



## Integrated experimental, spectroscopic and theoretical aspects of inorganic chemistry

### Aspects expérimentaux, spectroscopiques et théoriques en chimie inorganique

#### Foreword

In the second half of 2003, following an invitation from Pierre Braunstein, I accepted to guest-edit the present issue of *Comptes rendus Chimie*. The topic *Integrated Experimental, Spectroscopic and Theoretical Aspects of Inorganic Chemistry* closely reflects my scientific interests as an inorganic chemist, who tries to explain experimental facts by exploiting basic molecular orbital concepts. Recent advances in modern computational methods have proven to be extremely powerful, in reproducing molecular structures, including those that are undetectable through experimental techniques. The emerging modern picture of chemical bonding can account for reactivity and other properties, which are reflected by crystallographic, spectroscopic, magnetic, electrochemical and other types of physical phenomena. Editing this thematic issue of the *C.R. Chimie*, that addresses the intertwining between theory and experiment, was particularly timely since I was simultaneously organizing a Conference with the same title on behalf of the European Science Foundation (Sant Feliu, Spain, 4th–9th September 2004, <http://www.esf.org/euresco/04>). On this occasion, renowned experimental and theoretical chemists shared their expertise and enthusiastically discussed issues relevant to modern Inorganic Chemistry. The highlight was a roundtable on *Models of Chemical Bonding*, which involved leading authorities in the wave-function and electron-density alternative approaches. The interest shared by the entire audience was a clear sign of the role of computational chemistry as another fundamen-

#### Éditorial

Durant la seconde moitié de l'année 2003, en réponse à une invitation de Pierre Braunstein, j'ai accepté le rôle de rédacteur invité de ce numéro des *Comptes rendus Chimie*. En tant que chimiste inorganicien, le thème des *Aspects expérimentaux, spectroscopiques et théoriques en chimie inorganique* reflète étroitement mes intérêts scientifiques, qui consistent à tenter d'expliquer les faits expérimentaux en utilisant les concepts de base des orbitales moléculaires. Avec ces derniers, les avancées nouvelles des méthodes informatiques se sont montrées extrêmement puissantes pour la reproduction de structures moléculaires, y compris celles qui sont indétectables par les techniques expérimentales. L'émergence d'une nouvelle approche de la liaison chimique permet d'expliquer la réactivité et les autres propriétés, révélées, entre autres, par les données cristallographiques, spectroscopiques, magnétiques ou électrochimiques des phénomènes physiques. Le travail d'édition de ce numéro thématique des *Comptes rendus Chimie* dédié à l'imbrication de la théorie et de l'expérience fut particulièrement opportun pour moi, puisque j'ai été dans le même temps organisateur d'un congrès sur le même thème sous l'égide de la Fondation européenne pour la science (Sant Feliu, Espagne, 4–9 septembre 2004, <http://www.esf.org/euresco/04>). À cette occasion, des chimistes expérimentalistes et théoriciens renommés ont partagé leurs connaissances et discuté avec enthousiasme de questions pertinentes relatives à la chimie inorganique. Le point d'orgue en fut la table ronde sur les modèles de la liaison chimique,

tal laboratory tool. In this respect, Einstein's quotation "No one but a theorist believes his theory; everyone puts faith in a laboratory result but the experimenter himself" today no longer seems totally appropriate!

The collection of the numerous articles presented here and their editing has required a longer time than expected and I am grateful to the authors for their understanding. The scientific content of this issue fulfils the best expectations and continues the spirit of the mentioned Euroconference. Personally, I wish to thank all the authors for their most valuable contributions and the referees for their efforts.

**Carlo Mealli**

*ICCOM–CNR, Via Madonna del Piano s.n.c.,  
50019 Sesto Fiorentino, Firenze/Florence, Italy*

Available online 05 July 2005

qui réunissait les leaders éminents des diverses approches de la fonction d'onde et de la densité électronique. L'intérêt partagé par tous les participants fut un signe clair du rôle joué par la chimie théorique en tant qu'outil fondamental au laboratoire. À cet égard, la remarque d'Einstein : « *Seul un théoricien peut croire à ses théories, mais tout le monde a foi dans les résultats expérimentaux, sauf l'expérimentateur* » ne semble plus tout à fait appropriée !

La réunion des nombreux articles présentés ici et leur publication ont demandé plus de temps que prévu et je suis reconnaissant aux auteurs de leur compréhension. Le sommaire de ce numéro comble toutes les attentes et prolonge l'esprit de l'*Euroconference* citée plus haut. Personnellement, je tiens à remercier tous les auteurs pour leurs remarquables contributions et les rapporteurs pour leurs efforts.

**Carlo Mealli**

*ICCOM–CNR, Via Madonna del Piano s.n.c.,  
50019 Sesto Fiorentino, Firenze/Florence, Italy*

Disponible sