours de mes dernières années à l'université. Lorsque je l'ai vu passer dans le couloir du département, Alfonso était pour moi un élégant homme d'âge moyen qui, d'après ce que j'avais entendu dire, enseignait la physique atomique et moléculaire – et c'était tout.

J'avais tort. D'une part, il avait un peu plus de 35 ans et, d'autre part, il avait été pendant un certain temps une star internationale de la physique de l'état solide. Pour ma défense, disons que je ne savais pas non plus qui étaient les autres chercheurs qui gravitaient autour du Centre international de physique théorique (ICTP) de Trieste : Tosi, Tosatti, Parrinello, Car et le jeune Stefano Baroni.

Quoi qu'il en soit, le moment venu, j'ai été entièrement captivé par ses cours. C'était une expérience apaisante, comme certaines cures thermales. Une

so immaculate and detailed that, to my chagrin, when I lent them out, I never saw them again.

Over the years my impression was confirmed by many people of different ages: he had been the best teacher they—and I—had run into, on par with legendary quantum mechanics specialist Giancarlo Ghirardi (incidentally, another target of my character misjudgment).

So, I was sold, and I deliberated that Alfonso was the right guy for my thesis. All would be as easy, enjoyable, and transparently clear as his lectures.

Ha! The naïveté!

A few months before the end of the final year, I was browsing through the print version (yes, *print!*) of Physical Review looking for particle data for a lab exam, and I ran into a paper on shallow acceptors in semiconductors by Alfonso and Nunzio Lipari, a larger-than-life fellow that I got to know through Alfonso. I showed it to a colleague (Roberto Siagri, later a hyper successful entrepreneur, who also graduated with Alfonso) and we joked (“Ha ha! Imagine doing *that* for a living!”) about what seemed to us inextricably complicated theory.

But I reasoned, that was old hat, surely, he must have other more palatable work ongoing these days. I had been warned but hadn’t listened: I went on and asked him for a thesis.

My record as a student was not as immaculate as those atomic physics notes, but Alfonso did not inquire about it at all. To my horror, he instead whipped out a reprint of just that one paper I had run into in the library, and a few weeks later produced a seven-inch tape Fortran code, written in a style reminiscent of the Lascaux graffiti, that I was to extend to include new features. This was late 1985, and little did I know that this unlikely association would be long-term, quite close for 5 years, then looser but equally—or more—important for another 15 or so.

The difficulty of the work was way above my head. Also, I did not see much of Alfonso during those

clarté absolue, un rythme détendu mais constant qui semblait être la définition même d’une rétention maximale, une manière détachée et en même temps amicale de traiter avec nous, les débutants – et une physique passionnante, pour des jeunes qui avaient à peine entrevu la mécanique quantique. Habituellement très mauvais en matière de prise de notes, j’ai produit un ensemble de notes si immaculées et détaillées que, à mon grand regret, lorsque je les ai prêtées, je ne les ai jamais revues.

Au fil des ans, mon impression a été confirmée par de nombreuses personnes d’âges différents : il avait été le meilleur professeur que nous avions rencontré, au même titre que le légendaire spécialiste de la mécanique quantique Giancarlo Ghirardi (d’ailleurs une autre victime de mon erreur d’appréciation).

J’étais donc convaincu et j’ai décidé qu’Alfonso était parfait pour ma thèse. Tout serait aussi facile, agréable et transparent que ses cours.

Ha ! Quelle naïveté !

Quelques mois avant la fin de la dernière année, je parcourais la version imprimée (oui, imprimée !) de Physical Review à la recherche de données sur les particules pour un examen de laboratoire, et je suis tombé sur un article sur les accepteurs peu profonds dans les semi-conducteurs par Alfonso et Nunzio Lipari, un collègue plus-grand-que-nature que j’ai appris à connaître par l’intermédiaire d’Alfonso. Je l’ai montré à un collègue (Roberto Siagri, qui est par la suite devenu un entrepreneur de très grand succès, également diplômé sous la supervision d’Alfonso) et nous avons plaisanté (« Ha ha ! Imagine qu’on puisse vivre de ça ! ») sur ce qui nous semblait être une théorie inextricablement compliquée.

Mais, me suis-je dit, c’était de l’histoire ancienne, il devait sûrement avoir d’autres travaux plus agréables en cours ces jours-ci. On m’avait prévenu, mais je n’avais pas écouté : j’ai continué et je lui ai demandé une thèse.

Mon dossier d’étudiant n’était pas aussi immaculé que mes notes de physique atomique, mais Alfonso ne s’est pas du tout renseigné à ce sujet. À ma grande





40<sup>e</sup> anniversaire d'Alfonso à Forte Village, Santa Margherita di Pula, Sardaigne. Depuis la gauche: Giovanni Bachelet, Alfonso Baldereschi, Franco Meloni, Francesco Casula.

months (a pattern familiar to his associates, and which would become way more marked in the following years). He had a piercing insight, and sometimes he seemed to be playing 3D chess, as we say today. Yet I mostly had to fend for myself and build independence, self-assurance and autonomous thinking and all that, and most of all get my friggin' code to run properly. At the end of it I was somewhat battered, but all the same a new me, like someone having learned a thing or two during a solo winter hike on the Muir trail. All of this came in very handy for me in the long term: as I think it turned out, he was letting me become myself, keeping an eye on me from the sidelines.

That summer, just after graduation, I noticed an upcoming "Lund" conference on defects that Alfonso was (at least nominally) co-organizing in Sardinia. I meekly asked him if, respectfully speaking, maybe there could be a slim chance that I might possibly be considered for attendance? "Sure," he said, "sort it

horreur, il a sorti une réimpression du seul article que j'avais trouvé à la bibliothèque et, quelques semaines plus tard, il m'a présenté sur une bande de sept pouces un code Fortran, écrit dans un style rappelant les graffitis de Lascaux, que je devais étendre pour y inclure de nouvelles fonctionnalités. C'était à la fin de 1985, et j'étais loin de me douter que cette association improbable serait de longue durée, assez étroite pendant 5 ans, puis plus relâché mais tout aussi – voire plus – importante pendant une quinzaine d'années environ.

La difficulté du travail me dépassait largement. De plus, je n'ai pas beaucoup vu Alfonso au cours de ces mois (un schéma familial à ses associés et qui allait s'accroître au cours des années suivantes). Il avait une vision pénétrante et semblait parfois jouer aux échecs en 3D, comme nous le disons aujourd'hui. Pourtant, je devais surtout me débrouiller seul, développer mon indépendance, mon assurance, mon autonomie de pensée et tout le reste, et surtout faire tourner mon fichu code correctement. Au bout du compte, j'étais quelque peu meurtri, mais tout de même un nouveau moi, comme quelqu'un qui aurait appris une ou deux choses au cours d'une randonnée hivernale en solitaire sur le sentier de Muir. Tout cela m'a été très utile à long terme : je pense qu'il m'a laissé devenir moi-même, en gardant un œil sur moi depuis les marges.

Cet été-là, juste après l'obtention de mon diplôme, j'ai remarqué qu'une conférence « Lund » sur les défauts allait être organisée par Alfonso en Sardaigne (du moins nominale). Je lui ai gentiment demandé si, avec tout le respect que je lui dois, il n'y aurait pas une petite chance que ma candidature soit prise en considération pour y assister. « Il m'a répondu : « Bien sûr, arrangez-vous avec les gens du coin ». C'est ce que j'ai fait, au cours d'une aventure qui a nécessité des appels téléphoniques brouillés et crépitants avec Francesco Casula à Cagliari depuis un avant-poste solitaire de la civilisation sur la côte croate, et finalement un voyage de 30 heures en train, bateau, train, bus, du Frioul à Cagliari, ainsi que d'autres péripéties mineures. J'avais initialement prévu de bivouaquer dans un camping près de l'hôtel de la conférence, mais Francesco, d'abord un peu perplexe, après une demande polie sur d'éventuelles motivations

out with the locals.” Which I did, in an adventurous turn of events involving noisy and crackling phone calls with Francesco Casula in Cagliari from a lonely outpost of civilization on the Croatian coast, and eventually a 30-hour train, ship, train, bus trip from Friuli to Cagliari, plus other minor subplots. I had originally planned to bivouac in a camping site near the conference hotel, but Francesco, slightly puzzled at first, after a polite inquiry about possible hidden motives, eventually said “Look, just come over to the Forte Village, we’ll fund your stay.” It was a phenomenal and quite unrepeatable experience. This started a connection to Cagliari, which through thick and thin lasts to this day, as well as several long-lasting personal friendships.

Having bagged a research contract there via a family connection, I moved to Freiburg, Germany in the early fall (I’ll spare you a plot twist about admission to the Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) in the same days, which also involves Alfonso, and a dismasting in a sailing race, which does not). In the following year, non-trivially, I managed to publish my thesis paper with Alfonso. This involved a trip to Lausanne, where he hosted me at a lakeshore Radisson and bought me lunch at a nice bistro on the hills overlooking the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), and later a fair amount of fax (yes, *fax!*), mostly from me to him.

As I maneuvered for a PhD spot in the Freiburg group (headed by Jürgen Schneider, who would later produce the first European working version of white nitride-based LEDs), Alfonso was gracious enough to come over for a seminar and offer to be the formal PhD advisor at EPFL while I worked in Freiburg. I remember vividly his talk on semiconductor interfaces, a highlight of his in those times, in a thronged hall. To me—better positioned than most to appreciate the elegance of his presentation—it was dizzying and exhilarating. So, when it transpired that I had unexpectedly passed PhD admission in Trieste, the hybrid Swiss-German PhD was off the table.

Back in Trieste, the ICTP building at Miramare was being renovated, with all the attendant jackhammer noise and brick dust, and, in what became a

cachées, a fini par dire : « Écoute, viens juste au Forte Village, nous financerons ton séjour ». Ce fut une expérience phénoménale et tout à fait unique, qui a déclenché un lien avec Cagliari qui, contre vents et marées, dure encore aujourd’hui, ainsi que plusieurs amitiés personnelles de longue durée.

Ayant décroché un contrat de recherche là-bas grâce à un lien familial, j’ai déménagé à Fribourg, en Allemagne, au début de l’automne (je vous épargnerai un rebondissement concernant l’admission à la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati [SISSA] dans les mêmes jours, qui implique également Alfonso, et un démâtage lors d’une course à la voile, qui ne l’implique pas). L’année suivante, de manière non triviale, j’ai réussi à publier mon article de thèse avec Alfonso. Cela impliquait un voyage à Lausanne, où il m’a hébergé dans un Radisson au bord du lac et m’a offert un déjeuner dans un sympathique bistrot sur les collines surplombant l’École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), et plus tard une bonne quantité de *fax* (oui, de *fax*!), principalement de moi à lui.

Alors que je m’efforçais d’obtenir une place de doctorant dans le groupe de Fribourg (dirigé par Jürgen Schneider, qui allait plus tard produire la première version européenne de LED blanc à base de nitrure), Alfonso a eu la gentillesse de venir pour un séminaire et de se proposer comme conseiller officiel pour le doctorat à l’EPFL pendant que je travaillais à Fribourg. Je me souviens très bien de son exposé sur les interfaces semi-conductrices, un de ses points forts à l’époque, dans une salle bondée. Pour moi, mieux placé que la plupart des gens pour apprécier l’élégance de sa présentation, c’était vertigineux et exaltant. Ainsi, lorsqu’il s’est avéré que j’avais réussi à l’improviste l’admission au doctorat à Trieste, le doctorat hybride suisse-allemand n’était plus à l’ordre du jour.

De retour à Trieste, le bâtiment de l’ICTP à Miramare était en cours de rénovation, avec tout le bruit de marteau-piqueur et la poussière de brique que cela impliquait, et, dans ce qui est devenu un trope parmi les étudiants, un ouvrier demandant bruyamment et avec insistance à un collègue nommé « Aldo » un « balai ». Marteaux-piqueurs mis à part, mon doctorat

stock trope among fellow students, some worker insistently and noisily asking one fellow “Aldo” for a “broom.” Jackhammers aside, my PhD was also a rather haphazard construction site. My evolving toward a very independent workstyle dovetailed with the fact that I saw Alfonso—now much busier than in previous times and initially even uncertain he could supervise me at all—rather sparsely.

So by and large I was on my own, though now better equipped, in no small part due to my past activity. But Alfonso’s suggestions and directions, though infrequent, were always a boost; and he definitely did live up to my stuff on deserving occasion, like when we realised that the leading correction to the values of the energy gaps calculated in the semi-local approximation of density functional theory is inversely proportional to the high-frequency dielectric constant (a paper that got several hundred citations over time). Once, pencil and paper at the ready, he worked out, befitting his mean-value point fame, the  $k$ -point set I should use in a code that I was writing for calculations on quantum wells; but he then graciously declined being on the paper, one of the handful I authored alone. All in all, I came to see later, I was collecting more and more useful experience and independence.

In those years, many people who went on to important careers were undergrads with him. Max Di Ventura, Nicola Marzari, Sandro De Vita were among those I was close to. It is a sadly ironic twist that I saw Alfonso for the very last time at Sandro’s funeral service in 2018. But on a lighter note: many in Trieste were keen on meeting him, and Alfonso-spotting was difficult, what with lecturing, traveling, and his dual appointment. I was sitting in an ICTP office opposite Erio Tosatti’s, and Alfonso’s door was just to the left. So I was the natural lookout for his arrival, which I’d broadcast to fellow students. This was normally easy, as his hard-heeled leather shoes (he always dressed well, a trait I was unable to absorb) were heard distinctly in the corridor. One time, he did come by, and I did not spot him, much to my own and my colleagues’ dismay: it turned out he had for once made an exception to his usual elegance and worn rubber-soled shoes, whose soft step I had missed.

était lui aussi un chantier plutôt hasardeux. Mon évolution vers un style de travail très indépendant coïncidait avec le fait que je voyais Alfonso – désormais beaucoup plus occupé que par le passé et initialement même incertain qu’il puisse me superviser – plutôt rarement.

Dans l’ensemble, j’étais donc seul, même si j’étais désormais mieux équipé, en grande partie grâce à mon activité passée. Mais les suggestions et les orientations d’Alfonso, bien que peu fréquentes, ont toujours été un véritable coup de pouce ; et il a certainement animé mes travaux à l’occasion, comme lorsque nous avons réalisé que la correction principale aux valeurs des bandes interdites calculée dans la fonctionnelle densité en approximation semilocale est inversement proportionnelle à la constante diélectrique à haute fréquence (un article qui a été cité plusieurs centaines de fois au fil du temps). Une fois, crayon et papier à la main, il a trouvé, conformément à sa renommée liée au point de valeur moyenne, l’ensemble des points  $k$  que je devais utiliser dans un code pour effectuer des calculs sur les puits quantiques que j’étais en train d’écrire ; mais il a ensuite gracieusement refusé de participer à l’article, l’un des rares que j’ai rédigés seul. En fin de compte, je me suis rendu compte plus tard que j’accumulais de plus en plus d’expériences utiles et d’indépendance.

Au cours de ces années, de nombreuses personnes qui ont fait une carrière importante ont fait leurs études avec lui. Max Di Ventura, Nicola Marzari, Sandro De Vita font partie de ceux que j’ai fréquentés. Il est tristement ironique que j’aie vu Alfonso pour la toute dernière fois lors des funérailles de Sandro en 2018. Mais sur une note plus légère : de nombreuses personnes à Trieste souhaitaient le rencontrer, et il était difficile de repérer Alfonso, entre les conférences, les voyages et son double poste. J’étais assis dans un bureau de l’ICTP, en face de celui d’Erio Tosatti, et la porte d’Alfonso se trouvait juste à gauche. J’étais donc le guetteur naturel de son arrivée, que je signalais aux autres étudiants. C’était normalement facile, car on entendait distinctement dans le couloir ses chaussures en cuir à talon dur (il était toujours bien habillé, qualité je n’ai jamais assimilée). Une fois, il est passé et je ne l’ai pas repéré, à mon grand désarroi et à celui de mes collègues : il s’est avéré

When my PhD scholarship ended, I left Trieste for Cagliari and, a few months later, Berlin; in the most amicable terms, Alfonso and I scientifically parted ways for good. But he was still due to play a big role at a few key junctures in my life.

The first came because a close friend of Alfonso's in Cagliari, Franco Meloni, had become full professor, and at that time professorships usually carried a lecturer position with them. I got to know about it as I had been in contact with Cagliari since the mythical Forte Village gathering, as well as for another conference on which more below. In a break of my toiling on metal surfaces in Berlin, I participated in the contest and, unexpectedly for me, got the position. Much later, I overheard that Alfonso had pointed me out as a candidate (one acceptable in the circumstances, I guess). I am forever grateful to him for this, and equally surprised.

The stability that ensued, although in a peripheral location, enabled me to get going on a respectable line of work, often relying on some of Alfonso's key insights (e.g., on interfaces and polarization), with an international outlook and an emphatically non-provincial attitude (yet more of Alfonso's legacies). This despite the fact that geographically and as externally perceived I perhaps would (appear to) sit on the sidelines.

Now university staff, albeit barely starting out, I could consider myself something like Alfonso's fellow teacher. My maiden voyage as lecturer was Analytical Mechanics: class at 8:15 a.m. on Mon, Wed, Fri—a vastly oversized task. Lecturing to maybe 30 people a decade my juniors, if that, about stuff I had to spend most nights preparing and had flunked more than once as an undergraduate, was in stark contrast to anything I had experienced thus far—and I liked it intensely (the kids, possibly, not as much). It was a bittersweet feeling to realise that I wasn't, and never would be, the teacher he was.

Alfonso and Franco had initiated a few years back a conference named Italian-Swiss Workshop on Computational Condensed Matter Physics. This at first strengthened my Sardinia connection, and then I got into co-organizing it: first edition in 1990, first

que, pour une fois, il avait fait exception à son élégance habituelle et porté des chaussures à semelle en caoutchouc, dont le pas souple m'avait échappé.

À la fin de ma bourse de doctorat, j'ai quitté Trieste pour Cagliari et, quelques mois plus tard, pour Berlin ; Alfonso et moi nous sommes séparés scientifiquement pour de bon, dans les termes les plus amicaux. Mais il devait encore jouer un rôle important à quelques moments clés de ma vie.

Le premier a eu lieu parce qu'un ami proche d'Alfonso à Cagliari, Franco Meloni, était devenu professeur ordinaire, et à l'époque, les postes de professeur étaient généralement assortis d'un poste de maître de conférences. J'en ai entendu parler car j'étais en contact avec Cagliari depuis la mythique conférence du Forte Village, ainsi qu'à l'occasion d'une autre conférence dont nous parlerons plus loin. Pendant une pause de mon travail sur des surfaces métalliques à Berlin, j'ai fait le *concorso* et, de manière inattendue pour moi, j'ai obtenu le poste. Bien plus tard, j'ai entendu dire qu'Alfonso m'avait désigné comme candidat (ce qui est acceptable dans les circonstances, je suppose). Je lui en suis éternellement reconnaissant, tout en étant également surpris.

La stabilité qui s'en est suivie, bien qu'en périphérie, m'a permis de me lancer dans un travail respectable, en m'appuyant souvent sur certaines des idées clés d'Alfonso (sur les interfaces et la polarisation, par exemple), avec une perspective internationale et une attitude catégoriquement non provinciale (d'autres héritages d'Alfonso). Et ce, malgré le fait que, géographiquement et tel qu'il est perçu de l'extérieur, je me tiendrais peut-être (apparemment) à la marge.

Devenu membre du corps universitaire, bien que débutant à peine, je pouvais me considérer un peu comme le collègue enseignant d'Alfonso. Mon cours inaugural était celui de Mécanique analytique : cours à 8 h 15 les lundi, mercredi et vendredi – une tâche largement surdimensionnée. Donner un cours à une trentaine de personnes ayant à peine dix ans de moins que moi, sur des sujets que j'avais dû passer la plupart des nuits à préparer et que j'avais ratés plus d'une fois pendant mon cursus, était un contraste saisissant avec tout ce que j'avais vécu jusqu'à présent





60<sup>e</sup> anniversaire d'Alfonso à Cala di Lepre, Palau, Sardaigne. Depuis la gauche: Alfonso Baldereschi, Franco Meloni, Gaetano Senatore.

edition with me organizing 1994, last edition (mainly for the onset of boredom) 2005, plus a 2006 supplement, more about that below. Great science, great sea, great *bottarga*, great Vermentino and Contini *vernaccia*, and all the paraphernalia of a Sardinia conference. Early on, we renamed it Computational Materials Science Workshop, one of the first known uses of the term itself. Alfonso weighed in inviting important people and physically came to the first few editions. Thanks to his and Franco's idea, I would get to know and meet and, later, taking over, to invite, host and even start collaborations with many classical big names in the field. I still keep in a drawer some of their *codice fiscale* cards (the Italian tax code, needed to reimburse them).

Fast-forward to 2001: just after finishing the last spot of a leopard-skin extended stay as Humboldt scholar at the Schottky Institute in Munich, I flew to Reggio Calabria heading to a contest for a professor position in Messina, Sicily. Those days, the contest was for three "*idoneo*" (i.e., official certifications to be eligible for professor positions). Alfonso and Franco were in the committee. Alfonso was not there for me, exactly. Or maybe in part he was? Anyway, he

– et j'ai beaucoup aimé cela (les jeunes, peut-être moins). C'était un sentiment doux-amer de réaliser que je n'étais pas, et ne serais jamais, l'enseignant qu'il était.

Alfonso et Franco avaient lancé quelques années auparavant une conférence intitulée Italian-Swiss Workshop on Computational Condensed Matter Physics (Workshop italo-suisse sur la physique computationnelle de la matière condensée). Cela a d'abord renforcé mes liens avec la Sardaigne, puis j'ai commencé à co-organiser cette conférence : première édition en 1990, première édition avec moi comme organisateur en 1994, dernière édition (principalement en raison d'un début d'ennui) en 2005, plus un supplément en 2006, plus d'informations à ce sujet ci-dessous. Grande science, grande mer, grande poutargue, grand Vermentino et *vernaccia* Contini, et tout l'attrail d'une conférence en Sardaigne. Très tôt, nous l'avons rebaptisé Computational Materials Science Workshop, l'une des premières utilisations connues du terme lui-même. Alfonso s'est occupé d'inviter des personnes importantes, et il est venu physiquement aux premières éditions. Grâce à son idée et à celle de Franco, j'ai appris à connaître et à rencontrer et, plus tard, en prenant le relais, à inviter et à accueillir, et même à entamer des collaborations avec, de nombreux grands noms classiques du domaine. Je garde encore dans un tiroir quelques-unes de leurs cartes de *codice fiscale* (le code fiscal italien, nécessaire pour les rembourser).

Avançons rapidement jusqu'en 2001 : juste après avoir terminé le dernier épisode d'un séjour prolongé en taches de peau de léopard comme chercheur Humboldt à l'Institut Schottky de Munich, je me suis envolé pour Reggio Calabria en vue d'un *concorso* pour un poste de professeur à Messine, en Sicile. À l'époque, le concours portait sur trois « *idoneo* » (c'est-à-dire des certifications officielles pour être éligible à des postes de professeur). Alfonso et Franco faisaient partie du comité. Alfonso n'était pas là pour moi, pour être précis. Ou peut-être l'était-il en partie ? En tout cas, il n'était pas *contre* moi. Après deux jours épuisants, marqués par un déjeuner au lac Ganzirri lors d'une glorieuse journée d'hiver ensoleillée après mon exposé psychédélique sur le théorème de Bloch, j'ai pris l'avion pour rentrer chez moi en



wasn't there *against* me. After two exhausting days highlighted by a lunch at Ganzirri lake in a glorious, sunny winter day after my psychedelic Bloch theorem lecture, I flew back home, *idoneo*, carrying a jar of *bomba calabrese* [1]. A few weeks later I was called as professor in Cagliari.

Final fast-forward, and Alfonso's 60<sup>th</sup> birthday came around. The Cagliari group set up the logistics for a conference and a big party at Cala di Lepre in Palau, Sardinia, with tens of talks and all of that, and most of his friends, peers, and past students came over. For all intents and purposes, this was the sixteenth, and final, edition of Alfonso's creature: the Computational Materials Science Workshop. During the rowdy, festive, and high-alcoholic-grade main dinner in Santa Teresa di Gallura, Alfonso looked as happy as I'd expect him to allow himself to show in public. I watched on as from the outside, from the sidelines as it were, and for more than one reason I was extremely happy too. It was our last scientific and convivial meeting.

I hope to have conveyed my retrospective recognition (as someone now aging and largely outside the fray) of Alfonso's importance in my life, scientific and otherwise. A brilliant, understated, unselfish and generous character, to whom I am grateful for what he did for me, and for what he did not. *So, we beat on, boats against the current, borne back ceaselessly into the past* [2].

étant devenu *idoneo*, emportant un bocal de *bomba calabrese* [1]. Quelques semaines plus tard, j'ai été appelé comme professeur à Cagliari.

Un peu plus tard, le 60<sup>e</sup> anniversaire d'Alfonso est arrivé. Le groupe de Cagliari a organisé la logistique d'une grande fête – ou conférence – à Cala di Lepre à Palau, en Sardaigne, avec des dizaines de conférenciers et tout le reste, et la plupart de ses amis, de ses pairs et de ses anciens étudiants sont venus. Il s'agissait en fait de la seizième et dernière édition de la créature d'Alfonso : le Computational Materials Science Workshop. Au cours du dîner principal, bruyant, festif et fortement alcoolisé, qui s'est déroulé à Santa Teresa di Gallura, Alfonso avait l'air aussi heureux que je l'aurais cru capable de le montrer en public. Je l'observais de l'extérieur, depuis les coulisses en quelque sorte, et pour plus d'une raison, j'étais moi aussi extrêmement heureux. C'était notre dernière rencontre scientifique et conviviale.

J'espère avoir transmis ma reconnaissance rétrospective (en tant que personne vieillissante et largement en dehors de la mêlée) de l'importance d'Alfonso dans ma vie, scientifique et autre. Un personnage brillant, discret, désintéressé et généreux, à qui je suis reconnaissant pour ce qu'il a fait pour moi, et pour ce qu'il n'a pas fait. « *C'est ainsi que nous avançons, barques à contre-courant, sans cesse ramenés vers le passé.* » [2]

[1] Ed. note: Traditional spicy condiment (sauce) from Calabria.

[2] Ed. note: Last sentence of *The Great Gatsby* by F. Scott Fitzgerald.

[1] N.d.E.: Condiment traditionnel épicé (sauce) de Calabre.

[2] N.d.E: Dernière phrase de « *Gatsby le magnifique* » par F. Scott Fitzgerald, dans la traduction de Philippe Jaworski.

# Alfonso e gli studenti: un ricordo indelebile

## Alfonso et les étudiants: un souvenir indélébile

**Mauro Rovere**

Nei miei ultimi anni di attività a Trieste, dal 1989 fino al 1992, mi furono assegnate come compito didattico le esercitazioni del corso tenuto da Alfonso Baldereschi. Era un corso dove veniva introdotta l'applicazione della meccanica quantistica alla fisica atomica e molecolare.

Avevo sentito parlare spesso di Alfonso per i suoi importanti lavori sulla struttura elettronica dei solidi. Negli anni '80 Alfonso, che svolgeva una intensa attività scientifica a Losanna, fu chiamato a ricoprire una cattedra presso il Dipartimento di Fisica Teorica a Trieste. Iniziò per lui un periodo di frequenti viaggi fra la sede di Losanna e quella di Trieste.

Mi resi subito conto che, nonostante la sua vasta attività scientifica, Alfonso dedicava molto tempo alla didattica. Gli studenti amavano le sue lezioni. D'altra parte, chi ha assistito a qualche suo talk scientifico penso ricordi il suo modo di esporre gli argomenti: anche se si rivolgeva a specialisti, non mancava di chiarire i punti rilevanti. Si soffermava su ogni argomento senza dare niente per scontato.

È ovvio che un simile approccio funzionava molto bene nelle sue lezioni per gli studenti. Ricordo che gli studenti si presentavano agli esami ben preparati. Alfonso si interessava pure molto alle questioni della didattica del corso di Fisica. Riusciva sempre a essere presente quando c'erano in discussione argomenti di rilievo. Grazie alla sua esperienza nell'insegnamento il suo contributo era rilevante.

Poi credo che tutti ricordiamo la sua simpatia, il suo modo di fare. Ci sono vari casi che non riguardano solo i rapporti con gli studenti o i colleghi. Fra altri episodi, ho il ricordo di un viaggio in treno da Roma

Au cours de mes dernières années à Trieste, de 1989 à 1992, j'ai été chargé des séances d'exercices du cours donné par Alfonso Baldereschi. Il s'agissait d'un cours où l'application de la mécanique quantique à la physique atomique et moléculaire était introduite.

J'avais souvent entendu parler d'Alfonso pour son important travail sur la structure électronique des solides. Dans les années 1980, Alfonso, qui effectuait un travail scientifique intensif à Lausanne, a été appelé à occuper une chaire au Département de physique théorique de Trieste. Commença alors pour lui une période de fréquents déplacements entre Lausanne et Trieste.

Je me suis vite rendu compte que, malgré son activité scientifique intense, Alfonso consacrait beaucoup de temps à l'enseignement. Les étudiants adoraient ses cours. D'autre part, tous ceux qui ont assisté à l'une de ses conférences scientifiques se souviennent, je pense, de sa façon de présenter les sujets: même s'il s'adressait à des spécialistes, il ne manquait pas d'éclaircir les points importants. Il s'attardait sur chaque sujet sans rien tenir pour acquis.

Il est évident qu'une telle approche fonctionnait très bien dans ses cours aux étudiants. Je me souviens que les étudiants se présentaient aux examens bien préparés. Alfonso était également très intéressé par la didactique du plan d'études en physique. Il s'arrangeait toujours pour être présent lorsque des sujets importants étaient discutés. Grâce à son expérience en didactique, sa contribution était importante.

Enfin, je crois que nous nous souvenons tous de sa sympathie, de sa manière d'être. Il y a plusieurs exemples qui ne concernent pas seulement les

a Trieste. A Mestre, Alfonso salì in treno, mi vide e si sedette di fronte a me. Abbiamo iniziato a conversare e poi lui coinvolse anche gli altri viaggiatori vicini su una notizia che riportavano i giornali. Il suo modo di fare conquistò la simpatia degli interlocutori e quando arrivammo a Trieste erano quasi dispiaciuti di doverci salutare.

Alfonso ci mancherà per il suo modo di fare coinvolgente, la sua maniera di esporre anche argomenti difficili in modo piano, combinando spesso intuizione e logica. Al di là della sua attività scientifica e didattica, Alfonso ci mancherà anche per il modo in cui seguiva con interesse la cronaca e gli eventi di tutti i giorni, come ricordavo nell'episodio citato.

relations avec les étudiants ou les collègues. Parmi d'autres épisodes, je me souviens d'un voyage en train de Rome à Trieste. À Mestre, Alfonso est monté dans le train, m'a vu et s'est assis en face de moi. Nous avons commencé à bavarder, puis il a engagé la conversation avec les autres voyageurs proches de nous sur un sujet d'actualité paru dans les journaux. Ses manières ont gagné la sympathie de nos interlocuteurs et lorsque nous sommes arrivés à Trieste, ils étaient presque désolés de devoir nous dire au revoir.

Alfonso nous manquera pour sa manière d'être captivante, sa façon d'expliquer même des sujets difficiles de manière simple, en combinant souvent intuition et logique. Au-delà de ses activités scientifiques et d'enseignement, Alfonso nous manquera également pour la manière dont il suivait avec intérêt l'actualité et les événements quotidiens, comme je l'ai rappelé dans l'épisode mentionné.

## Alfonso e la dilatazione dei tempi

## Alfonso et la dilatation des temps

---

**Giorgio Pastore**

---

Ho incontrato Alfonso la prima volta nel 1982 come studente della Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA). Avevo appena ripreso gli studi dopo una parentesi di un anno di interruzione per gli obblighi di leva ed ero rientrato nel febbraio del 1982, a primo semestre ormai terminato. Non ho quindi avuto modo di sperimentare il Baldereschi docente, ma dovevo sostenere l'esame sul programma del suo corso che avevo studiato autonomamente. L'orale era stato fissato alle 5 del pomeriggio nel suo studio di Miramare. L'esame iniziò in orario e andò tutto liscio per i primi quaranta minuti. Poi arrivò una telefonata e Alfonso mi disse che doveva

J'ai rencontré Alfonso pour la première fois en 1982, alors que j'étais étudiant à la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA). Je venais de reprendre mes études après une interruption d'un an pour cause de service militaire et j'étais revenu en février 1982, alors que le premier semestre était terminé. Je n'ai donc pas eu l'occasion de faire l'expérience de Baldereschi en tant que professeur, mais j'ai dû passer l'examen sur son programme de cours que j'avais étudié de manière indépendante. L'examen oral était prévu à 17 heures dans son bureau de Miramare. L'examen a commencé à l'heure et s'est déroulé sans problème pendant les quarante premières

assentarsi per alcuni minuti e di aspettarlo. I minuti diventarono prima un'ora, poi due ore. Finalmente riapparve Alfonso, che riprese il filo delle domande di esame esattamente dove eravamo rimasti. Fu la prima volta che cominciai a sospettare che il tempo per Alfonso scorresse diversamente che per gli altri. Sospetto ancora più rafforzato dal vedere le lunghe attese dei miei compagni di corso che lo avevano come supervisore di tesi. Attese che però erano premiate da colloqui in cui trovavano un Alfonso completamente focalizzato sul loro lavoro e sulla soluzione di eventuali problemi.

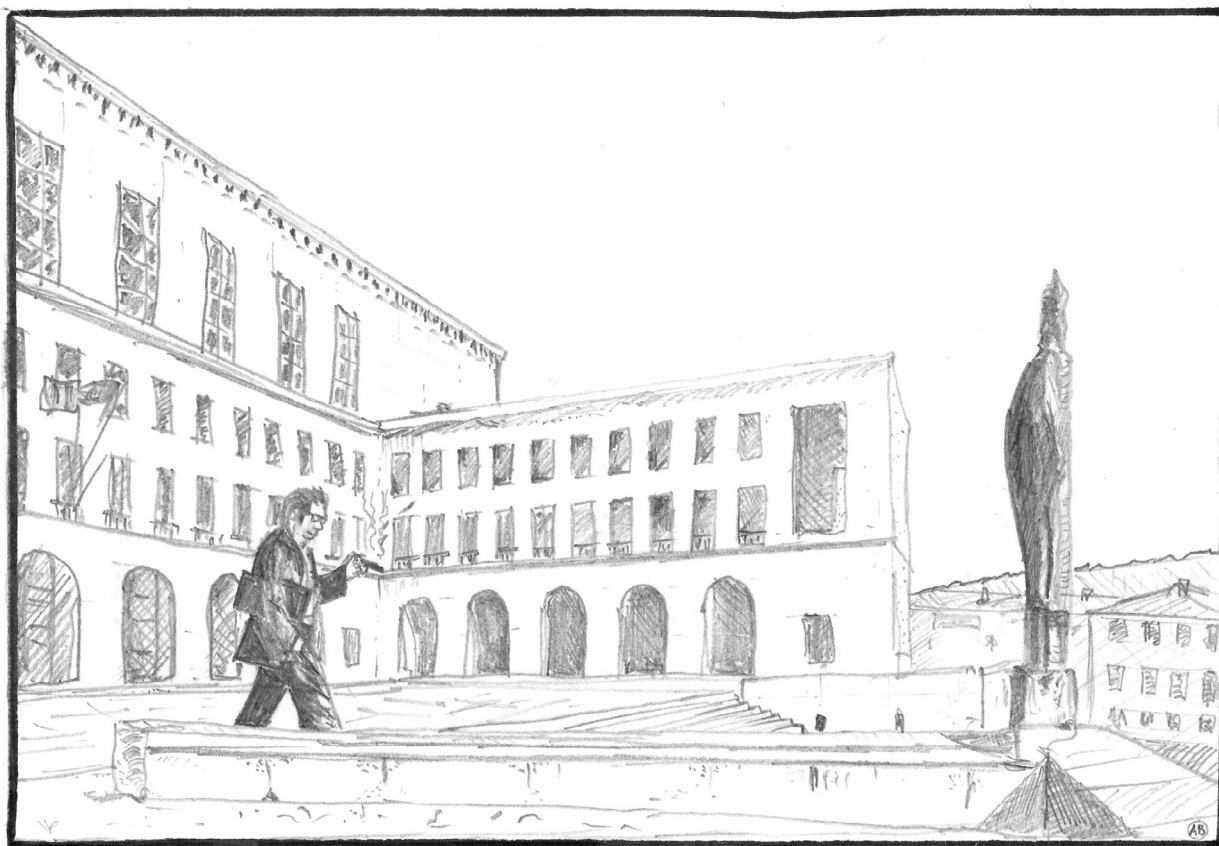
Alcuni anni dopo, alla fine del 1990, presi servizio come ricercatore universitario presso l'allora Dipartimento di Fisica Teorica dell'Università di Trieste. Nei primi anni i miei compiti didattici includevano quello di svolgere esercitazioni per gli studenti del corso che Alfonso teneva all'università. Qui sperimentai direttamente per la prima volta la meticolosità del suo impegno didattico. Ogni esercizio era pensato e calibrato per illustrare e approfondire parti della teoria. L'uso del tempo da parte di Alfonso non era cambiato. Spesso lunghe attese per riuscire a parlargli, ma poi la più completa attenzione che dava all'interlocutore, l'impressione di averlo completamente dedicato a sé per tutto il tempo necessario per risolvere problemi piccoli o grandi. Quasi come se fosse in grado di dilatare il tempo a vantaggio dell'interlocutore. Ecco, gli ho spesso invidiato questa sua capacità di mettere a proprio agio studenti e colleghi.

minutes. Puis un appel téléphonique est arrivé et Alfonso m'a dit qu'il devait partir pour quelques minutes et que je devais l'attendre. Les minutes sont devenues d'abord une heure, puis deux heures. Enfin, Alfonso est réapparu et a repris le fil des questions de l'examen exactement là où nous l'avions laissé. C'est la première fois que j'ai commencé à soupçonner que le temps s'écoulait différemment pour Alfonso que pour les autres. Mes soupçons ont été renforcés par les longues attentes de mes camarades de cours qui l'avaient comme directeur de thèse. Des attentes qui ont toutefois été récompensées par des entretiens au cours desquels ils ont trouvé un Alfonso totalement concentré sur leur travail et sur la résolution des éventuels problèmes.

Quelques années plus tard, fin 1990, j'ai accepté un poste de chercheur universitaire au Département de physique théorique de l'Université de Trieste. Au cours des premières années, mes tâches d'enseignement comprenaient la réalisation d'exercices pour les étudiants du cours qu'Alfonso donnait à l'université. C'est là que j'ai fait l'expérience directe, pour la première fois, de la méticulosité de ses efforts pédagogiques. Chaque exercice était conçu et calibré pour illustrer et approfondir certaines parties de la théorie. L'utilisation du temps par Alfonso n'avait pas changé. Souvent de longues attentes pour pouvoir lui parler, mais ensuite l'attention la plus complète qui donnait à l'interlocuteur l'impression qu'il se consacrait entièrement à lui pendant tout le temps qu'il fallait pour résoudre des problèmes petits ou grands. Un peu comme s'il était capable d'étirer le temps au profit de l'interlocuteur. Voilà, je lui ai souvent envié cette capacité à mettre à l'aise les étudiants et les collègues.

# Quel vento di saggezza Ce vent de sagesse

Alessandro Baraldi



Il destino ha voluto che io non fossi mai un tuo allievo (io che ero iscritto all'indirizzo sperimentale). Che rammarico.

Ricordo però che il tuo lento passeggiare nei corridoi del dipartimento prima delle lezioni, capo chino, appunti sottobraccio e sigaro in mano, portava con sé un vento di saggezza.

Mi piace ricordarti così, ringraziandoti per quello che hai donato al nostro ateneo e ai nostri studenti e per quello che abbiamo condiviso nel corso di laurea. Con il tuo tipico incedere, incamminato verso la nostra Minerva, dea della saggezza, della lealtà e delle virtù eroiche. Tutte qualità che emergevano forti dalla tua personalità.

Con affetto  
Alessandro



Le destin a voulu que je ne sois jamais l'un de tes étudiants (j'étais inscrit à l'orientation expérimentale). Quel regret !

Je me souviens cependant que ta lente déambulation dans les couloirs du département avant les cours, tête baissée, notes sous le bras et cigare à la main, était porteuse d'un vent de sagesse.

J'aime me souvenir de toi de cette manière, en te remerciant pour ce que tu as donné à notre université et à nos étudiants et pour ce que nous avons partagé dans notre cursus. Avec ta démarche typique, tu as marché vers notre Minerve, déesse de la sagesse, de la loyauté et des vertus héroïques. Toutes des qualités qui émergeaient fortement de ta personnalité.

Avec affection, Alessandro.

## *In principio In principio*

---

**Nicola Marzari**

---

```
From: MVXTST::CHGATE::ELDP::BALDERESCHI
Date: 8-JAN-1993 13:47:57.76
To: CHGATE::38428::SISSA::MARZARI
CC: BALDERESCHI
Subj: URGENTE
```

```
Mi chiami in ufficio dopo le 15 oggi
pomeriggio per comunicazioni...
```

```
Alfonso Baldereschi
```

I still remember the first time. I was hanging out outside Aula A, where first-year students would follow most of their lectures. He made his way through the crowd, a leather doctor's bag in his hands. Somehow that's what happens in a university I reminded myself—there are people there who are mysterious

Je me souviens encore de la première fois. Je traînais à l'extérieur de l'Aula A, où les étudiants de première année suivaient la plupart de leurs cours. Il s'est frayé un chemin dans la foule, une mallette de médecin en cuir à la main. D'une certaine manière, c'est ce qui se passe dans une université, me suis-je dit : il y a

and deep, and his apparition was confirming, in my mind, such earlier premonitions. I did not know his name, or what he was doing there; he moved, confidently, towards one of the smaller classrooms. That image stayed with me for a while.

I only discovered the name a couple of years later. Stefano and Sandro told me—four syllables. More than most, I thought; I was definitely in the right place. Their narrative of his lectures—*Struttura della Materia*, as evocative as that last name—preceded the actual experience. Clarity, and the unhurried pursuit of understanding. And some night train rides across the Alps.

The fun bit came in the summer of 1990. Sandro had found refuge in the apartment I was sharing, empty for the summer, while he was pursuing his *laurea*—quantum Monte Carlo for the two-electron atom, finding the best class of trial wavefunctions with a minimal set of parameters. That's where I learnt of his cat-and-mouse game to corner Alfonso at the laser printer of the International Centre for Theoretical Physics (ICTP), just to start a never-ending discussion on Kato and the cusp conditions, as if here and now had ceased to matter.

The field was so new and so fascinating and so compelling—the intersection of all that clarity, and of what we considered at the time supercomputers, was coaxing quantum mechanics into crunching all the answers. First and forever scientific love.

The next step was getting his attention—supervising my own *laurea*. But he had already started supervising another student. Almost impossible, we thought—as if we were all fermions. But with some perseverance, advice, and a different Stefano to the rescue, a solution came out. *Chi ben comincia...* [1].

Interactions became closer after graduation. There were some forking paths, and I went to Alfonso for the advice urgently needed. Interestingly, happiness was going to be the criterion. You should figure it out by yourself, sitting here in A, or in B—he said. Imagine yourself in the place, follow what would happen here, or there. The chair, the desk, the window. Where do you want to be? I should have listened carefully;

là des gens mystérieux et profonds, et son apparition confirmait, dans mon esprit, de telles prémonitions antérieures. Je ne connaissais pas son nom, ni ce qu'il faisait là ; il s'est dirigé avec assurance vers l'une des plus petites salles de classe. Cette image m'est restée en tête pendant un certain temps.

Je n'ai découvert son nom que quelques années plus tard. Stefano et Sandro me l'ont dit : quatre syllables. Plus long que la moyenne, me suis-je dit ; j'étais vraiment au bon endroit. Le récit de ses cours – *Struttura della Materia*, aussi évocateur que son nom de famille – a précédé l'expérience proprement dite. La clarté et la poursuite sans hâte de la compréhension. Et quelques voyages en train de nuit à travers les Alpes.

La partie la plus amusante s'est déroulée au cours de l'été 1990. Sandro avait trouvé refuge dans l'appartement que je partageais, vide pour l'été, pendant qu'il poursuivait sa *laurea* – Monte Carlo quantique pour l'atome à deux électrons, cherchant la meilleure classe de fonctions d'onde d'essai avec un ensemble minimal de paramètres. C'est là que j'ai appris qu'il jouait au chat et à la souris pour coincer Alfonso à l'imprimante laser de l'International Centre for Theoretical Physics (ICTP), juste pour entamer une discussion sans fin sur Kato et les conditions de pointe, comme si ici et maintenant avaient cessé d'avoir de l'importance.

Le domaine était si nouveau, si fascinant et si captivant : l'intersection de toute cette clarté et de ce que nous appelions à l'époque des superordinateurs poussait la mécanique quantique à calculer toutes les réponses. Le premier et éternel amour scientifique.

L'étape suivante consistait à attirer son attention – pour superviser ma propre *laurea*. Mais il avait déjà commencé à superviser un autre étudiant. Nous pensions que c'était presque impossible – comme si nous étions tous des fermions. Mais avec un peu de persévérance, des conseils et un autre Stefano au secours, une solution a été trouvée. « Bien commencer... » [1].

Les interactions sont devenues plus étroites après l'obtention du diplôme. Il y a eu des bifurcations, et je me suis adressé à Alfonso pour obtenir les conseils

follow the heart, not the brain. I followed the brain, but destiny helped out and forced its hand. I wonder if he used the same criterion for himself.

The next step came from a shared interest—and a visit to Lausanne in 1999, working with him and with Michel, laying the foundations for an ecosystem of interoperability. And then 2006, to celebrate. Sardinia, that had been so many times the happy refuge of a small but ever-so-remarkable community of electronic-structure theorists.

Somehow Heraclitus got it wrong, and we intersected one more time in Lausanne. That was the beginning of a beautiful friendship—still the *maestro*, but closer. Caterina and Giulia had worked some magic, clearly. So, we met, in Lausanne, and again in Trieste, eventually as newfound friends. And in 2022, harking back to the earlier days—Antimo and his Wannier weeks.

What he left is unique—stopping time, and diving deep, as no one else ever had the courage and the clarity to do. We all try to follow that call. Hopefully we'll have all the time in the world.

[1] Ed. note: Italian proverb: *Chi ben comincia è a metà dell'opera*. Translation: Well begun is half done.

dont j'avais besoin de toute urgence. Il est intéressant de noter que le bonheur allait être le critère. Vous devriez vous imaginer assis ici en A ou en B, m'a-t-il dit. Imaginez-vous dans l'endroit, suivez ce qui se passerait ici ou là. La chaise, le bureau, la fenêtre. Où voulez-vous être ? J'aurais dû écouter attentivement ; suivre le cœur, pas le cerveau. J'ai suivi le cerveau, mais le destin m'a aidé et m'a forcé la main. Je me demande s'il utilisait le même critère pour lui-même.

L'étape suivante est née d'un intérêt commun – et d'une visite à Lausanne en 1999, pour travailler avec lui et avec Michel et jeter les bases d'un écosystème d'interopérabilité. Et puis 2006, pour fêter l'événement. La Sardaigne, qui avait été tant de fois le refuge heureux d'une petite mais toujours aussi remarquable communauté de théoriciens de la structure électronique.

D'une manière ou d'une autre, Héraclite s'est trompé, et nous nous sommes croisés une fois de plus à Lausanne. Ce fut le début d'une belle amitié – toujours le maître, mais plus proche. Caterina et Giulia avaient manifestement opéré une certaine magie. Nous nous sommes finalement rencontrés à Lausanne, puis à Trieste, en tant qu'amis retrouvés sur des nouvelles bases. Et en 2022, pour revenir aux premiers jours – Antimo et ses semaines Wannier.

Ce qu'il a laissé est unique – arrêter le temps et plonger profondément, comme personne d'autre n'a jamais eu le courage et la clarté de le faire. Nous essayons tous de suivre cet appel. Espérons que nous aurons tout le temps du monde.

[1] N.d.E.: Proverbe complet : Bien commencer, c'est déjà la moitié de l'œuvre.

# Ricordo Alfonso Baldereschi: lo scienziato e l'uomo (incontri, di persona e non)

## Alfonso Baldereschi: le scientifique et l'homme (rencontres, en personne et autres)

---

**Alberto Debernardi**

---

Ho scelto tra i miei ricordi qualche episodio che illustra alcuni dei vari aspetti umani e scientifici di Alfonso Baldereschi, perché sono i piccoli episodi della vita di tutti i giorni che, come tessere di un mosaico, compongono il ritratto di una grande persona.

Mi è venuto naturale usare la forma della lettera, utilizzando il Lei, come ho sempre fatto anche negli auguri che inviavo ogni anno fino all'ultimo Natale (la stima e l'ammirazione non mi hanno mai permesso di rivolgermi a lui in altro modo).

Caro Professor Baldereschi,

Ricordo il nostro primo "incontro", è stato sulle pagine del Physical Review B: per la mia tesi di laurea volevo utilizzare il punto di Baldereschi per calcolare le proprietà elettroniche del cristallo di Wigner bidimensionale. Nel leggere il suo articolo mi avevano colpito sia la chiarezza e l'eleganza nella formulazione della dimostrazione che l'estrema cura nel dimostrare l'efficacia del nuovo metodo. Nella pila degli articoli importanti utilizzati per la tesi che ho conservato in fotocopia (allora non c'era il formato elettronico), l'unico che manca è quello sul punto di Baldereschi: la sua dimostrazione era tanto efficacemente impressa nella mia memoria, che riuscivo a ripeterla senza difficoltà, e farne una fotocopia mi era sembrata un'inutile spesa.

Ricordo il nostro primo incontro di persona: io, neo-laureato, partecipai al suo seminario all'Università di Pavia sul metodo per calcolare gli allineamenti delle

J'ai choisi dans mes souvenirs quelques épisodes qui illustrent certains des divers aspects humains et scientifiques d'Alfonso Baldereschi, car ce sont les petits épisodes de la vie quotidienne qui, comme les pièces d'une mosaïque, composent le portrait d'une grande personne.

Il m'a semblé naturel d'utiliser la forme d'une lettre, en utilisant le « vous », comme je l'ai toujours fait dans les vœux que j'ai envoyés chaque année jusqu'à Noël dernier (l'estime et l'admiration ne m'ont jamais permis de m'adresser à lui d'une autre manière).

Cher Professeur Baldereschi,

Je me souviens de notre première « rencontre », c'était dans les pages de Physical Review B: pour ma thèse, je voulais utiliser le point de Baldereschi pour calculer les propriétés électroniques du cristal de Wigner bidimensionnel. En lisant votre article, j'ai été frappé à la fois par la clarté et l'élégance de la formulation de la démonstration et par le soin extrême apporté à démontrer l'efficacité de la nouvelle méthode. Dans la pile d'articles importants utilisés pour la thèse que j'ai conservés en photocopie (le format électronique n'existait pas à l'époque), le seul qui manque est celui sur le point de Baldereschi : sa démonstration s'est si bien imprimée dans ma mémoire que je réussissais à la reproduire sans difficulté, et en faire une photocopie m'a semblé une dépense superflue.

Je me souviens de notre première rencontre en personne : moi, jeune diplômé, j'assistais à votre

bande elettroniche (*band offsets*) di eterogiunzioni, che aveva sviluppato con i suoi collaboratori. Ricordo il mio entusiasmo per la chiarezza e per le idee presentate nel seminario.

Mi aveva colpito il suo intelligente garbo nel rispondere alla domanda di un partecipante che aveva fatto un'affermazione errata; nella risposta Lei ha mostrato in quale condizione quell'affermazione sarebbe stata corretta e in quale sbagliata, omettendo di dire che il secondo caso era quello in esame, così che l'errore fosse palese solo all'interessato (e a chi lo aveva già compreso alla formulazione della domanda).

Ricordo poi il mio primo giorno da ricercatore a Miramare, il colloquio con Lei, Direttore del Dipartimento di Fisica Teorica e responsabile dell'unità mista Università di Trieste – Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) dell'Istituto Nazionale di Fisica della Materia (INFM) presso la quale io prendevo servizio.

Mi ha incoraggiato sia a proseguire la mia linea di ricerca (lavoravo sui tempi di decadimento dei fononi), sia ad avere delle collaborazioni su altre tematiche con gli scienziati presenti nel dipartimento. Quel giorno ho capito che dirigere una unità di ricerca vuol dire saper scegliere i giusti vincoli e i giusti gradi di libertà per i ricercatori. Una regola semplice, che però non è sinonimo di facile.

Sebbene io abbia avuto la fortuna di lavorare in posti dove fare ricerca era bello e stimolante, è degli anni trascorsi al Dipartimento di Fisica Teorica di Miramare che conservo il ricordo più bello: la serenità e collaborazione che si respiravano, l'entusiasmo di condividere la scienza che scoprivamo, un ambiente composto in gran parte da amici più che da colleghi, la simpatica efficienza delle segretarie e della responsabile dei sistemi informatici... Ricordo la cura e l'attenzione che Lei dedicava agli studenti, come quando Lei presidente e io commissario avevamo tenuto il sabato una sessione d'esame del corso di Fisica dello Stato Solido che Lei insegnava all'Università di Trieste.

Di quegli anni trascorsi al Dipartimento di Fisica Teorica, ricordo che, malgrado i pochi mezzi a

séminaire à l'Université de Pavie sur la méthode de calcul des décalages de bandes électroniques des hétérojonctions, que vous aviez mise au point avec vos collaborateurs. Je me souviens de mon enthousiasme pour la clarté et les idées présentées lors du séminaire.

J'ai été frappé par l'intelligente politesse avec laquelle vous avez répondu à la question d'un participant qui avait fait une affirmation erronée; dans votre réponse, vous avez montré dans quelle condition cette affirmation serait correcte et dans quelle condition elle serait incorrecte, en omettant de dire que cette dernière était le cas, de sorte que l'erreur n'était apparente que pour la personne concernée (et pour ceux qui l'avaient déjà comprise au moment où la question avait été formulée).

Je me souviens ensuite de mon premier jour en tant que chercheur à Miramare, de ma conversation avec vous, le directeur du Département de physique théorique et chef de l'unité mixte Université de Trieste-Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA) de l'Istituto Nazionale di Fisica della Materia (INFM) où j'étais employé.

Vous m'avez encouragé à la fois à poursuivre ma ligne de recherche (je travaillais sur la durée de vie des phonons) ainsi qu'à collaborer sur d'autres sujets avec les scientifiques du département. Ce jour-là, j'ai compris que diriger une unité de recherche, c'est savoir choisir les bonnes contraintes et les bons degrés de liberté pour les chercheurs. Une règle simple, mais qui n'est pas synonyme de facilité.

Même si j'ai eu la chance de travailler dans des lieux où la recherche était belle et stimulante, c'est des années passées au Département de physique théorique de Miramare que je garde les meilleurs souvenirs: la sérénité et la collaboration que l'on respirait, l'enthousiasme à partager la science que l'on découvrait, un environnement composé en grande partie d'amis plutôt que de collègues, l'efficacité amicale des secrétaires et de la responsable des systèmes informatiques... Je me souviens du soin et de l'attention que vous portiez aux étudiants, comme lorsque vous, en tant que président, et moi, en tant que commissaire, avons organisé une session d'examen le



disposizione, tutto funzionava bene e con serenità e armonia grazie alla mano invisibile di un bravo architetto (con la qualifica di Direttore) capace di gestire persone e risorse.

Nella collaborazione scientifica che abbiamo avuto in quel periodo ho avuto la fortuna di conoscere l'uomo e apprezzare ancora di più lo scienziato.

Lei, Professor Baldereschi, sa superarsi. Alla lezione sull'architettura di Kane per il calcolo quantistico (sul modo di manipolare un quantum-bit memorizzato nello spin nucleare di un atomo di fosforo nel silicio) nel corso che tengo in università, ci sono i suoi risultati sui livelli del fosforo in silicio pubblicati nel 1970, ancora attuali, e come sono stati "superati" dai nostri calcoli sull'effetto Stark del 2006 sullo stesso sistema. Tra gli ingredienti per il "sorpasso", la sua idea di usare la base gaussiana per eseguire i calcoli.

Ricordo quando lavoravamo su questo argomento, per spiegare la non-intersecazione (*anticrossing*) di due livelli energetici di un'impurezza di fosforo sostituzionale nel silicio in funzione di un campo elettrico, il suo riferimento al lavoro di Wigner e von Neumann, che aveva letto anni prima. Mi aveva illustrato con chiarezza i risultati essenziali del lavoro riproducendone sul momento la dimostrazione. Un segno della sua vastissima cultura scientifica, e dell'intelligenza con cui la praticava.

Noti tra i suoi collaboratori i tempi biblici di lettura e revisione di un articolo prima della sottomissione. Ricordo, al riguardo, l'ultimo nostro incontro di persona a Losanna per le celebrazioni del suo 65° compleanno. Ai saluti, Le ho chiesto di un nostro articolo da pubblicare a cui Lei doveva dare la lettura finale con i suoi commenti, mi rispose *"Ho letto la prima metà dell'articolo, mi occorre ancora un po' di tempo per finire anche la seconda parte e poi lo sottomettiamo"*. Erano due anni che Le avevo consegnato la sua copia. Le cause delle lunghe revisioni erano l'esigenza di chiarezza e la meticolosa precisione che metteva in tutti i lavori di ricerca in cui era coinvolto senza dover per questo trascurare nessuno dei suoi numerosi impegni.

samedi pour le cours de Physique de l'état solide que vous donniez à l'Université de Trieste.

De ces années passées au Département de physique théorique, je retiens que malgré le peu de moyens disponibles, tout fonctionnait bien, dans la sérénité et l'harmonie, grâce à la main invisible d'un bon architecte (avec le titre de directeur) capable de gérer les personnes et les ressources.

Dans la collaboration scientifique que nous avons eue pendant ces années, j'ai eu la chance de connaître l'homme et d'apprécier encore plus le scientifique.

Vous, Professeur Baldereschi, savez vous surpasser. Lors de la leçon sur l'architecture de Kane pour l'informatique quantique (sur la manière de manipuler un bit quantique stocké dans le spin nucléaire d'un atome de phosphore dans le silicium) dans le cours que je donne à l'université, sont présentés vos résultats sur les niveaux de phosphore dans le silicium, publiés en 1970, toujours d'actualité, ainsi que la manière dont ils ont été « surpassés » par nos calculs de l'effet Stark de 2006 portant sur le même système. Parmi les ingrédients de ce « surpassement », il y a votre idée d'utiliser la base gaussienne pour effectuer les calculs.

Je me souviens, lorsque nous travaillions sur ce sujet, pour expliquer la non-intersection (*anticrossing*) de deux niveaux d'énergie d'une impureté de phosphore substitutive dans le silicium en fonction d'un champ électrique, de votre référence aux travaux de Wigner et von Neumann, que vous aviez lus des années plus tôt. Vous m'aviez très clairement expliqué les résultats essentiels de ce travail en reproduisant sur-le-champ la démonstration. Un signe de votre très vaste culture scientifique, et de l'intelligence avec laquelle vous la pratiquiez.

Bien connus parmi vos collaborateurs les délais bibliques de lecture et de révision d'un article avant sa soumission. Je me souviens, à cet égard, de notre dernière rencontre en personne à Lausanne pour fêter votre 65<sup>e</sup> anniversaire. Lors des salutations, je vous ai demandé au sujet d'un de nos articles à publier auquel vous deviez donner la lecture finale avec vos commentaires, vous m'avez répondu *"J'ai lu*

Il mio sentitissimo grazie per tutto quello che ci ha insegnato. Il suo ricordo continua ad accompagnarci e guidarci nelle nostre ricerche.

Alberto Debernardi

*la première moitié de l'article, j'ai encore besoin d'un peu de temps pour finir aussi la deuxième partie et ensuite nous le soumettrons* ». Cela faisait deux ans que je vous avais soumis votre copie. Les raisons de ces longues révisions étaient le besoin de clarté et la précision méticuleuse que vous mettiez dans tous les travaux de recherche auxquels vous participiez, sans négliger aucun de vos nombreux engagements.

Je vous remercie du fond du cœur pour tout ce que vous nous avez appris. Votre souvenir continue de nous accompagner et de nous guider dans nos recherches.

Alberto Debernardi

## Alfonso Baldereschi: physics through images Alfonso Baldereschi: la physique par l'image

---

Erik Vesselli

---

Alfonso Baldereschi has had a role in my professional career both as a teacher, initially, and as a colleague, thereafter, playing the theoretical counterpart of my experimental group at the University of Trieste within the framework of his close collaboration with Maria Peressi. I am strongly convinced that he left a permanent footprint in the way one visually “reads” and “tells” physics. Let me explain. Still, I remember in the late '90s, when I was a master student, him entering the classroom, taking out of his “turnip” pocket that old-fashioned pocket watch and carefully positioning it on the table in front of him... a little readjustment to the fob... almost ready... great care to timeliness, apparently. Then, he started his

Alfonso Baldereschi a joué un rôle dans ma carrière professionnelle, d'abord en tant qu'enseignant, puis en tant que collègue. Il a agi comme homologue théorique de mon groupe expérimental à l'Université de Trieste, dans le cadre de son étroite collaboration avec Maria Peressi. Je suis fermement convaincu qu'il a laissé une empreinte permanente dans la façon dont on « lit » et « raconte » visuellement la physique. Je m'explique. Je me souviens encore, à la fin des années 90, alors que j'étais étudiant en master, de lui entrant dans la salle de classe, sortant de sa poche cette vieille montre et la positionnant soigneusement sur la table devant lui... un petit réajustement de la chaîne... presque prêt... une

two-hour lecture, where a short break was ordinarily scheduled at half-time. Well, on the “good” days the break would take place after something like 90 minutes, on the “bad” days it could go even longer, with the two-hour lecture well exceeding any scheduled timetable. As students, we always asked ourselves why then use the turnip watch... and this question propagated, yet unanswered, through the years and along the subsequent scientific collaboration. I feel that the loss of time-sensing was related to the insight efforts for delving into each detail of the physics. The same for lectures, and for discussions when comparing theory and experiments or writing papers. He could spend half an hour describing the graphical representation of the radial part of a single atomic wave function so that you, presumptuous student, initially surprised at spending time on such a trivial subject, ended with astonishing novel insight into something that you realized at that very moment that you never really knew before. Each detail, each bending behavior of the profile, axis units and ticks, areas, slopes... And the same approach applied to figures when writing scientific works together, every symbol, each single word of the caption, everything was precisely thought, tailored, and tuned. Physics through images: each time I teach, each time I write a paper, each time I lecture, I asymptotically aim at that detailed perfection, the mirror of a real, true, deep comprehension of physics. The last time I coincidentally met Alfonso Baldereschi, after his retirement, was in Val Bartolo a couple of years ago, in the mountains, during an excursion: knickerbockers, checked skirt, alpenstock... another, last, image to go.

grande attention à la ponctualité, apparemment. Ensuite, il commençait son cours de deux heures, une courte pause étant normalement prévue à la mi-temps. Dans les « bons » jours, la pause avait lieu après environ 90 minutes, dans les « mauvais » jours, elle avait lieu plus tard encore et le cours de deux heures dépassait largement l'horaire prévu. En tant qu'étudiants, nous nous demandions toujours à quoi servait la montre de poche... et cette question s'est propagée, sans trouver de réponse, au fil des années et de la collaboration scientifique qui a suivi. J'ai l'impression que la perte de la perception du temps était liée aux efforts de perspicacité déployés pour approfondir chaque détail de la physique. Il en allait de même pour les conférences, ainsi que pour les discussions lors qu'il s'agit de comparer la théorie et les expériences ou de rédiger des articles. Il pouvait passer une demi-heure à décrire la représentation graphique de la partie radiale d'une seule fonction d'onde atomique, de sorte que vous, étudiant présumptueux, d'abord surpris de passer du temps sur un sujet aussi trivial, finissiez par avoir un aperçu étonnant de quelque chose dont vous réalisiez à ce moment précis que vous ne l'aviez jamais vraiment su auparavant. Chaque détail, chaque variation de la courbure du profil, les unités et les graduations des axes, les surfaces, les pentes... Et la même approche s'appliquait aux figures lors de l'écriture des travaux scientifiques ensemble, chaque symbole, chaque mot de la légende, était soigneusement réfléchi, adapté et ajusté... La physique par l'image : chaque fois que j'enseigne, chaque fois que j'écris un article, chaque fois que je donne une conférence, je vise asymptotiquement cette perfection détaillée, le miroir d'une compréhension réelle, vraie et profonde de la physique. La dernière fois que j'ai rencontré par hasard Alfonso Baldereschi, après sa retraite, c'était à Val Bartolo il y a quelques années, dans les montagnes, au cours d'une excursion : pantalon à bretelles, chemise à carreaux, alpenstock... une autre, dernière, image à emporter.

# Il segno di Alfonso

## Le signe d'Alfonso

Luca Dell'Anna

Il mio ricordo di Alfonso Baldereschi è legato ai miei anni di Università a Trieste da studente del suo corso Teoria Quantistica della Materia e successivamente da suo allievo di tesi di laurea.

Da studente del corso ero affascinato dalle sue lezioni. Con quell'aspetto da Humphrey Bogart e la sua proverbiale calma conduceva con sapienza noi studenti in un affascinante viaggio nella conoscenza del mondo microscopico della materia. Le sue lezioni erano rigorose e chiarissime allo stesso tempo. Sembrava tutto semplice anche se non lo era. Ricordo, infatti, che una volta risposi a un suo quesito formulato durante una lezione su delle funzioni d'onda. La risposta avrebbe richiesto del tempo per fare i calcoli, ma usando le informazioni disseminate a lezione riuscii a fare il conto a mente e a rispondere dal banco all'istante. Era in parte merito della mia attenzione ma soprattutto della sua capacità espositiva, che a sua volta aveva catturato la mia attenzione. Era chiaro che mi trovavo di fronte a un docente di eccezionale bravura, capace di alimentare la curiosità degli studenti. Alla fine degli esami decisi, quindi, di diventare suo studente di laurea.

Devo ammettere che il mio periodo di tesi fu abbastanza lungo, durante il quale lessi molti articoli e imparai a programmare in Fortran anche grazie a Maria Peressi. Imparai tante cose, la più importante fu quella di iniziare ad essere indipendente nel mondo della ricerca. Alfonso era oberato di lavoro anche all'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) e di rado riuscivo ad incontrarlo per mostrare i miei risultati. Le comunicazioni tra di noi avvenivano spesso in maniera epistolare: lasciavo nella sua buca delle lettere all'International Centre for Theoretical Physics (ICTP) i miei fogli con i calcoli. Quando

Mon souvenir d'Alfonso Baldereschi est lié aux années que j'ai passées à l'Université de Trieste en tant qu'étudiant de son cours Théorie quantique de la matière et, plus tard, en tant que son étudiant de *laurea*.

En tant qu'étudiant, j'étais fasciné par ses cours. Avec son regard à la Humphrey Bogart et son calme proverbial, il nous entraînait avec expertise dans un voyage fascinant dans le monde microscopique de la matière. Ses cours étaient à la fois rigoureux et très clairs. Tout semblait simple, même si ce n'était pas le cas. Je me souviens d'ailleurs d'avoir répondu une fois à une question qu'il avait posée lors d'un cours sur les fonctions d'onde. La réponse aurait pris un certain temps à calculer, mais en utilisant les informations dispersées dans le cours, j'ai pu faire le calcul mentalement et répondre instantanément depuis mon banc. C'est en partie grâce à mon attention, mais surtout à sa capacité d'exposition, qui avait à son tour capté mon attention. Il était clair que j'avais affaire à un enseignant exceptionnellement bon, capable de nourrir la curiosité des étudiants. À la fin de mes examens, j'ai donc décidé de devenir son étudiant de *laurea*.

Je dois avouer que ma période de thèse a été assez longue, durant laquelle j'ai lu de nombreux articles et appris à programmer en Fortran, grâce à Maria Peressi également. J'ai appris beaucoup de choses, la plus importante étant de commencer à être indépendant dans le monde de la recherche. Alfonso était également surchargé de travail à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) et j'arrivais rarement à le rencontrer pour lui montrer mes résultats. La communication entre nous était souvent épistolaire : je laissais mes feuilles de comptes dans

riuscivo ad incontrarlo, però, era sempre molto utile per me. A volte gli bastava dare una rapida occhiata a una lista interminabile di numeri, apparentemente indecifrabile, risultato di conti numerici, per dire se andasse tutto bene. Durante la tesi compresi che, oltre ad essere uno straordinario insegnante, era anche un ricercatore eccezionale, acuto e curioso.

Il suo modo di fare è per me la sua eredità più grande. La sua apparente lentezza e la sua flemma carica di ironia rappresentavano anche il suo modo di dare valore al tempo che fa maturare le buone idee. Subito dopo essermi laureato, Alfonso, Maria ed io scrivemmo un articolo sull'argomento della mia tesi che riguardava le funzioni di Wannier in semiconduttori cubici e le loro simmetrie. L'articolo rimase inedito, sospeso per anni nel fumo delle sue sigarette, in linea col suo stile calmo e riflessivo. Immagino ancora oggi quei fogli sulla sua scrivania vicino a un portacenere colmo e una bottiglia di birra. Spesso erano quelle le tracce del suo passaggio dal suo ufficio a Trieste. Un ufficio piccolo per le sue grandi braccia che quasi raggiungevano ogni punto della stanza, talmente piccolo che, stando seduto, avrebbe potuto con una mano prendere un libro da uno scaffale e con l'altra scrivere alla lavagna.

Negli anni successivi sono state purtroppo poche le occasioni di incontro, a volte casuali a Trieste in compagnia della sua amata Giulia, ma ogni volta che accadeva di vederlo ho sempre percepito la sua grande empatia e umanità. Sono rare le persone sulle quali senti istintivamente di poter sempre contare e nelle quali trovare disponibilità all'ascolto, anche se non le vedi di frequente. Alfonso era sicuramente una di quelle. Al di là delle sue indiscusse capacità scientifiche, ciò che più mancherà a chi lo ha conosciuto e a me personalmente sono soprattutto le sue straordinarie qualità personali, oltre alle sue grandi doti da *"insegnante"*, che letteralmente significa *"colui che lascia un segno dentro"*, nel cuore di chi apprende. Alfonso, quindi, non verrà mai dimenticato perché ha lasciato un segno indelebile, scientifico e umano, la sua firma sui suoi lavori e nelle menti dei suoi studenti.

sa boîte aux lettres à l'International Centre for Theoretical Physics (ICTP). Cependant, lorsque j'ai pu le rencontrer, il m'a toujours beaucoup aidé. Il lui suffisait parfois de jeter un coup d'œil à une interminable liste de chiffres, apparemment indéchiffrable, résultat d'un calcul numérique, pour me dire si tout allait bien. Au cours de ma thèse, je me suis rendu compte qu'en plus d'être un professeur extraordinaire, il était aussi un chercheur exceptionnel, vif et curieux.

Pour moi, sa façon de faire est son plus grand héritage. Sa lenteur apparente et son flegme plein d'ironie représentaient aussi sa façon de valoriser le temps qui fait mûrir les bonnes idées. Peu après l'obtention de mon diplôme, Alfonso, Maria et moi-même avons rédigé un article sur le sujet de ma thèse, qui portait sur les fonctions de Wannier dans les semi-conducteurs cubiques et leurs symétries. L'article est resté inédit, suspendu pendant des années dans la fumée de ses cigarettes, conformément à son style calme et réfléchi. J'imagine encore ces papiers sur son bureau, à côté d'un cendrier plein et d'une bouteille de bière. Celles-ci étaient souvent les traces de son passage dans son bureau de Trieste. Un petit bureau pour ses grands bras qui s'étendaient presque partout dans la pièce, si petit qu'en s'y asseyant, il pouvait prendre un livre sur une étagère d'une main et écrire sur le tableau de l'autre.

Dans les années qui ont suivi, j'ai malheureusement eu peu d'occasions de le rencontrer, parfois à Trieste en compagnie de sa bien-aimée Giulia, mais chaque fois que je l'ai vu, j'ai toujours ressenti sa grande empathie et son humanité. Rares sont les personnes sur lesquelles on sent instinctivement qu'on peut toujours compter et en qui on trouve une volonté d'écoute, même si on ne les voit pas souvent. Alfonso était certainement de ceux-là. Au-delà de ses compétences scientifiques incontestables, ce qui manquera le plus à ceux qui l'ont connu et à moi-même, ce sont surtout ses extraordinaires qualités personnelles, ainsi que ses grandes qualités d'*« enseignant »*, terme qui signifie littéralement *« celui qui laisse un signe en soi »*, dans le cœur de celui qui apprend. Alfonso ne sera donc jamais oublié parce qu'il a laissé une marque indélébile, scientifique et humaine, sa signature sur son travail et dans l'esprit de ses étudiants.



# Un insegnante infinito

## Un enseignant infini

Daniele Coslovich

Sono stato uno studente di Alfonso Baldereschi agli inizi degli anni duemila e ho seguito due corsi di fisica quantistica della materia che teneva per l'allora "neonata" laurea magistrale in Fisica della Materia all'Università di Trieste. Quei corsi non facevano parte del mio curriculum di fisico teorico, ma li misi comunque nel piano di studi. Non avrei potuto fare una scelta migliore: tra i tanti che ho seguito in quegli anni, quelli di Baldereschi si stagliano ancora chiaramente, assieme al ricordo di un insegnante eccezionale. Certo per la sua capacità straordinaria di trasmettere il senso fisico di un'equazione, di un grafico o di un dato, senza mai rinunciare al rigore. Ma anche, e forse soprattutto, per un modo assolutamente singolare di tenere lezione: un incedere lento e magnetico, che trasformava la lezione in racconto, facendola durare spesso ben oltre l'orario normale. E quella gestualità, quell'enfasi nella voce con cui sottolineava i passaggi più importanti: c'era qualcosa di unico nella mimica di Baldereschi mentre insegnava, di cui conservo un ricordo visivo forse ormai approssimato, ma caro. Grazie anche a quei corsi, i miei interessi scientifici si spostarono verso la fisica della materia condensata, trovando infine sbocco nella simulazione numerica di sistemi densi e disordinati. La carriera scientifica mi ha poi portato altrove e purtroppo non ho più avuto occasione di incontrare Alfonso Baldereschi. Tornato da alcuni anni all'Università di Trieste come professore, insegno ora nelle stesse aule in cui ho avuto il privilegio di seguire le sue lezioni. Ancora oggi, il loro ricordo è uno sprone a diventare un insegnante migliore.

J'ai été un étudiant d'Alfonso Baldereschi au début des années 2000 et j'ai assisté aux deux cours sur la physique quantique de la matière qu'il donnait pour le tout nouveau master en Physique de la matière à l'Université de Trieste. Ces cours ne faisaient pas partie de mon cursus en Physique théorique, mais je les ai néanmoins ajoutés à mon plan d'études. Je n'aurais pas pu faire un meilleur choix : parmi les nombreux cours que j'ai suivis au cours de ces années, celui de Baldereschi se distingue encore clairement, ainsi que le souvenir d'un Professeur exceptionnel. Certainement pour son extraordinaire capacité à transmettre le sens physique d'une équation, d'un graphique ou d'une donnée, sans jamais renoncer à la rigueur. Mais aussi, et peut-être surtout, pour une manière absolument singulière de donner des cours : une démarche lente et magnétique qui transformait la leçon en récit, la faisant souvent durer bien au-delà de l'horaire normal. Et ce geste, cette accentuation de la voix avec laquelle il soulignait les passages les plus importants : il y avait quelque chose d'unique dans la gestuelle de Baldereschi lorsqu'il enseignait, dont je garde un souvenir visuel peut-être désormais approximatif, mais cher. C'est également grâce à ces cours que mes intérêts scientifiques se sont orientés vers la physique de la matière condensée, trouvant finalement un débouché dans la simulation numérique de systèmes denses et désordonnés. Ma carrière scientifique m'a ensuite conduit ailleurs et je n'ai malheureusement jamais eu la chance de rencontrer à nouveau Alfonso Baldereschi. De retour à l'Université de Trieste en tant que professeur il y a quelques années, j'enseigne aujourd'hui dans les mêmes salles de classe où j'ai eu le privilège d'assister à ses cours. Aujourd'hui encore, leur souvenir m'incite à devenir un meilleur enseignant.

# Lo stile di Baldereschi

## Le style de Baldereschi

---

Nicola Seriani

---

Alfonso Baldereschi fu mio insegnante di Teoria Quantistica della Materia nell'anno accademico a cavallo tra i millenni (1999-2000). In quel periodo formativo, la sua presenza ebbe un ruolo fondamentale, per l'eleganza dei ragionamenti, l'efficacia delle approssimazioni e l'essenzialità dei metodi. Mi mostrò uno stile di pensiero profondo e originale, sempre unito a uno sguardo ironico e attento. Mi colpì che persino tramite le domande d'esame capii cose nuove!

Da allora, Baldereschi è rimasto una presenza rarefatta ma persistente nella mia vita scientifica, sia direttamente che attraverso l'interazione con i suoi discepoli. Ricordo l'ultima volta che lo vidi, seduti a un tavolo a poca distanza dal mare, a Grignano, dopo un'intensa giornata di seminari. E lui era lì, un po' più curvo e un po' più lento nei movimenti, ma con lo stesso occhio vivace e la mente arguta. Nel momento della sua dipartita, mi dà sollievo ritrovare nei metodi e negli atteggiamenti di tanti colleghi una reminiscenza dello stile di Baldereschi, peraltro ineguagliato.

Che possa riposare in pace.

Ci mancherà la sua arguzia profonda,  
lo sguardo attento e ironico,  
la simmetria della funzione d'onda,  
di Baldereschi il punto iconico.  
Da maestro insegnò le molecole,  
e, tramite ragionamenti sagaci,  
a calcolarle, senza bazzecole,  
con approssimazioni semplici ed efficaci.  
Oggi che è scomparso, siamo tanti  
qui, a meravigliarsi che sia stato,  
a celebrare idee illuminanti  
e anche il suo stile, ineguagliato.

Alfonso Baldereschi a été mon professeur de Théorie quantique de la matière pendant l'année académique au tournant du millénaire (1999-2000). Pendant cette période de formation, sa présence a joué un rôle fondamental, pour l'élégance de son raisonnement, l'efficacité de ses approximations et l'essentialité de ses méthodes. Il m'a montré une pensée profonde et originale, toujours associée à un regard ironique et attentif. J'ai été frappé de voir que même à travers les questions de l'examen, je comprenais des choses nouvelles !

Depuis lors, Baldereschi est resté une présence rarefiée mais persistante dans ma vie scientifique, tant directement que par l'interaction avec ses disciples. Je me souviens de la dernière fois que je l'ai vu, assis à une table non loin de la mer, à Grignano, après une journée intense de séminaires. Il était là, un peu plus courbé et un peu plus lent dans ses mouvements, mais avec le même regard vif et le même esprit brillant. Au moment de son départ de ce monde, je suis soulagé de retrouver dans les méthodes et les attitudes de tant de mes collègues une reminiscence du style, d'ailleurs inégalé, de Baldereschi.

Qu'il repose en paix.

Ils nous manqueront sa finesse d'esprit profonde,  
son regard attentif et ironique,  
la symétrie de la fonction d'onde,  
de Baldereschi le point iconique.  
En tant que maître, il enseignait les molécules  
et, par des raisonnements sagaces,  
sans bagatelles faire des calculs,  
avec des approximations simples et efficaces.  
Aujourd'hui qu'il n'est plus, nous sommes nombreux  
ici, à nous émerveiller qu'il ait été,  
à célébrer des concepts radieux,  
ainsi que son style, inégalé.

# Una voce inconfondibile

## Une voix reconnaissable entre toutes

---

**Cecilia Blasetti**

---

Era sabato mattina, stavo uscendo dal portone del condominio per fare la spesa nel quartiere. All'improvviso, una voce inconfondibile attraversò la mia testa e, prima ancora di voltarmi verso la sorgente di quel suono, la mia mente dispiegò una lavagna piena di calcoli: i livelli orbitali dell'atomo di idrogeno! Fu così che scoprii che, quasi vent'anni dopo averlo ammirato come insegnante di Fisica della Materia a Trieste (2003-2004), il Professor Baldereschi era diventato il mio vicino di casa. Rimarrà, di gran lunga, il docente più brillante che abbia avuto la fortuna di incontrare: appassionato e al tempo stesso chiaro nelle sue spiegazioni, come il segno bianco di gesso su una lavagna nera.

C'était un samedi matin, je sortais de la porte d'entrée de l'immeuble pour aller faire quelques courses dans le quartier. Soudain, une voix reconnaissable entre toutes m'a traversé la tête et, avant même que je puisse me tourner vers la source de ce cette voix, mon esprit a déplié un tableau noir rempli de calculs : les niveaux orbitaux de l'atome d'hydrogène ! C'est ainsi que j'ai découvert que, près de vingt ans après l'avoir admiré en tant que professeur de Physique de la matière à Trieste (2003-2004), le Professeur Baldereschi était devenu mon voisin. Il restera, de loin, le professeur le plus brillant que j'ai eu la chance de rencontrer : passionné et en même temps clair dans ses explications, comme une marque de craie blanche sur un tableau noir.

## Chalk, blackboards, and cigarettes: the adiabatic teaching of physics

## Craies, tableaux noirs et cigarettes: l'enseignement adiabatique de la physique

---

**Antimo Marrazzo**

---

I was a master's student in Physics at the University of Trieste from 2013 to 2015. At the time, Baldereschi was giving two courses (both of which I followed) for the condensed-matter curriculum: Atomic and

J'étais étudiant en master de physique à l'Université de Trieste de 2013 à 2015, à l'époque où Baldereschi donnait deux cours (que j'ai suivis) dans le cursus de matière condensée: Physique atomique et

Molecular Physics and Supplements of Condensed Matter Theory.

Not so long ago, while preparing notes for my first graduate course at the Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), I started thinking back to Professor Baldereschi and the lectures he taught when I was a master's student in Physics at the University of Trieste, about ten years ago in the theory and simulation of condensed matter.

Baldereschi probably gave the best lectures I had during my undergraduate years, and his style was unique. Lessons could go on for about three hours, often until 7 p.m. or beyond, with a cigarette break in between; I seem to remember he smoked Chesterfield Blue, like Oppenheimer. He barely used any technological tools—just some rare photocopies, mostly with one graph per page representing experimental measurements—and relied on only three items: chalk, a blackboard, and cigarettes.

The lectures were slow, but not too slow: a physicist might say “adiabatic”—just slow enough to follow the fundamental state of the conversation, slowing down when things became rougher and steeper. He would go very much in depth, dissecting fundamental topics until their core was exposed and unveiled. At the time, he was giving a compulsory course on Atomic and Molecular Physics and an optional course covering several advanced topics in theoretical condensed matter physics – topics he likely considered most important for future practitioners in the field. He could spend hours revealing the secrets of the hydrogen atom or the adiabatic approximation, and you would have stayed there indefinitely.

I still have the notes I took at the time: they are the most precious ones I have, and I haven't been able to find those topics presented in that way in any book. The subjects he taught were a part of him – he didn't need any book; he was the book, in some sense.

The lessons were crystal clear and captivating; he proceeded calmly and delved deeply into every subject. This reminds me of two quotes attributed to Feynman that describe his attitude well. The first is: *“Nearly everything is interesting if you go into it*

moléculaire et Suppléments de théorie de la matière condensée.

Il n'y a pas si longtemps, en préparant des notes pour mon premier cours de doctorat à la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), j'ai commencé à repenser au Professeur Baldereschi et aux cours qu'il donnait lorsque j'étais étudiant en master me spécialisant dans la théorie et la simulation de la matière condensée, il y a environ dix ans.

Baldereschi a probablement donné les meilleurs cours que j'ai eus pendant mes années de master, et son style était unique. Les cours pouvaient durer environ trois heures, souvent jusqu'à 19 heures ou au-delà, avec une pause cigarette au milieu ; il me semble me souvenir qu'il fumait des Chesterfield Blue, comme Oppenheimer. Il utilisait à peine des outils technologiques – juste quelques rares photocopies, principalement avec un graphique par page représentant des mesures expérimentales – et il s'appuyait uniquement sur trois éléments : la craie, le tableau noir et les cigarettes.

Les cours étaient lents, mais pas trop lents : un physicien pourrait dire « adiabatiques » – juste assez lents pour suivre l'état fondamental de la conversation, ralentissant lorsque les choses devenaient plus complexes et abruptes. Il approfondissait énormément les sujets fondamentaux, les disséquant jusqu'à ce que leur essence soit exposée et dévoilée. À l'époque, il donnait un cours obligatoire sur la Physique atomique et moléculaire et un cours optionnel couvrant plusieurs sujets avancés en physique théorique de la matière condensée – des sujets qu'il considérait probablement comme les plus importants pour les futurs praticiens du domaine. Il pouvait passer des heures à révéler les secrets de l'atome d'hydrogène ou de l'approximation adiabatique, et vous auriez été là indéfiniment.

J'ai encore les notes que j'ai prises à l'époque : ce sont les plus précieuses que j'aie, et je n'ai pas réussi à trouver ces sujets présentés de cette manière dans aucun livre. Les sujets qu'il enseignait faisaient partie de lui – il n'avait besoin d'aucun livre ; il était le livre, en quelque sorte.

*deeply enough," while the second is: "If you cannot explain something in simple terms, you do not understand it."*

This style of approaching physics, I believe, left its mark on everyone who worked or studied with Baldereschi, and it embodies some of the noblest aspects of the Italian School: rigor, depth, and creativity. It's certainly a mantra that resonates in my daily work.

Oral exams could last a couple of hours per student, perhaps even longer, and you would come out having learned far more than when you went in; by the end, you'd almost forget you were there for an exam.

In a scientific community increasingly tempted by superficial understanding and instant gratification, where clear thinking and time to focus are ever rarer commodities, I believe Baldereschi reminds us to reclaim our time to think, to struggle, to delve deeply into what we love, to be creative, to be intellectually honest, and to be rigorous.

Even more importantly, he reminds me to share all of that with the eager students sitting in my class today, as I am about to put my phone in airplane mode, roll up the sleeves of my shirt, glance at the windy gulf outside, and draw the first equation of today's lecture with a piece of chalk—on these beautiful large blackboards. Few cigarettes around these days.



Les leçons étaient captivantes et d'une clarté cristalline ; il avançait calmement et approfondissait chaque sujet. Cela me rappelle deux citations attribuées à Feynman qui décrivent bien son attitude. La première est : « *Presque tout est intéressant si l'on y entre suffisamment en profondeur* », tandis que la seconde est : « *Si vous ne pouvez pas expliquer quelque chose en termes simples, vous ne le comprenez pas.* »

Ce style d'approche de la physique, je crois, a laissé une empreinte sur tous ceux qui ont travaillé ou étudié avec Baldereschi, et il incarne certains des aspects les plus nobles de l'école italienne : rigueur, profondeur et créativité. C'est certainement un mantra qui résonne dans mon travail quotidien.

Les examens oraux pouvaient durer quelques heures par étudiant, voire plus, et vous en sortiriez en ayant appris beaucoup plus que vous saviez à votre entrée ; à la fin, vous aviez presque oublié que vous étiez là pour un examen.

Dans une communauté scientifique de plus en plus tentée par une compréhension superficielle et la gratification instantanée, où la pensée claire et le temps de concentration sont des ressources de plus en plus rares, je crois que Baldereschi nous rappelle de revendiquer notre temps pour penser, pour lutter, pour plonger profondément dans ce que nous aimons, pour être créatifs, pour être intellectuellement honnêtes et pour être rigoureux.

Plus important encore, il me rappelle de partager tout cela avec les étudiants avides qui sont assis dans ma classe aujourd'hui, alors que je m'apprête à mettre mon téléphone en mode avion, à retrousser les manches de ma chemise, à jeter un coup d'œil sur le golfe venteux à l'extérieur et à tracer la première équation du cours d'aujourd'hui avec une pièce de craie – sur ces magnifiques grands tableaux noirs. Peu de cigarettes ces temps-ci.





## Liste complète des publications

- [1] A. Baldereschi and F. Bassani, Landau levels and magneto-optic effects at saddle points, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 66–68 (1967).
- [2] A. Baldereschi and F. Bassani, Magneto-optic transitions and exciton effects in anisotropic semiconductors, in *Proceedings of the 9th International Conference on the Physics of Semiconductors: Moscow, July 23–29, 1968*, Vol. 1 (Publishing House Nauka, Leningrad, 1968), pp. 280–286.
- [3] A. Baldereschi, Valley-orbit interaction in semiconductors, *Phys. Rev. B* **1**, 4673–4677 (1970).
- [4] A. Baldereschi and F. Bassani, Optical absorption by excitons in a uniform magnetic field, in *Proceedings of the 10th International Conference on the Physics of Semiconductors: Cambridge, Massachusetts, August 17–21, 1970*, edited by J. C. Hensel, S. P. Keller, and F. Stern (U.S. Atomic Energy Commission, Division of Technical Information, 1970), pp. 191–196.
- [5] A. Baldereschi and M. G. Diaz, Anisotropy of excitons in semiconductors, *Nuovo Cimento B* **68**, 217–229 (1970).
- [6] A. Baldereschi and N. O. Lipari, Direct exciton spectrum in diamond and zinc-blende semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 373–376 (1970).
- [7] N. O. Lipari and A. Baldereschi, Angular momentum theory and localized states in solids. Investigation of shallow acceptor states in semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1660–1664 (1970).
- [8] N. O. Lipari and A. Baldereschi, Energy levels of indirect excitons in semiconductors with degenerate bands, *Phys. Rev. B* **3**, 2497–2503 (1971).
- [9] A. Baldereschi and N. O. Lipari, Energy levels of direct excitons in semiconductors with degenerate bands, *Phys. Rev. B* **3**, 439–451 (1971).
- [10] N. O. Lipari and A. Baldereschi, Investigation of acceptor states in semiconductors, in *Proceedings of the 11th International Conference on the Physics of Semiconductors: Warszawa, Poland, July 25–29, 1972* (Elsevier, Amsterdam, 1972), pp. 1009–1015.
- [11] A. Baldereschi and J. J. Hopfield, Binding to isoelectronic impurities in semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 171–174 (1972).
- [12] J. L. Merz, A. Baldereschi, and A. M. Sergent, Effect of uniaxial stress on the binding to isoelectronic impurities in GaP, *Phys. Rev. B* **6**, 3082–3085 (1972).
- [13] N. O. Lipari and A. Baldereschi, Calculations of 2p-exciton states in semiconductors with degenerate bands, *Phys. Rev. B* **6**, 3764–3770 (1972).
- [14] A. Baldereschi, Theory of isoelectronic traps, *J. Lumin.* **7**, 79–91 (1973).
- [15] A. Baldereschi, Mean-value point in the Brillouin zone, *Phys. Rev. B* **7**, 5212–5215 (1973).
- [16] F. Bassani and A. Baldereschi, Theory of magnetic field effects on critical points, *Surf. Sci.* **37**, 304–327 (1973).
- [17] A. Baldereschi and N. O. Lipari, Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors, *Phys. Rev. B* **8**, 2697–2709 (1973).
- [18] J. T. Devreese, E. P. Kartheuser, R. Ward, and A. Baldereschi, Effect of internal excitations of polarons on magneto-optical absorption and cyclotron resonance in polar crystals, *Phys. Status Solidi B* **59**, 629–640 (1973).
- [19] A. Baldereschi, K. Maschke, and M. Schluter, Multi-center k-p expansion for band-structure of GaSe, *Helv. Phys. Acta* **47**, 434–437 (1974).
- [20] A. Baldereschi, Binding to chemical impurities in semiconductors, in *Proceedings of the 12th International*

- Conference on the Physics of Semiconductors: Stuttgart, July 15–19, 1974*, edited by M. H. Pilkuhn (Springer-Verlag, Berlin, 1974), pp. 345–354.
- [21] A. Baldereschi and N. O. Lipari, Cubic contributions to the spherical model of shallow acceptor states, *Phys. Rev. B* **9**, 1525–1539 (1974).
- [22] A. Baldereschi and K. Maschke, Band structure of semiconductor alloys beyond the virtual crystal approximation. effect of compositional disorder on the energy gaps in  $\text{GaP}_{1-x}\text{As}_x$ , *Solid State Commun.* **16**, 99–102 (1975).
- [23] E. Cohen, M. D. Sturge, N. O. Lipari, M. Altarelli, and A. Baldereschi, Acceptorlike excited s states of excitons bound to nitrogen pairs in GaP, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1591–1594 (1975).
- [24] F. Aymerich, A. Baldereschi, F. Meloni, and G. Mula, Electronic band structure of tetrahedral semiconductors, in *Proceedings of the 13th International Conference on the Physics of Semiconductors: Rome, August 30 - September 3, 1976*, edited by F. G. Fumi (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1976), pp. 154–157.
- [25] A. Baldereschi and N. O. Lipari, Interpretation of acceptor spectra in Si and Ge, in *Proceedings of the 13th International Conference on the Physics of Semiconductors: Rome, August 30 - September 3, 1976*, edited by F. G. Fumi (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1976), pp. 595–598.
- [26] F. Meloni, F. Aymerich, G. Mula, and A. Baldereschi, Electronic band structure and charge density in defect tetrahedral crystals, *Helv. Phys. Acta* **49**, 687–691 (1976).
- [27] A. Mercier, J. P. Voitchovsky, E. Mooser, and A. Baldereschi, Photoluminescence in highly excited GaSe, in *Physics of Highly Excited States in Solids: Proceedings of the 1975 Oji Seminar at Tomakomai, Japan, September 9–13, 1975*, edited by M. Ueta and Y. Nishina (Springer-Verlag, Berlin, 1976), pp. 320–326.
- [28] A. Mercier, E. Mooser, J. P. Voitchovsky, and A. Baldereschi, Luminescence of the resonant exciton in  $\text{GaS}_x\text{Se}_{1-x}$ , *J. Lumin.* **12–13**, 285–290 (1976).
- [29] A. Baldereschi and N. O. Lipari, Binding energy of shallow acceptors in group IV elements and III–V compounds, *J. Lumin.* **12–13**, 489–493 (1976).
- [30] S. Nagel, K. Maschke, and A. Baldereschi, Pseudopotential calculation of the electronic valence charge density and the optical dielectric constant of NaCl and MgO, *Phys. Status Solidi B* **76**, 629–632 (1976).
- [31] J. E. Rowe, G. Margaritondo, H. Kasper, and A. Baldereschi, Polarized-light photoelectron spectroscopy of GaSe and GaS with synchrotron radiation, *Solid State Commun.* **20**, 921–924 (1976).
- [32] A. Baldereschi, The electron states in semiconductors, in *Physique et applications des semiconducteurs, XIX Cours AVCP, Zermatt, March 21–26, 1977*, Vol. 35 (1977), pp. 1–76.
- [33] W. Czaja and A. Baldereschi, Isoelectronic trap  $\text{AgBr}:\text{I}$ , *Helv. Phys. Acta* **50**, 606–609 (1977).
- [34] A. Baldereschi, F. Meloni, F. Aymerich, and G. Mula, Electronic properties of the defect-zincblende semiconductor  $\text{CdIn}_4\text{Se}_4$ , *Solid State Commun.* **21**, 113–116 (1977).
- [35] F. Aymerich, G. Mula, A. Baldereschi, F. Meloni, and G. D. Holah, Electronic band structure of ternary II–IV–V<sub>2</sub> compounds, in *3rd International Conference on Ternary Compounds: Edinburgh, April 14–15, 1977*, Vol. 35 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1977), pp. 159–168.
- [36] A. Baldereschi, F. Meloni, F. Aymerich, and G. Mula, Electronic band structure of cubic spinel  $\text{CdIn}_2\text{Se}_4$ , in *3rd International Conference on Ternary Compounds: Edinburgh, April 14–15, 1977*, Vol. 35 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1977), pp. 193–200.
- [37] A. Balzarotti, R. Girlanda, V. Grasso, E. Doni, F. Antonangeli, M. Piacentini, and A. Baldereschi, X-ray photoelectron spectrum and two-dimensional band structure of InSe, *Solid State Commun.* **24**, 327–329 (1977).
- [38] A. Baldereschi, E. Hess, H. Neumann, K.-R. Schulze, and K. Unger, Energy band structure of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, 4709–4717 (1977).
- [39] A. Baldereschi and K. Maschke, Electronic screening of lattice vibrations in covalent semiconductors, in *Proceedings of the International Conference on Lattice Dynamics: Paris, September 5–9, 1977*, edited by M. Balkanski (Flammarion Medecine-Sciences, 1978), pp. 36–38.
- [40] N. O. Lipari, A. Baldereschi, and M. Altarelli, Recent advances in the theory of excitons and impurities in semiconductors, *Iz. Akad. Nauk SSSR Ser. Fiz.* **42**, 1179–1190 (1978).
- [41] W. Andreoni, A. Baldereschi, F. Meloni, and J. C. Phillips, Renormalized orbital radii, *Solid State Commun.* **25**, 245–248 (1978).
- [42] N. O. Lipari and A. Baldereschi, Interpretation of acceptor spectra in semiconductors, *Solid State Commun.* **25**, 665–668 (1978).
- [43] A. Baldereschi and E. Tosatti, Mean-value point and dielectric properties of semiconductors and insulators, *Phys. Rev. B* **17**, 4710–4717 (1978).
- [44] W. Andreoni, A. Baldereschi, and R. Car, Effects of cation order on the energy bands of GaAs–AlAs heterostructures, *Solid State Commun.* **27**, 821–824 (1978).

- [45] Y. Depeursinge, E. Doni, R. Girlanda, A. Baldereschi, and K. Maschke, Electronic properties of the layer semiconductor InSe, *Solid State Commun.* **27**, 1449–1453 (1978).
- [46] A. Baldereschi and E. Tosatti, Dielectric band structure of solids, *Solid State Commun.* **29**, 131–135 (1979).
- [47] M. Altarelli, A. Baldereschi, and W. Y. Hsu, Break-down of the effective-mass approximation for shallow impurity levels in semiconductors, in *Proceedings of the 14th International Conference on the Physics of Semiconductors: Edinburgh, September 4–8, 1978*, edited by B. L. Wilson, Vol. 43 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1979), pp. 399–402.
- [48] D. Bimberg and A. Baldereschi, Non-hydrogenic magnetic behaviour of impurities in semiconductors with degenerate bands: GaAs:C and GaAs:Sn, in *Proceedings of the 14th International Conference on the Physics of Semiconductors: Edinburgh, September 4–8, 1978*, edited by B. L. Wilson, Vol. 43 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1979), pp. 403–406.
- [49] J. J. Forney and A. Baldereschi, Binding energy of excitonic molecules, in *Proceedings of the 14th International Conference on the Physics of Semiconductors: Edinburgh, September 4–8, 1978*, edited by B. L. Wilson, Vol. 43 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1979), pp. 635–638.
- [50] K. Maschke and A. Baldereschi, Electronic response to high symmetry lattice vibrations in covalent semiconductors, in *Proceedings of the 14th International Conference on the Physics of Semiconductors: Edinburgh, September 4–8, 1978*, edited by B. L. Wilson, Vol. 43 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1979), pp. 673–676.
- [51] W. Andreoni, R. Car, and A. Baldereschi, Effects of cation order on the energy bands of GaAs - AlAs heterostructures, in *Proceedings of the 14th International Conference on the Physics of Semiconductors: Edinburgh, September 4–8, 1978*, edited by B. L. Wilson, Vol. 43 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1979), pp. 733–736.
- [52] A. Baldereschi and K. Maschke, Are conduction states in polar semiconductors really cationic?, in *Proceedings of the 14th International Conference on the Physics of Semiconductors: Edinburgh, September 4–8, 1978*, edited by B. L. Wilson, Vol. 43 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1979), pp. 1167–1170.
- [53] A. Baldereschi, R. Car, and E. Tosatti, Local fields in group IV semiconductors, MgO and NaCl, in *Proceedings of the 14th International Conference on the Physics of Semiconductors: Edinburgh, September 4–8, 1978*, edited by B. L. Wilson, Vol. 43 (Inst. of Physics, Bristol, England, 1979), pp. 1207–1210.
- [54] W. Czaja and A. Baldereschi, The isoelectronic trap iodine in AgBr, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12**, 405–424 (1979).
- [55] S. Nagel, A. Baldereschi, and K. Maschke, Tight-binding study of the electronic states in GaSe polytypes, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12**, 1625–1639 (1979).
- [56] W. Andreoni, A. Baldereschi, E. Biémont, and J. C. Phillips, Hard-core pseudopotentials and structural maps of solids, *Phys. Rev. B* **20**, 4814–4823 (1979).
- [57] A. Baldereschi, R. Car, and E. Tosatti, Microscopic local fields in dielectrics, *Solid State Commun.* **32**, 757–760 (1979).
- [58] A. Baldereschi, Excitons and impurities in magnetic fields, in *Theoretical Aspects and New Developments in Magneto-Optics*, edited by J. T. Devreese (Springer, New York, NY, 1980), pp. 291–314.
- [59] A. Baldereschi, K. Maschke, and F. Meloni, Acceptor states and core shifts in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , in *Semi-Insulating III–V Materials: Nottingham 1980*, edited by G. J. Rees (Birkhäuser, Boston, MA, 1980), pp. 288–291.
- [60] A. Baldereschi and F. Meloni, Crystallographic distortion and the interpretation of the UPS spectrum in  $\alpha\text{-CdIn}_2\text{Se}_4$ , *Jpn. J. Appl. Phys.* **19**, 161–164 (1980).
- [61] N. O. Lipari, A. Baldereschi, and M. L. W. Thewalt, Central cell effects on acceptor spectra in Si and Ge, *Solid State Commun.* **33**, 277–279 (1980).
- [62] A. Baldereschi, Local Field Effects in Semiconductors, *J. Phys. Soc. Jpn.* **49**, 155–164 (1980).
- [63] G. Guizzetti, F. Meloni, and A. Baldereschi, Energy bands and optical properties of the random defect semiconductors  $\text{Ga}_2\text{S}_3$ ,  $\text{Ga}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Ga}_2\text{Te}_3$  and  $\text{In}_2\text{Te}_3$ , *J. Phys. Soc. Jpn.* **49**, 93–96 (1980).
- [64] N. O. Lipari, M. L. W. Thewalt, W. Andreoni, and A. Baldereschi, Central cell effects in the shallow acceptor spectra of Si and Ge, *J. Phys. Soc. Jpn.* **49**, 165–168 (1980).
- [65] F. Meloni and A. Baldereschi, Electronic properties of the intermetallic semiconductor CsAu, in *Recent Developments in Condensed Matter Physics*, edited by J. T. Devreese, V. E. van Doren, and J. van Royen, Vol. 3 (Springer, Boston, MA, 1981), pp. 281–286.
- [66] W. Andreoni, A. Baldereschi, N. O. Lipari, and F. Meloni, Atomic number dependent non-local pseudopotentials, *Solid State Commun.* **37**, 837–840 (1981).
- [67] J. Bernholc, S. T. Pantelides, N. O. Lipari, and A. Baldereschi, The electronic structure of deep *sp*-bonded acceptor impurities in semiconductors, *Solid State Commun.* **37**, 705–708 (1981).
- [68] S. Baroni, A. Quattropani, and A. Baldereschi, Rydberg series of valence and core excited inert-gas atoms: Effects of electron relaxation, *Chem. Phys. Lett.* **79**, 509–512 (1981).

- [69] Y. Depeursinge and A. Baldereschi, Polytypism and layer-layer interaction in the III-VI layer semiconductors, *Physica B+C* **105**, 324–328 (1981).
- [70] R. Resta and A. Baldereschi, Dielectric matrices and local fields in polar semiconductors, *Phys. Rev. B* **23**, 6615–6624 (1981).
- [71] J. Baur, K. Maschke, and A. Baldereschi, Relevance of non-linear screening in covalent semiconductors, *Solid State Commun.* **39**, 1297–1300 (1981).
- [72] R. Resta and A. Baldereschi, Local-field effects and zone-center phonons in Si, Ge, GaAs, and ZnSe, *Phys. Rev. B* **24**, 4839–4842 (1981).
- [73] A. Baldereschi, K. Maschke, A. Milchev, R. Pickenhain, and K. Unger, Thomas-Fermi approximation for the valence electron densities in cubic semiconductors and insulators, *Phys. Status Solidi B* **108**, 511–520 (1981).
- [74] R. Resta and A. Baldereschi, Local-field effects and zone-center phonons in polar and covalent cubic semiconductors, *J. Phys. Colloq.* **42**, C6-661–C6-663 (1981).
- [75] M. Posternak, A. Baldereschi, A. J. Freeman, E. Wimmer, and M. Weinert, Free-electron interlayer states in pure and Li-intercalated graphite, *MRS Proceedings* **20**, 117–122 (1982).
- [76] F. Meloni and A. Baldereschi, Electronic properties of  $K_xRb_{1-x}Au$ , an indirect small gap semiconductor, in *Physics of Narrow Gap Semiconductors: Proceedings of the 4th International Conference on Physics of Narrow Gap Semiconductors: Linz, Austria, September 14–17, 1981*, edited by E. Gornik (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1982), pp. 43–48.
- [77] S. Baroni, A. Quattropani, and A. Baldereschi, Influence of electronic relaxation on core and valence excited states of alkaline-earth atoms, *Phys. Rev. A* **25**, 2869–2876 (1982).
- [78] C. Pennetta and A. Baldereschi, Migration energy of interstitial ions in Si and Ge, *Solid State Commun.* **44**, 1397–1400 (1982).
- [79] A. Baldereschi, Shallow impurity states and the effective mass approximation, in *Revista Brasileira de Fisica (Brazil)*, Vols. 13, special issue (1983), pp. 156–184.
- [80] A. Baldereschi and R. Resta, Dielectric properties and lattice dynamics of semiconductors, in *Ab Initio Calculation of Phonon Spectra*, edited by V. E. V. Doren, J. T. Devreese, and P. E. V. Camp (Springer, New York, NY, 1983), pp. 1–24.
- [81] J. Baur, K. Maschke, and A. Baldereschi, Linear and nonlinear electronic response to valence modifications in covalent and ionic crystals, *Phys. Rev. B* **27**, 3720–3729 (1983).
- [82] F. Meloni, E. Mooser, and A. Baldereschi, Bonding nature of conduction states in electron-deficient semiconductors:  $Mg_2Si$ , *Physica B+C* **117–118**, 72–74 (1983).
- [83] M. Posternak, A. Baldereschi, A. J. Freeman, E. Wimmer, and M. Weinert, Prediction of electronic interlayer states in graphite and reinterpretation of alkali bands in graphite intercalation compounds, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 761–764 (1983).
- [84] A. Baldereschi, F. Meloni, and M. Serra, Electronic charge density and internal crystallographic distortion in the chalcopyrite  $ZnGeAs_2$ , *Nuovo Cimento D* **2**, 1643–1649 (1983).
- [85] M. Serra, F. Meloni, and A. Baldereschi, Electronic properties of  $MgIn_2S_4$  and  $CdIn_2S_4$  by the self-consistent pseudopotential method, *Nuovo Cimento D* **2**, 1754–1761 (1983).
- [86] M. Posternak, A. Baldereschi, A. J. Freeman, and E. Wimmer, Prediction of electronic surface states in layered materials: Graphite, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 863–866 (1984).
- [87] P. Bogusławski, G. Papp, and A. Baldereschi, Tetrahedral-site vs hexagonal-site self-interstitial in silicon, *Solid State Commun.* **52**, 155–158 (1984).
- [88] S. Baroni and A. Baldereschi, On the compressed-ion model of cohesion in alkali halides, *J. Phys. Chem. Solids* **46**, 675–679 (1985).
- [89] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Bond lengths and average lattice constant of  $Ga_xIn_{1-x}As$ : A microscopic model, in *Proceedings of the 17th International Conference on the Physics of Semiconductors: San Francisco, California, USA August 6–10, 1984*, edited by J. D. Chadi and W. A. Harrison (Springer, New York, NY, 1985), pp. 939–942.
- [90] A. Catellani, M. Posternak, A. Baldereschi, H. J. F. Janssen, and A. J. Freeman, Electronic interlayer states in hexagonal boron nitride, *Phys. Rev. B* **32**, 6997–6999 (1985).
- [91] S. Massidda and A. Baldereschi, Electron-density distribution in diamond, silicon and germanium under high pressure, *Solid State Commun.* **56**, 431–434 (1985).
- [92] A. Catellani, M. Posternak, and A. Baldereschi, Interlayer and surface electronic states in hexagonal boron nitride, *Vuoto Sci. Technol.* **16**, 21 (1986).
- [93] G. Papp, P. Bogusławski, and A. Baldereschi, Electronic energy of hexagonal site self-interstitial impurity in Si, *Acta Phys. Chem. Szeged* **32**, 9–15 (1986).
- [94] F. Gygi and A. Baldereschi, Self-consistent Hartree-Fock and screened-exchange calculations in solids: Application to silicon, *Phys. Rev. B* **34**, 4405–4408 (1986).



- [95] F. Gygi and A. Baldereschi, Self-consistent Hartree-Fock and screened exchange calculations in semiconductors, in *Proceedings of the 18th International Conference on the Physics of Semiconductors: Stockholm, Sweden, August 11- 5, 1986*, edited by O. Engstrom (World Scientific, Singapore, 1987), pp. 1107-1110.
- [96] G. Papp, P. Bogusławski, and A. Baldereschi, Change change caused in charge density of Si by a hexagonal site self-interstitial, *Acta Phys. Chem. Szeged* **33**, 3-10 (1987).
- [97] M. Peressi and A. Baldereschi, Atomic-scale structure of alkali halide solid solutions, *Solid State Commun.* **63**, 91-95 (1987).
- [98] A. Catellani, M. Posternak, A. Baldereschi, and A. J. Freeman, Bulk and surface electronic structure of hexagonal boron nitride, *Phys. Rev. B* **36**, 6105-6111 (1987).
- [99] A. Baldereschi, S. Baroni, and R. Resta, Band offsets at GaAs/AlAs interfaces: A model and first-principles calculations, *Vuoto Sci. Technol.* **18**, 10 (1988).
- [100] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Crystallographic and Electronic Properties of the  $(\text{GaAs})_1(\text{InAs})_1(001)$  superlattice, in *Excitons in Confined Systems: Proceedings of the International Meeting, Rome, Italy, April 13-16, 1987*, edited by R. D. Sole, A. D'Andrea, and A. Lapicciarella (Springer-Verlag, Berlin, 1988), pp. 151-158.
- [101] G. Papp, P. Bogusławski, and A. Baldereschi, Hexagonal site interstitial related states in silicon, in *New Developments in Semiconductor Physics*, edited by G. Ferenczi and F. Belezny (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988), pp. 157-162.
- [102] S. Baroni, R. Resta, and A. Baldereschi, Electronic structure of polar interfaces from linear-response theory, in *Proceedings of the 19th International Conference on the Physics of Semiconductors: Warszawa, Poland, August 15-19, 1988*, Vol. 1 (Polish Academy of Science, Warsaw, 1988), pp. 525-528.
- [103] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Enhancement of optical-gap bowing induced by long-range order in III-V alloys, in *Proceedings of the 19th International Conference on the Physics of Semiconductors: Warszawa, Poland, August 15-19, 1988*, Vol. 2 (Polish Academy of Science, Warsaw, 1988), pp. 849-852.
- [104] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Thermodynamic instability of lattice-mismatched monolayer superlattices - the role of elastic energy, in *Proceedings of the 19th International Conference on the Physics of Semiconductors: Warszawa, Poland, August 15-19, 1988*, Vol. 2 (Polish Academy of Science, Warsaw, 1988), pp. 853-856.
- [105] N. Binggeli and A. Baldereschi, Prediction of line intensities and interpretation of acceptor spectra in semiconductors, *Solid State Commun.* **66**, 323-328 (1988).
- [106] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Excess elastic energy and the instability of  $(\text{GaAs})_1(\text{InAs})_1(001)$ ,  $\text{Ga}_3\text{InAs}_4$ ,  $\text{GaIn}_3\text{As}_4$  and  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  alloys, *Solid State Commun.* **66**, 679-682 (1988).
- [107] S. Massidda and A. Baldereschi, Interlayer states and chemical bonds in hexagonal  $\text{CaGa}_2$ , *Solid State Commun.* **66**, 855-858 (1988).
- [108] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Microscopic crystallographic properties of semiconductor alloys, *Acta Phys. Pol. A* **73**, 827-837 (1988).
- [109] A. Baldereschi, S. Baroni, and R. Resta, Band offsets in lattice-matched heterojunctions: A model and first-principles calculations for GaAs/AlAs, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 734-737 (1988).
- [110] M. Posternak, A. Baldereschi, S. Massidda, and A. Freeman, Electronic properties of  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_n(001)$  superlattices and of  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  random alloys, in *Proceedings of the Fourteenth International Symposium on Gallium Arsenide and Related Compounds: Heraklion, Crete, September 28 - October 1, 1987*, edited by A. Christou and H. S. Rupprecht, Vol. 91 (1988), pp. 537-540.
- [111] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Energy band structure of  $(\text{GaAs})_1(\text{InAs})_1(001)$  superlattice and of  $\text{Ga}_{4-n}\text{In}_n\text{As}_4$  ( $n=1,3$ ) crystals, in *Proceedings of the Fourteenth International Symposium on Gallium Arsenide and Related Compounds: Heraklion, Crete, September 28 - October 1, 1987*, edited by A. Christou and H. S. Rupprecht, Vol. 91 (1988), pp. 545-548.
- [112] J. B. Xia and A. Baldereschi, Pseudopotential calculation for the electronic-structures of superlattices, *Chin. Phys.* **8**, 1074-1084 (1988).
- [113] A. Baldereschi and N. Binggeli, Two-particle Coulomb systems in a magnetic field, in *Progress in Electron Properties of Solids: Festschrift in Honour of Franco Bassani*, edited by E. Doni, R. Girlanda, G. P. Parravicini, and A. Quattropani (Springer Netherlands, Dordrecht, 1989), pp. 197-209.
- [114] S. Baroni, R. Resta, and A. Baldereschi, Band offsets at semiconductor heterojunctions: bulk or interface properties?, in *Band Structure Engineering in Semiconductor Microstructures*, edited by R. A. Abram and M. Jaros (Springer, New York, NY, 1989), pp. 51-60.
- [115] S. Baroni, R. Resta, A. Baldereschi, and M. Peressi, Can we tune the band offset at semiconductor

- heterojunctions?, in *Spectroscopy of Semiconductor Microstructures*, edited by G. Fasol, A. Fasolino, and P. Lugli (Springer, New York, NY, 1989), pp. 251–271.
- [116] N. Binggeli, A. Baldereschi, and A. Quattropani, One-photon and two-photon acceptor spectra in semiconductors, in *Shallow Impurities in Semiconductors 1988: Proceedings of the Third International Conference: Linköping, Sweden, August 10–12, 1988*, edited by B. Monemar, Vol. 95 (Institute of Physics, Bristol, England, 1989), pp. 521–526.
- [117] C. Pennetta and A. Baldereschi, Positron energy bands and wave functions in a Si crystal, in *Positron Annihilation: Proceedings of the 8th International Conference on Positron Annihilation: Gent, Belgium, August 29 - September 3, 1988*, edited by L. Dorikens-Vanpraet, M. Dorikens, and D. Segers (World Scientific, Singapore, 1989), pp. 693–695.
- [118] M. Peressi, S. Baroni, A. Baldereschi, and R. Resta, Valence-band offset at  $\text{InP}/\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  lattice-matched heterojunctions, *Vuoto Sci. Technol.* **19**, 172 (1989).
- [119] R. Resta, A. Baldereschi, and S. Baroni, Electronic properties of isovalent and heterovalent semiconductor interfaces, *J. Chim. Phys.* **86**, 789–798 (1989).
- [120] R. Resta, S. Baroni, and A. Baldereschi, Theory of band offsets at semiconductor heterojunctions: An *ab initio* linear response approach, *Superlattices Microstruct.* **6**, 31–37 (1989).
- [121] K. A. Mäder, H. von Känel, and A. Baldereschi, *Ab initio* pseudopotential study of  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$  alloys, *Helv. Phys. Acta* **62**, 754–755 (1989).
- [122] A. Baldereschi, G. Ortiz, and R. Resta, Charge transfer vs energy level pinning at semiconductor interfaces, *Helv. Phys. Acta* **62**, 838–839 (1989).
- [123] C. Pennetta and A. Baldereschi, Study of a positive hydrogen ion in crystalline Si, *Helv. Phys. Acta* **62**, 860–861 (1989).
- [124] M. Peressi, S. Baroni, and A. Baldereschi, Valence-band offset at  $\text{InP}/\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  lattice-matched heterojunctions, *Helv. Phys. Acta* **62**, 862–863 (1989).
- [125] V. Fiorentini and A. Baldereschi, Interpretation of double acceptor spectra in Ge, *Solid State Commun.* **69**, 953–958 (1989).
- [126] K. A. Mäder, A. Baldereschi, and H. von Känel, Band structure and instability of  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$  alloys, *Solid State Commun.* **69**, 1123–1126 (1989).
- [127] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Excess elastic energy and the instability of bulk and epitaxial lattice-mismatched monolayer (001) superlattices, *Phys. Rev. B* **39**, 8055–8058 (1989).
- [128] F. Gygi and A. Baldereschi, Quasiparticle energies in semiconductors: Self-energy correction to the local-density approximation, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2160–2163 (1989).
- [129] P. Bogusławski and A. Baldereschi, Optical-gap reduction in the ordered phases of  $\text{GaInAs}$  solid solution, *Solid State Commun.* **70**, 1085–1090 (1989).
- [130] M. Posternak, A. Baldereschi, A. Catellani, and R. Resta, *Ab initio* study of the spontaneous polarization of pyroelectric  $\text{BeO}$ , *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1777–1780 (1990).
- [131] M. Peressi, S. Baroni, A. Baldereschi, and R. Resta, Electronic structure of  $\text{InP}/\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  interfaces, *Phys. Rev. B* **41**, 12106–12110 (1990).
- [132] C. Pennetta and A. Baldereschi, Quantum behaviour of muons in crystalline silicon, *Solid State Commun.* **76**, 825–830 (1990).
- [133] R. Resta, M. Posternak, A. Baldereschi, and A. Catellani, Spontaneous polarization from first-principles: Pyroelectric  $\text{BeO}$ , *Ferroelectrics* **111**, 15–17 (1990).
- [134] G. Ortiz, R. Resta, and A. Baldereschi, Neglecting local-field effects in the band-offset problem, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 10217–10222 (1990).
- [135] K. A. Mäder, H. von Känel, and A. Baldereschi, Interface-confined ordering at  $\text{Si}/\text{Ge}$  strained heterojunctions, *Superlattices Microstruct.* **9**, 15–21 (1991).
- [136] K. A. Mader, H. von Känel, Hans, and A. Baldereschi, Interface-confined ordered compound formation - application to  $\text{Si}/\text{Ge}$  strained heterojunctions, *Helv. Phys. Acta* **64**, 189–192 (1991).
- [137] M. Peressi, S. Baroni, R. Resta, and A. Baldereschi, Tuning band offsets at semiconductor interfaces by intralayer deposition, *Phys. Rev. B* **43**, 7347–7350 (1991).
- [138] C. Pennetta and A. Baldereschi, Mass dependence of the ground state of charged particles in a silicon crystal, *Nuovo Cimento D* **13**, 495–504 (1991).
- [139] H. von Känel, E. Müller, H.-U. Nissen, W. Bacsa, M. Ospelt, K. A. Mäder, R. Stalder, and A. Baldereschi, Silicon heteroepitaxy: interface structure and physical properties, *J. Cryst. Growth* **111**, 889–896 (1991).
- [140] N. Binggeli and A. Baldereschi, Determination of the hole effective masses in  $\text{GaAs}$  from acceptor spectra, *Phys. Rev. B* **43**, 14734–14737 (1991).
- [141] K. A. Mäder and A. Baldereschi, Electronic properties of ultrathin isoelectronic intralayers in semiconductors, *MRS Proceedings* **240**, 597–602 (1991).
- [142] A. Baldereschi, G. Senatore, and I. Oriani, Madelung energy of the Wigner crystal on lattices with non-equivalent sites, *Solid State Commun.* **81**, 21–22 (1992).
- [143] K. A. Mäder and A. Baldereschi, Theory of two-dimensional carriers bound to ultrathin isoelectronic

- impurity intralayers, in *Optics of Excitons in Confined Systems: Proceedings of the International Meeting: Giardini Di Naxos, Italy, September 24-27, 1991*, edited by A. D'Andrea, R. Del Sole, R. Girlanda, and A. Quattropani, Vol. 123 (1992), pp. 403-406.
- [144] M. Marsi, S. La Rosa, Y. Hwu, F. Gozzo, C. Coluzza, A. Baldereschi, G. Margaritondo, J. T. McKinley, S. Baroni, and R. Resta, Microscopic manipulation of homojunction band lineups, *J. Appl. Phys.* **71**, 2048-2050 (1992).
- [145] N. Binggeli and A. Baldereschi, Analysis of acceptor chemical shifts in Ge, *Phys. Rev. B* **45**, 5944-5952 (1992).
- [146] A. Baldereschi, M. Posternak, and R. Resta, Reply to comment on "Ab Initio Study of the Spontaneous Polarization of Pyroelectric BeO," *Phys. Rev. Lett.* **69**, 390-390 (1992).
- [147] V. Fiorentini and A. Baldereschi, Semiempirical self-energy corrections to LDA bands of semiconductors, and a scaling law for the scissor operator, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 5967-5976 (1992).
- [148] G. Biasiol, L. Sorba, G. Bratina, R. Nicolini, A. Franciosi, M. Peressi, S. Baroni, R. Resta, and A. Baldereschi, Microscopic capacitors and neutral interfaces in III-V/IV/III-V semiconductor heterostructures, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1283-1286 (1992).
- [149] S. Massidda, M. Posternak, and A. Baldereschi, Unrestricted Hartree-Fock approach to the insulating behavior of antiferromagnetic  $\text{CaCuO}_2$ , *Phys. Rev. B* **46**, 11705-11708 (1992).
- [150] A. Baldereschi, M. Peressi, S. Baroni, and R. Resta, Semiconductor interfaces, in *Semiconductor Superlattices and Interfaces, CXVII Course of the International School of Physics "Enrico Fermi": Varenna, June 25 - July 5, 1991*, edited by A. Stella and L. Miglio, Vol. 117 (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1993), pp. 59-85.
- [151] A. Baldereschi, R. Resta, M. Peressi, S. Baroni, and K. A. Mader, Engineering of semiconductor heterostructures by ultrathin control layers, in *Semiconductor Interfaces at the Sub-Nanometer Scale. NATO Science Series E*, edited by H. Salemink and M. Pashley, Vol. 243 (Springer-Verlag, Berlin, 1993), pp. 89-103.
- [152] S. Baroni, M. Peressi, R. Resta, and A. Baldereschi, Theory of band offsets at semiconductor heterojunctions, in *Proceedings of the 21st International Conference on the Physics of Semiconductors: Beijing, China, August 10-14, 1992*, edited by P. Jiang and H.-Z. Zheng, Vol. 2 (World Scientific, Singapore, 1993), pp. 689-696.
- [153] R. Resta, M. Posternak, and A. Baldereschi, First-principles theory of polarization in ferroelectrics, in *Materials Theory and Modelling*, edited by J. Broughton, P. Bristowe, and J. Newsam, Vol. 291 (Materials Research Society, Pittsburgh, PA, 1993), pp. 647-652.
- [154] R. Resta, M. Posternak, and A. Baldereschi, Towards a quantum theory of polarization in ferroelectrics: The case of  $\text{KNbO}_3$ , *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1010-1013 (1993).
- [155] S. Scandolo, A. Baldereschi, and F. Capasso, Interband near-infrared second-harmonic generation with very large  $|\chi^{(2)}(2\omega)|$  in  $\text{AlSb/GaSb-InAsSb/AlSb}$  asymmetric quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 3138-3140 (1993).
- [156] A. Baldereschi and M. Peressi, Atomic scale structure of ionic and semiconducting solid solutions, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, B37-B48 (1993).
- [157] K. A. Mäder, H. von Känel, and A. Baldereschi, Electronic structure and bonding in epitaxially stabilized cubic iron silicides, *Phys. Rev. B* **48**, 4364-4372 (1993).
- [158] S. Massidda, M. Posternak, and A. Baldereschi, Hartree-Fock LAPW approach to the electronic properties of periodic systems, *Phys. Rev. B* **48**, 5058-5068 (1993).
- [159] M. Peressi, L. Colombo, R. Resta, S. Baroni, and A. Baldereschi, Structural and electronic properties of strained  $\text{Si/GaAs}$  heterostructures, *Phys. Rev. B* **48**, 12047-12052 (1993).
- [160] M. Peressi, L. Colombo, A. Baldereschi, R. Resta, and S. Baroni, Band offsets engineering at semiconductor heterojunctions, in *Physical Concepts and Materials for Novel Optoelectronic Device Applications II*, edited by F. Beltram and E. Gornik, Vol. 1985 (SPIE, 1993), pp. 84-91.
- [161] S. Scandolo and A. Baldereschi, Tuning heterojunction band offsets by interface  $\delta$ -doping, in *Physical Concepts and Materials for Novel Optoelectronic Device Applications II*, edited by F. Beltram and E. Gornik, Vol. 1985 (SPIE, 1993), pp. 143-150.
- [162] S. Scandolo, A. Baldereschi, and F. Capasso, Very large  $|\chi^{(2)}(2\omega)|$  in the near infrared in  $\text{AlSb/GaSb-InAsSb/AlSb}$  asymmetric quantum wells, in *Physical Concepts and Materials for Novel Optoelectronic Device Applications II*, edited by F. Beltram and E. Gornik, Vol. 1985 (SPIE, 1993), pp. 186-194.
- [163] R. Nicolini, L. Vanzetti, G. Mula, G. Bratina, L. Sorba, A. Franciosi, M. Peressi, S. Baroni, R. Resta, A. Baldereschi, J. E. Angelo, and W. W. Gerberich, Local interface composition and band discontinuities in

- heterovalent heterostructures, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 294–297 (1994).
- [164] T. dell’Orto, J. Almeida, C. Coluzza, A. Baldereschi, G. Margaritondo, M. Cantile, S. Yildirim, L. Sorba, and A. Franciosi, Internal photoemission studies of artificial band discontinuities at buried GaAs(100)/GaAs(100) homojunctions, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2111–2113 (1994).
- [165] M. Posternak, R. Resta, and A. Baldereschi, Role of covalent bonding in the polarization of perovskite oxides: The case of  $\text{KNbO}_3$ , *Phys. Rev. B* **50**, 8911–8914 (1994).
- [166] A. Dal Corso, M. Posternak, R. Resta, and A. Baldereschi, *Ab initio* study of piezoelectricity and spontaneous polarization in ZnO, *Phys. Rev. B* **50**, 10715–10721 (1994).
- [167] M. Di Ventra, G. Papp, C. Coluzza, and A. Baldereschi, Novel tunneling devices: resonant and ballistic quantum diodes, in *Proceedings of the 22nd International Conference on the Physics of Semiconductors: Vancouver, Canada, August 15–19, 1994*, edited by D. J. Lockwood, Vol. 2 (World Scientific, Singapore, 1995), pp. 1600–1603.
- [168] G. Papp, C. Coluzza, M. Di Ventra, A. Baldereschi, G. Margaritondo, and B. Gu, The I-V characteristics of double barrier stair-wells, *Superlattices Microstruct.* **17**, 117–121 (1995).
- [169] R. Resta, M. Posternak, and A. Baldereschi, Quantum mechanism of polarization in perovskites, *Ferroelectrics* **164**, 153–159 (1995).
- [170] S. Massidda, A. Continenza, M. Posternak, and A. Baldereschi, Band-structure picture for MnO reexplored: A model GW calculation, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2323–2326 (1995).
- [171] G. Papp, M. Di Ventra, C. Coluzza, A. Baldereschi, and G. Margaritondo, Current rectification through a single-barrier resonant tunneling quantum structure, *Superlattices Microstruct.* **17**, 273 (1995).
- [172] V. Fiorentini and A. Baldereschi, Dielectric scaling of the self-energy scissor operator in semiconductors and insulators, *Phys. Rev. B* **51**, 17196–17198 (1995).
- [173] J. Almeida, T. dell’Orto, C. Coluzza, A. Fassò, A. Baldereschi, G. Margaritondo, A. Rudra, H. J. Buhlmann, and M. Ilegems, Inhomogeneous and temperature-dependent p-InGaAs/n-InP band offset modification by silicon  $\delta$  doping: An internal photoemission study, *J. Appl. Phys.* **78**, 3258–3261 (1995).
- [174] T. Sengstag, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Anomalies in the pressure dependence of the effective charge in cubic semiconductors, *Phys. Rev. B* **52**, R8613–R8616 (1995).
- [175] S. Massidda, R. Resta, M. Posternak, and A. Baldereschi, Polarization and dynamical charge of ZnO within different one-particle schemes, *Phys. Rev. B* **52**, R16977–R16980 (1995).
- [176] R. Resta, S. Massidda, M. Posternak, and A. Baldereschi, Polarization, dynamical charge, and bonding in partly covalent polar insulators, in *Materials Theory, Simulations, and Parallel Algorithms: November 27 – December 1, 1995, Boston, Massachusetts, U.S.A.*, edited by E. Kaxiras, J. Joannopoulos, P. Vashishta, and R. Kalia, Vol. 408 (Materials Research Society, Pittsburgh, PA, 1996), pp. 9–12.
- [177] A. Dal Corso, A. Pasquarello, A. Baldereschi, and R. Car, Generalized-gradient approximations to density-functional theory: A comparative study for atoms and solids, *Phys. Rev. B* **53**, 1180–1185 (1996).
- [178] M. E. Lazzouni, M. Peressi, and A. Baldereschi, Valence-band offset at the Si/GaP (110) interface, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 75–77 (1996).
- [179] M. Di Ventra, M. Peressi, and A. Baldereschi, Strain dependence of band offsets at lattice-mismatched interfaces, in *Proceedings of the 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors: Berlin, Germany, July 21–26, 1996*, edited by M. Scheffler and R. Zimmermann, Vol. 2 (World Scientific, Singapore, 1996), pp. 987–990.
- [180] J. Bardi, C. Berthod, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Schottky barrier engineering at Al/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As junctions, in *Proceedings of the 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors: Berlin, Germany, July 21–26, 1996*, edited by M. Scheffler and R. Zimmermann, Vol. 2 (World Scientific, Singapore, 1996), pp. 1003–1006.
- [181] M. Di Ventra and A. Baldereschi, Near band-edge resonant states in GaAs/(AlAs)<sub>n</sub>/GaAs with  $n=1,2$ : The role of *d*-orbitals, in *Proceedings of the 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors: Berlin, Germany, July 21–26, 1996*, edited by M. Scheffler and R. Zimmermann, Vol. 3 (World Scientific, Singapore, 1996), pp. 1719–1722.
- [182] M. Di Ventra, M. Peressi, and A. Baldereschi, Role of structural and chemical contributions to valence-band offsets at strained-layer heterojunctions: The GaAs/GaP (001) case, *J. Vac. Sci. Technol. B* **14**, 2936–2939 (1996).
- [183] C. Berthod, J. Bardi, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Schottky barrier tuning at Al/GaAs(100) junctions, *J. Vac. Sci. Technol. B* **14**, 3000–3007 (1996).
- [184] M. Di Ventra, M. Peressi, and A. Baldereschi, Chemical and structural contributions to the valence-band offset at GaP/GaAs heterojunctions, *Phys. Rev. B* **54**, 5691–5695 (1996).

- [185] C. Berthod, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Local interface dipoles and the tuning of the Al/GaAs(100) Schottky-barrier height with ultrathin Si interlayers, *Europhys. Lett.* **36**, 67–72 (1996).
- [186] M. Di Ventra, G. Papp, C. Coluzza, A. Baldereschi, and P. A. Schulz, Indented barrier resonant tunneling rectifiers, *J. Appl. Phys.* **80**, 4174–4176 (1996).
- [187] J. Bardi, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Pressure and alloy-composition dependence of Al/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As(100) Schottky barriers, *Phys. Rev. B* **54**, R11102–R11105 (1996).
- [188] M. Peressi, F. Favot, and A. Baldereschi, Electronic states at ZnSe/Ge interface: A theoretical study, in *Proceedings of the VI Italian-Swiss Workshop: Advances in Computational Materials Science: S. Margherita Di Pula (CA), September 28 - October 2, 1996*, edited by V. Fiorentini and F. Meloni, Vol. 55 (1997), pp. 13–22.
- [189] P. Fernández, A. Dal Corso, A. Baldereschi, and F. Mauri, First-principles Wannier functions of silicon and gallium arsenide, *Phys. Rev. B* **55**, R1909–R1913 (1997).
- [190] P. Ferrara, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Band discontinuities in zinc-blende and wurtzite AlN/SiC heterostructures, *Phys. Rev. B* **55**, R7418–R7426 (1997).
- [191] S. Massidda, A. Continenza, M. Posternak, and A. Baldereschi, Quasiparticle energy bands of transition-metal oxides within a model GW scheme, *Phys. Rev. B* **55**, 13494–13502 (1997).
- [192] M. Posternak, A. Baldereschi, H. Krakauer, and R. Resta, Non-nominal value of the dynamical effective charge in alkaline-earth oxides, *Phys. Rev. B* **55**, R15983–R15986 (1997).
- [193] S. Massidda, A. Continenza, M. Posternak, and A. Baldereschi, Self-energy corrections in transition metal oxides, *Physica B: Condens. Matter* **237–238**, 324–327 (1997).
- [194] A. Dal Corso and A. Baldereschi, *Ab initio* study of the structural and electronic properties of adsorbates: Co on Cu (001), *Surf. Rev. Lett.* **04**, 885–889 (1997).
- [195] A. Dal Corso, A. Pasquarello, and A. Baldereschi, Density-functional perturbation theory for lattice dynamics with ultrasoft pseudopotentials, *Phys. Rev. B* **56**, R11369–R11372 (1997).
- [196] U. Tinivella, M. Peressi, and A. Baldereschi, Random pseudobinary ionic alloys: lattice energy and structural properties, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 11141–11149 (1997).
- [197] N. Binggeli, P. Ferrara, and A. Baldereschi, Band offsets in GaN/AlN and AlN/SiC heterojunctions, *MRS Proceedings* **482**, 916–921 (1997).
- [198] A. Dal Corso and A. Baldereschi, *Ab initio* study of the vibrational properties of adsorbates: CO on Cu(001), in *Proceedings of the VII Italian-Swiss Workshop: Advances in Computational Materials Science - II: S. Margherita Di Pula (CA), September 19–23, 1997*, edited by V. Fiorentini and F. Meloni, Vol. 61 (Editrice Compositori/Italian Physical Society, 1998), pp. 27–34.
- [199] M. Fornari, M. Peressi, S. de Gironcoli, and A. Baldereschi, Electronic properties of floating bonds in a-Si and a-Si:H, in *Proceedings of the VII Italian-Swiss Workshop: Advances in Computational Materials Science - II: S. Margherita Di Pula (CA), September 19–23, 1997*, edited by V. Fiorentini and F. Meloni, Vol. 61 (Editrice Compositori/Italian Physical Society, 1998), pp. 79–86.
- [200] A. Bitz, M. Di Ventra, A. Baldereschi, J. L. Staehli, F. Pietag, V. Gottschalch, H. Rhan, and R. Schwabe, Optical properties of ultrathin GaAs layers embedded in Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, *Phys. Rev. B* **57**, 2426–2430 (1998).
- [201] M. Di Ventra and A. Baldereschi, Near-band-edge resonant states of AlAs monolayers embedded in bulk GaAs: The role of *d* symmetries, *Phys. Rev. B* **57**, 3733–3736 (1998).
- [202] M. Peressi and A. Baldereschi, Structural and electronic properties of Ga<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, *J. Appl. Phys.* **83**, 3092–3095 (1998).
- [203] M. Lazzarino, G. Scarel, S. Rubini, G. Bratina, L. Sorba, A. Franciosi, C. Berthod, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Al/ZnSe(100) Schottky-barrier height versus initial ZnSe surface reconstruction, *Phys. Rev. B* **57**, R9431–R9434 (1998).
- [204] C. Berthod, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Formation energy, lattice relaxation, and electronic structure of Al/Si/GaAs(100) junctions, *Phys. Rev. B* **57**, 9757–9762 (1998).
- [205] M. Peressi, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Band engineering at interfaces: Theory and numerical experiments, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31**, 1273–1299 (1998).
- [206] C. J. Fall, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Anomaly in the anisotropy of the aluminum work function, *Phys. Rev. B* **58**, R7544–R7547 (1998).
- [207] P. Fernández, A. Dal Corso, and A. Baldereschi, *Ab initio* study of the dielectric properties of silicon and gallium arsenide using polarized Wannier functions, *Phys. Rev. B* **58**, R7480–R7483 (1998).
- [208] M. Fornari, N. Marzari, M. Peressi, and A. Baldereschi, Wannier functions characterization of floating bonds in a-Si, *Computational Materials Science* **20**, 337–342 (1999).



- [209] C. J. Fall, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Deriving accurate work functions from thin-slab calculations, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 2689–2696 (1999).
- [210] S. Massidda, M. Posternak, A. Baldereschi, and R. Resta, Noncubic behavior of antiferromagnetic transition-metal monoxides with the rocksalt structure, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 430–433 (1999).
- [211] J. Bardi, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Structural and compositional dependences of the Schottky barrier in  $\text{Al}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  (100) and (110) junctions, *Phys. Rev. B* **59**, 8054–8064 (1999).
- [212] M. Fornari, M. Peressi, S. de Gironcoli, and A. Baldereschi, Floating bonds and gap states in a-Si and a-Si:H from first principles calculations, *Europhys. Lett.* **47**, 481–486 (1999).
- [213] R. Haerle, G. Galli, and A. Baldereschi, Structural models of amorphous carbon surfaces, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 1718–1720 (1999).
- [214] F. Favot, A. Dal Corso, and A. Baldereschi, *Ab initio* study of the structure of  $\text{Pd}(110)\text{-c}(4\times 2)\text{-benzene}$ , *Surf. Rev. Lett.* **06**, 903–906 (1999).
- [215] R. Haerle, A. Baldereschi, and G. Galli, Structural models of amorphous carbon and its surfaces by tight-binding molecular dynamics, *J. Non-Cryst. Solids* **266–269**, 740–745 (2000).
- [216] J. Bardi, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Existence of localized interface states in metal/GaAs(100) junctions: Au versus Al contacts, *Phys. Rev. B* **61**, 5416–5422 (2000).
- [217] C. J. Fall, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Work-function anisotropy in noble metals: Contributions from *d* states and effects of the surface atomic structure, *Phys. Rev. B* **61**, 8489–8495 (2000).
- [218] M. Peressi, M. Fornari, S. de Gironcoli, L. Desantis, and A. Baldereschi, Coordination defects in amorphous silicon and hydrogenated amorphous silicon: A characterization from first-principles calculations, *Philos. Mag. B* **80**, 515–521 (2000).
- [219] C. Berthod, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Schottky barrier tuning with heterovalent interlayers:  $\text{Al}/\text{Ge}/\text{GaAs}$  versus  $\text{Al}/\text{Si}/\text{GaAs}$ , *J. Vac. Sci. Technol. B* **18**, 2114–2118 (2000).
- [220] F. Favot, A. Dal Corso, and A. Baldereschi, Adsorption geometry of benzene on  $\text{Pd}(110)$ : Results of first-principles calculations, *Europhys. Lett.* **52**, 698–704 (2000).
- [221] F. Favot, A. Dal Corso, and A. Baldereschi, CO adsorbed on  $\text{Cu}(001)$ : A comparison between local density approximation and Perdew, Burke, and Ernzerhof generalized gradient approximation, *J. Chem. Phys.* **114**, 483–488 (2001).
- [222] F. Favot, A. Dal Corso, and A. Baldereschi, *Ab initio* study of CO adsorption on  $\text{Ni}(110)$ : Effects on surface magnetism at low coverage, *Phys. Rev. B* **63**, 115416 (2001).
- [223] M. Fornari, N. Marzari, M. Peressi, and A. Baldereschi, Wannier functions characterization of floating bonds in a-Si, *Comput. Mater. Sci.* **20**, 337–342 (2001).
- [224] S. Rubini, E. Pelucchi, M. Lazzarino, D. Kumar, A. Franciosi, C. Berthod, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Ideal unreactive metal/semiconductor interfaces: The case of  $\text{Zn}/\text{ZnSe}(001)$ , *Phys. Rev. B* **63**, 235307 (2001).
- [225] N. Binggeli, P. Ferrara, and A. Baldereschi, Band-off-set trends in nitride heterojunctions, *Phys. Rev. B* **63**, 245306 (2001).
- [226] C. Sgiarovello, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Influence of surface morphology on the  $\text{Si}(100)$  and  $(111)$  ionization potentials, *Phys. Rev. B* **64**, 195305 (2001).
- [227] M. Vladimirova, M. Stengel, A. De Vita, A. Baldereschi, M. Böhringer, K. Morgenstern, R. Berndt, and W.-D. Schneider, Supramolecular self-assembly and selective step decoration on the  $\text{Au}(111)$  surface, *Europhys. Lett.* **56**, 254–260 (2001).
- [228] R. Haerle, A. Pasquarello, and A. Baldereschi, First-principle study of C 1s core-level shifts in amorphous carbon, *Comput. Mater. Sci.* **22**, 67–72 (2001).
- [229] R. Haerle, E. Riedo, A. Pasquarello, and A. Baldereschi,  $sp^2/sp^3$  hybridization ratio in amorphous carbon from C 1s core-level shifts: X-ray photoelectron spectroscopy and first-principles calculation, *Phys. Rev. B* **65**, 045101 (2001).
- [230] C. J. Fall, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Theoretical maps of work-function anisotropies, *Phys. Rev. B* **65**, 045401 (2001).
- [231] C. J. Fall, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Work functions at facet edges, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 156802 (2002).
- [232] M. Posternak, A. Baldereschi, S. Massidda, and N. Marzari, Maximally localized Wannier functions in antiferromagnetic  $\text{MnO}$  within the FLAPW formalism, *Phys. Rev. B* **65**, 184422 (2002).
- [233] C. J. Fall, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Work functions and surface charges at metallic facet edges, *Phys. Rev. B* **66**, 075405 (2002).
- [234] M. Peressi, F. Favot, G. Cangiani, and A. Baldereschi, Interface states at  $\text{ZnSe}/\text{Ge}$  heterojunctions: The role of atomic interdiffusion and disorder, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 5171–5173 (2002).

- [235] A. Debernardi, M. Peressi, and A. Baldereschi, Electronic properties of Mn compounds under strain, *Comput. Mater. Sci.* **27**, 175–180 (2003).
- [236] T. Maxisch, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Intermetallic bonds and midgap interface states at epitaxial Al/GaAs(001) junctions, *Phys. Rev. B* **67**, 125315 (2003).
- [237] T. Maxisch, A. Baldereschi, and N. Binggeli, Midgap interface states at epitaxial Al/AlAs(001) heterojunctions, *Solid State Commun.* **126**, 265–268 (2003).
- [238] C. Berthod, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Schottky barrier heights at polar metal/semiconductor interfaces, *Phys. Rev. B* **68**, 085323 (2003).
- [239] M. Stengel, A. De Vita, and A. Baldereschi, Adatom-Vacancy Mechanisms for the  $C_{60}/Al(111)-(6\times6)$  Reconstruction, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 166101 (2003).
- [240] A. Debernardi, M. Peressi, and A. Baldereschi, Structural and electronic properties of NiMnSb Heusler compound and its interface with GaAs, *Mat. Sci. Eng. C* **23**, 743–746 (2003).
- [241] A. Debernardi, M. Peressi, and A. Baldereschi, Magnetic phase transition in strained MnAs compound, *Mat. Sci. Eng. C* **23**, 1059–1062 (2003).
- [242] C. Sgiarovello, N. Binggeli, and A. Baldereschi, Surface morphology and ionization potentials of polar semiconductors: The case of GaAs, *Phys. Rev. B* **69**, 035320 (2004).
- [243] G. Cangiani, Alfonso Baldereschi, M. Posternak, and H. Krakauer, Born charge differences of  $TiO_2$  polymorphs: Multipole expansion of Wannier charge densities, *Phys. Rev. B* **69**, 121101 (2004).
- [244] E. Pelucchi, S. Rubini, B. Bonanni, A. Franciosi, A. Zaoui, M. Peressi, A. Baldereschi, D. De Salvador, M. Berti, A. Drigo, and F. Romanato, Structural and electronic properties of wide band gap  $Zn_{1-x}Mg_xSe$  alloys, *J. Appl. Phys.* **95**, 4184–4192 (2004).
- [245] M. Vladimirova, G. Trimarchi, A. Baldereschi, J. Weckesser, K. Kern, J. V. Barth, and A. De Vita, Substrate-induced supramolecular ordering of functional molecules: theoretical modelling and STM investigation of the PEBA/Ag(111) system, *Acta Mater.* **52**, 1589–1595 (2004).
- [246] A. Debernardi, M. Peressi, and A. Baldereschi, Spin polarization and band alignments at NiMnSb/GaAs interface, *Comput. Mater. Sci.* **33**, 263–268 (2005).
- [247] T. Maxisch and A. Baldereschi, *Ab initio* study of interface states and Schottky barriers at metal contacts to GaN(001), *Phys. Status Solidi C* **2**, 2540–2543 (2005).
- [248] M. Pivetta, F. Patthey, M. Stengel, A. Baldereschi, and W.-D. Schneider, Local work function Moiré pattern on ultrathin ionic films: NaCl on Ag(100), *Phys. Rev. B* **72**, 115404 (2005).
- [249] A. Debernardi, A. Baldereschi, and M. Fanciulli, Computation of the Stark effect in P impurity states in silicon, *Phys. Rev. B* **74**, 035202 (2006).
- [250] M. Posternak, A. Baldereschi, E. J. Walter, and H. Krakauer, Wannier functions and Born charge tensors of brookite  $TiO_2$ , *Phys. Rev. B* **74**, 125113 (2006).
- [251] Ž. Šljivančanin, Z. S. Popović, F. R. Vukajlović, and A. Baldereschi, Atomic structure and spin magnetism of self-assembled Co nanowires on Pt(332), *Phys. Rev. B* **74**, 134412 (2006).
- [252] V. Stevanović, Ž. Šljivančanin, and A. Baldereschi, Effect of carbon adsorption on the isomer stability of  $Ir_4$  clusters, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 165501 (2007).
- [253] X. Ding, L. De Rogatis, E. Vesselli, A. Baraldi, G. Comelli, R. Rosei, L. Savio, L. Vattuone, M. Rocca, P. Fornasiero, F. Ancilotto, A. Baldereschi, and M. Peressi, Interaction of carbon dioxide with Ni(110): A combined experimental and theoretical study, *Phys. Rev. B* **76**, 195425 (2007).
- [254] X. Ding, L. De Rogatis, E. Vesselli, A. Baraldi, G. Corrielli, R. Rosei, L. Savio, L. Vattuone, M. Rocca, P. Fornasiero, F. Ancilotto, A. Baldereschi, and M. Peressi, Interaction of carbon dioxide with Ni(110): A combined experimental and theoretical study, *Frontiers of Fundamental and Computational Physics: 9th International Symposium* **1018**, 197–200 (2008).
- [255] M. Peressi, A. Baldereschi, and S. Baroni, *Ab initio* studies of structural and electronic properties, in *Characterization of Semiconductor Heterostructures and Nanostructures*, edited by C. Lamberti (Elsevier, 2008), pp. 17–54.
- [256] E. Vesselli, L. De Rogatis, X. Ding, A. Baraldi, L. Savio, L. Vattuone, M. Rocca, P. Fornasiero, M. Peressi, A. Baldereschi, R. Rosei, and G. Comelli, Carbon dioxide hydrogenation on Ni(110), *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 11417–11422 (2008).
- [257] C. Y. Ouyang, Ž. Šljivančanin, and A. Baldereschi, First-principles study of  $\gamma-Al_2O_3$  (100) surface, *Phys. Rev. B* **79**, 235410 (2009).
- [258] M. Posternak, A. Baldereschi, and B. Delley, Dissociation of water on anatase  $TiO_2$  nanoparticles: The role of undercoordinated Ti atoms at edges, *J. Phys. Chem. C* **113**, 15862–15867 (2009).
- [259] E. Vesselli, M. Rizzi, L. De Rogatis, X. Ding, A. Baraldi, G. Comelli, L. Savio, L. Vattuone, M. Rocca, P. Fornasiero, A. Baldereschi, and M. Peressi, Hydrogen-assisted transformation of  $CO_2$  species on Ni(110) on nickel: The role of formate and carbon monoxide, *J. Phys. Chem. Lett.* **1**, 402–406 (2009).

- [260] F. R. Vukajlović, Z. S. Popović, A. Baldereschi, and Ž. Šljivančanin, Effect of adsorbed H atoms on magnetism in monoatomic Fe wires at Ir(100), *Phys. Rev. B* **81**, 085425 (2010).
- [261] C. Y. Ouyang, X. M. Zeng, Ž. Šljivančanin, and A. Baldereschi, Oxidation states of Mn atoms at clean and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-covered LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(001) surfaces, *J. Phys. Chem. C* **114**, 4756–4759 (2010).
- [262] V. Stevanović, Ž. Šljivančanin, and A. Baldereschi, Role of adsorbed H, C, O, and CO on the atomic structure of free and MgO(100)-supported Ir<sub>4</sub> clusters: An *ab initio* study, *J. Phys. Chem. C* **114**, 15653–15660 (2010).
- [263] C. Dri, A. Peronio, E. Vesselli, C. Africh, M. Rizzi, A. Baldereschi, M. Peressi, and G. Comelli, Imaging and characterization of activated CO<sub>2</sub> species on Ni(110), *Phys. Rev. B* **82**, 165403 (2010).
- [264] C. Y. Ouyang, Ž. Šljivančanin, and A. Baldereschi, Transition from Mn<sup>4+</sup> to Mn<sup>3+</sup> induced by surface reconstruction at λ-MnO<sub>2</sub>(001), *J. Chem. Phys.* **133**, 204701 (2010).
- [265] G. Tomba, M. Stengel, W.-D. Schneider, A. Baldereschi, and A. De Vita, Supramolecular self-assembly driven by electrostatic repulsion: The 1D aggregation of rubrene pentagons on Au(111), *ACS Nano* **4**, 7545–7551 (2010).
- [266] M. Rizzi, S. Furlan, M. Peressi, A. Baldereschi, C. Dri, A. Peronio, C. Africh, P. Lacovig, E. Vesselli, and G. Comelli, Tailoring bimetallic alloy surface properties by kinetic control of self-diffusion processes at the nanoscale, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 16827–16833 (2012).
- [267] M. Peressi and A. Baldereschi, Chapter 2 - *Ab initio* Studies of Structural and Electronic Properties, in *Characterization of Semiconductor Heterostructures and Nanostructures (Second Edition)*, edited by C. Lamberti and G. Agostini (Elsevier, Oxford, 2013), pp. 21–73.
- [268] E. Vesselli, E. Monachino, M. Rizzi, S. Furlan, X. Duan, C. Dri, A. Peronio, C. Africh, P. Lacovig, A. Baldereschi, G. Comelli, and M. Peressi, Steering the chemistry of carbon oxides on a NiCu catalyst, *ACS Catal.* **3**, 1555–1559 (2013).
- [269] M. Posternak, S. Berner, A. Baldereschi, and B. Delley, Enhancing hydrophilicity of anatase TiO<sub>2</sub> surfaces by deposition of alkaline earths: The case of Ca, *J. Phys. Chem. C* **117**, 26013–26020 (2013).
- [270] J. A. Olmos-Asar, E. Vesselli, A. Baldereschi, and M. Peressi, Self-seeded nucleation of Cu nanoclusters on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni<sub>3</sub>Al(111): an *ab initio* investigation, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 23134–23142 (2014).
- [271] J. A. Olmos-Asar, E. Vesselli, A. Baldereschi, and M. Peressi, Towards optimal seeding for the synthesis of ordered nanoparticle arrays on alumina/Ni<sub>3</sub>Al(111), *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 28154–28161 (2015).
- [272] J. A. Olmos-Asar, E. Monachino, C. Dri, A. Peronio, C. Africh, P. Lacovig, G. Comelli, A. Baldereschi, M. Peressi, and E. Vesselli, CO on supported Cu nanoclusters: Coverage and finite size contributions to the formation of carbide via the Boudouard process, *ACS Catal.* **5**, 2719–2726 (2015).
- [273] E. Vesselli, M. Rizzi, S. Furlan, X. Duan, E. Monachino, C. Dri, A. Peronio, C. Africh, P. Lacovig, A. Baldereschi, G. Comelli, and M. Peressi, Tunability of the CO adsorption energy on a Ni/Cu surface: Site change and coverage effects, *J. Chem. Phys.* **146**, 224707 (2017).
- [274] M. Posternak, A. Baldereschi, and B. Delley, Adsorption of HPO<sub>x</sub> and CaHPO<sub>x</sub> (x=1, ..., 4) molecules on anatase TiO<sub>2</sub>(001) surfaces, *Surf. Sci.* **679**, 93–98 (2019).

## Nécrologie

Nous reproduisons avec permission ci-dessous la nécrologie publiée online dans *Physics Today*, de l'American Institute of Physics, le 20 août 2024.

### Alfonso Baldereschi

(24 September 1946 – 22 April 2024)

**The admired scientist and mentor was a pioneer of computational materials science.**

Wanda Andreoni, Erio Tosatti, and Nunzio O. Lipari

**DOI:** <https://doi.org/10.1063/pt.qsyu.hrme>

With profound sadness we have learned that our colleague, collaborator, and friend Alfonso Baldereschi passed away on 22 April 2024 in Trieste, Italy. He was an emeritus professor of physics both at the Federal Institute of Technology (EPFL) in Lausanne, Switzerland, and at the University of Trieste.

After his studies at the University of Milan and the prestigious Scuola Normale Superiore in Pisa (Italy), where he was largely recognized as the brightest student of Franco Bassani's influential school, Alfonso moved to the US. There, he was first a research associate at the University of Illinois Urbana (1969). Soon after (1971), Alfonso was appointed as a technical staff member at the Bell Laboratories, New Jersey, one of the most prestigious research centers in the world: a stellar career path.

He soon became well-known worldwide for his proposal (1972) that the calculation of physical

quantities such as the electron density, requiring averaging over the Brillouin zone, could be reduced to the value at a special single k-point. He named it the mean value point, but since the very beginning it has been known as the Baldereschi point. In the early 1970s, computer capabilities were extremely limited. By rendering the calculation of the electron density affordable, the Baldereschi point technique (later extended by others) opened up the possibility not only of representing the distribution of the charge density of real materials, but also of self-consistent iterative evaluations.

Due to family reasons, in 1973 Alfonso had to return to Europe and settled down in Lausanne, where the EPFL had recently been established (1969). There, Alfonso pioneered what we now call computational materials science, based on advanced theoretical methods and the knowledge of the electronic structure. His reputation was instrumental in rendering the EPFL a major center on the map of condensed-matter-physics research. In particular, his presence soon started to attract many researchers to either join or visit the EPFL. Already in 1978, the International Conference on the Physics of Semiconductors was known by many as the Baldereschi conference.

Over the years, a large group of collaborators shared the privilege of working with him, benefiting from his vast and deep knowledge, and also from his generosity and amiability.

In 1981 he accepted the chair of structure of matter at the University of Trieste, while still continuing to teach at the bachelor, master's, and PhD levels at the EPFL in Lausanne. There, he held the chair of computational physics and also served periods as director of the Institute of Theoretical Physics and of the Physics Department.

Alfonso was steadily engaged in supporting any initiative for the diffusion of computational condensed-matter research. In particular, he founded (and directed at various stages) the Institute for Computational Materials Science (IRRMA), which fostered unprecedented collaborations among the EPFL and the Universities of Geneva, Neuchâtel, and Fribourg.

Alfonso's research was devoted both to the development of elegant computational methods and to diverse important applications. His special focus was on the electronic, optical, and dielectric properties of materials such as (elemental and compound) semiconductors and amorphous silica, thus unraveling the effects of impurities as well as of compositional and structural disorder. But his scientific span went way beyond that, including, for example, catalysis.

Alfonso and early collaborators developed the first comprehensive approach to impurity as well as exciton levels in semiconductors, with predictive results in agreement with experiments. He pioneered the quantitative calculation of band offsets at semiconductor interfaces, of piezoelectric and ferroelectric polarization, and of surface physico-chemical

processes from first principles. He discovered the interlayer states, of great importance to 2D materials like graphite and graphene, as well as 1D materials like polyethylene. He carried out the first quantitative calculations of nonlocal dielectric screening in crystals. And much more. A special feature of Alfonso's papers was to accompany the presentation of complex and accurate calculations with either a simpler scheme that captured the fundamental physics or a model that explained the results more clearly. That transformation of a physical mechanism from specific to universal is the hallmark of great masters.

Alfonso's personality, his human side, and his sense of humor were, as everything else, also special. His discussions and lectures, from his student times in Pisa, were as enthralling in their content as they were undetermined in time and duration. Simply, every aspect had to be unraveled inside and out to satisfaction, never mind how long it took.

Alfonso has been recognized by generations of students as an absolutely unique teacher: crystal clear in his explanations, stimulating, enthusiastic, and charismatic. Indeed, he brought to teaching the same devotion, passion, and unmitigated honesty that he did to research.

Alfonso's outstanding contributions to science, the physics schools he created in Lausanne and Trieste, stand as landmarks in our field. All that, coupled with his generosity and great kindness to all his colleagues, collaborators, and students will never be forgotten.



## Affiliations des auteurs

L'astérisque \* indique qu'il s'agit de la dernière affiliation académique.

**Altarelli Massimo** – Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie, 22761 Hamburg, Deutschland

**Andreani Lucio Claudio** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Pavia, 27100 Pavia, Italia

**Andreoni Wanda** – Institut de physique (IPHYS), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse

**Bachelet Giovanni** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", 00185 Roma, Italia\*

**Baraldi Alessandro** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34151 Trieste, Italia

**Bardi Julien** – UBS Group AG, 8001 Zürich, Schweiz

**Baroni Stefano** – Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), 34136 Trieste, Italia

**Benatti Fabio** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34151 Trieste, Italia

**Berthod Christophe** – Département de physique de la matière quantique, Université de Genève, 1211 Genève, Suisse

**Blasetti Cecilia** – Attività Gestione Progetti, Elettra – Sincrotrone Trieste S.C.p.A. 34149 Basovizza, Trieste, Italia

**Boguslawski Piotr** – Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, 02-668 Warszawa, Polska

**Braicovich Lucio** – Dipartimento di Fisica, Politecnico di Milano, 20133 Milano, Italia; European

Synchrotron Radiation Facility (ESRF), 38000 Grenoble, France\*

**Cangiani Giovanni** – **Systèmes d'informations**, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse

**Capizzi Mario** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", 00185 Roma, Italia\*

**Car Roberto** – Department of Chemistry, Princeton University, NJ 08544, USA

**Catellani Alessandra** – Istituto Nanoscienze, Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR-NANO), 41125 Modena, Italia

**Claudet Suzanne** – Institut de théorie des phénomènes physiques, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse\*

**Comelli Giovanni** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34127 Trieste, Italia

**Coslovich Daniele** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34127 Trieste, Italia

**Dal Corso Andrea** – Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), 34136 Trieste, Italia

**Debernardi Alberto** – Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per la Microelettronica e Microsistemi (IMM), 20864 Agrate Brianza (MB), Italia

**de Gironcoli Stefano** – Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), 34136 Trieste, Italia

- Dell'Anna Luca** – Dipartimento di Fisica e Astronomia, Università degli Studi di Padova, 35121 Padova, Italia
- De Los Rios Paolo** – Institut de physique (IPHYS), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse
- Di Ventra Massimiliano** – Department of Physics, University of California San Diego, La Jolla, CA 92093, USA
- Favot Fabio** – Springer Nature Group, Cambridge CB1 3XJ, United Kingdom
- Fiorentini Vincenzo** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Cagliari, 09042 Cagliari, Italia
- Foffi Giuseppe** – Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de physique des solides, 91405 Orsay, France
- Galli Giulia** – Pritzker School of Molecular Engineering, University of Chicago, Chicago, IL 60637, USA
- Giannozzi Paolo** – Dipartimento di Scienze Matematiche, Informatiche e Fisiche, Università degli Studi di Udine, 33100 Udine, Italia
- Girlanda Raffaello** – Dipartimento di Ingegneria, Università degli Studi di Messina, 98158 Sant'Agata (ME), Italia\*
- Guizzetti Giorgio** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Pavia, 27100 Pavia, Italia
- Gygi François** – Department of Computer Science, University of California, Davis, CA 95616, USA
- Inguscio Massimo** – Laboratorio Europeo di Spettroscopia Non Lineare (LENS), Università degli Studi di Firenze, 50019 Sesto Fiorentino, Italia; Dipartimento di Ingegneria, Università Campus Bio-Medico di Roma, 00128 Roma, Italia
- Lipari Nunzio O.** – Lipari Int'l Consulting, Baldwinville, NY 13027, USA
- Margaritondo Giorgio** – École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse; Istituto Italiano di Tecnologia, 16163 Genova, Italia
- Marrazzo Antimo** – Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), 34136 Trieste, Italia
- Marzari Nicola** – Sciences et Technologies de l'Ingénieur (STI), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse
- Meloni Franco** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Cagliari, 09042 Cagliari, Italia\*
- Mila Frédéric** – Institut de physique (IPHYS), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse
- Ortiz Gerardo** – Department of Physics, Quantum Science and Engineering Center (QSEC), and NSF Center for Quantum Technologies, Indiana University, Bloomington, IN 47405, USA
- Pantelides Sokrates T.** – Department of Physics and Astronomy, and Department of Electrical and Computer Engineering, Vanderbilt University, Nashville, Tennessee 37235, USA
- Parmigiani Fulvio** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34127 Trieste, Italia; Internationale Fakultät, Universität zu Köln, 50923 Köln, Deutschland
- Pastore Giorgio** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34127 Trieste, Italia
- Pasquarello Alfredo** – Chaire de simulation à l'échelle atomique (CSEA), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse
- Pennetta Cecilia** – Dipartimento di Matematica e Fisica, Università degli Studi del Salento, 73100 Lecce, Italia\*
- Peressi Maria** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34127 Trieste, Italia
- Phillips James C.** – Department of Physics and Astronomy, Rutgers University, Piscataway, NJ 08854-8019, USA
- Porta Noemi** – Institut romand de recherche numérique en physique des matériaux (IRRMA), 1015 Lausanne, Suisse; Institut de théorie des phénomènes physiques, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse\*
- Posternak Michel** – Institut de physique (IPHYS), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse
- Rattazzi Riccardo** – Institut de physique (IPHYS), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse
- Resta Raffaele** – Consiglio Nazionale delle Ricerche – Istituto Officina dei Materiali (CNR-IOM), 34149 Trieste, Italia
- Rovere Mauro** – Dipartimento di Matematica e Fisica, Università degli Studi Roma Tre, 00146 Roma, Italia\*

**Savona Vincenzo** – Institut de physique (IPHYS), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse

**Selloni Annabella** – Department of Chemistry, Princeton University, NJ 08544, USA

**Sergo Valter** – Laboratorio di Spettroscopia Raman, Dipartimento di Ingegneria e Architettura, Università degli Studi di Trieste, 34127 Trieste, Italia

**Seriani Nicola** – Condensed Matter and Statistical Physics Group, The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP), 34151 Trieste, Italia

**Siagri Roberto** – Rotonium srl, 35129 Padova, Italia

**Šljivančanin Željko** – Institut za nuklearne nauke Vinča, Univerzitet u Beogradu, 11001 Beograd, Srbija

**Stella Angiolino** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Pavia, 27100 Pavia, Italia

**Stengel Massimiliano** – Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC), Campus UAB, 08193 Bellaterra, España ; Institució Catalana de

Recerca i Estudis Avançats (ICREA), 08010 Barcelona, España

**Stevanović Vladan** – Department of Metallurgy and Materials Engineering, Colorado School of Mines, and National Renewable Energy Laboratory, Golden, CO 80401, USA

**Testa Andrea** – Faculté des sciences de base, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Suisse

**Toigo Flavio** – Dipartimento di Fisica e Astronomia, Università degli Studi di Padova, 35121 Padova, Italia

**Tosatti Erio** – Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), 34136 Trieste, Italia; The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP), 34151 Trieste, Italia

**Vesselli Erik** – Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trieste, 34127 Trieste, Italia

**Vladimirova Masha** – Laboratoire Charles Coulomb, Université de Montpellier, CNRS, 34095 Montpellier, France





# Table des matières

<b>Préface</b>	<b>7</b>
<b>Biographie</b>	<b>9</b>
<b>Sélection de publications majeures</b>	<b>11</b>
<b>1. Les premiers pas de géant</b>	<b>49</b>
Tosatti Erio – A life with Alfonso (avec traduction)	51
Inguscio Massimo – Alfonso Baldereschi: pensieri di 55 anni fa (avec traduction)	63
Toigo Flavio – How I remember Alfonso (avec traduction)	64
Girlanda Raffaello – In ricordo di Alfonso (Pisa, Losanna e Messina) (avec traduction)	66
<b>2. Une étoile montante en Amérique</b>	<b>69</b>
Lipari Nunzio O. – Alfonso Baldereschi: ingenious scientist, inspiring collaborator, lifetime friend (avec traduction)	71
Phillips James C. – Bell Labs days (avec traduction)	77
Pantelides Sokrates T. – Alfonso Baldereschi, a scientist of great stature (avec traduction)	78
Altarelli Massimo – Alfonso Baldereschi's early career contributions to semiconductor physics (avec traduction)	82
Margaritondo Giorgio – Two landmark research contributions of Alfonso Baldereschi: historical perspective (avec traduction)	88
<b>3. Forger Lausanne en pôle d'excellence</b>	<b>103</b>
Meloni Franco – Per Alfonso (avec traduction)	105
Selloni Annabella – Coffee and cigarettes (avec traduction)	112
Car Roberto – Remembering Alfonso (avec traduction)	114



Andreoni Wanda – Grande, caro Alfonso: che nostalgia! (avec traduction)	118
Guizzetti Giorgio – Sia lodato Baldereschi... (avec traduction)	125
Pennetta Cecilia – En attendant... Alfonso (avec traduction)	129
Resta Raffaele – With Alfonso: establishing a new paradigm in polarization theory (avec traduction)	133
Posternak Michel – La genèse de 45 ans de collaboration scientifique et d'amitié	141
Baroni Stefano – Birth and ephemeral life of pseudopotential alchemy ; Funeral eulogy (avec traduction)	143
Bogusławski Piotr – Alfonso Baldereschi, the gentleman physicist (avec traduction)	152
Gygi François – Quelques souvenirs de mes premiers pas de physicien avec Alfonso Baldereschi	154
Catellani Alessandra – Memorie (di una fisica superficiale) (avec traduction)	156
Andreani Lucio Claudio – Enriching contacts with Alfonso Baldereschi (avec traduction)	157
Pasquarello Alfredo – Il Maestro (avec traduction)	161
Claudet Suzanne – Une profonde humanité et un grand professionnalisme	171
de Gironcoli Stefano – Trieste–Lausanne round trip (avec traduction)	172
Giannozzi Paolo – Con Alfonso Baldereschi a IRRMA (avec traduction)	175
Ortiz Gerardo – The accurate and the principled (avec traduction)	177
Di Ventra Massimiliano – A thank you note to my supervisor (avec traduction)	180
Bardi Julien – À la mémoire d'un professeur inspirant	189
Berthod Christophe – Alfonso, absent et présent	190
Dal Corso Andrea – Un ricordo di Alfonso Baldereschi (avec traduction)	191
Favot Fabio – A story of physics, humor, and inspiration: my time with Professor Alfonso Baldereschi (avec traduction)	194
Cangiani Giovanni – Occupiamo lo spazio con un atomo di neon (avec traduction)	197
Vladimirova Masha – Le facteur humain avant tout	199
Stengel Massimiliano – Quel mezzo esame che mi valse la carriera (avec traduction)	200
Porta Noemi – Souvenirs décousus de mes années auprès du Professeur Baldereschi	205
Savona Vincenzo – Una storia di dedizione e amicizia: ricordando Alfonso (avec traduction)	206
De Los Rios Paolo & Foffi Giuseppe – Recollections of two “ $\hbar=0$ ” scientists of a man who believed in grandi progetti (avec traduction)	207
Mila Frédéric – Alfonso Baldereschi ou l'art d'arrondir les angles	212
Rattazzi Riccardo – Galeotto fu il risotto (avec traduction)	213
Šljivančanin Željko – Alfonso Baldereschi: much more than a Physics Professor (avec traduction)	215
Stevanović Vladan – My four years with Alfonso Baldereschi (avec traduction)	217

#### 4. L'appel du pays natal

223

Stella Angiolino – Grazie, Alfonso! (avec traduction)	225
Braicovich Lucio – Notturmo (avec traduction)	227
Capizzi Mario – A memory of Schrödinger's man (avec traduction)	228
Bachelet Giovanni – A courageous, lone warrior (avec traduction)	230
Sergo Valter – Il biossido di titanio è trasparente, ma è anche IL bianco! (avec traduction)	234

Comelli Giovanni – Un vero maestro, un amico prezioso (avec traduction)	238
Parmigiani Fulvio – It all began with the Baldereschi point (avec traduction)	241
Benatti Fabio – Ricordo e gratitudine (avec traduction)	245
Siagri Roberto – La copertina amaranto: memorie del Professor Alfonso Baldereschi (avec traduction)	246
Galli Giulia – The seafront from Miramare to Barcola (avec traduction)	249
Peressi Maria – Arrivederci, Alfonso! (avec traduction)	251
Fiorentini Vincenzo – From the sidelines (avec traduction)	253
Rovere Mauro – Alfonso e gli studenti: un ricordo indelebile (avec traduction)	261
Pastore Giorgio – Alfonso e la dilatazione dei tempi (avec traduction)	262
Baraldi Alessandro – Quel vento di saggezza (avec traduction)	264
Marzari Nicola – In principio (avec traduction)	265
Debernardi Alberto – Ricordo Alfonso Baldereschi: lo scienziato e l'uomo (incontri, di persona e non) (avec traduction)	268
Vesselli Erik – Alfonso Baldereschi: physics through images (avec traduction)	271
Dell'Anna Luca – Il segno di Alfonso (avec traduction)	273
Coslovich Daniele – Un insegnante infinito (avec traduction)	275
Seriani Nicola – Lo stile di Baldereschi (avec traduction)	276
Blasetti Cecilia – Una voce inconfondibile (avec traduction)	277
Marrazzo Antimo – Chalk, blackboards, and cigarettes: the adiabatic teaching of physics (avec traduction)	277
<b>Liste complète des publications</b>	<b>281</b>
<b>Nécrologie</b>	<b>293</b>
<b>Affiliations des auteurs</b>	<b>295</b>

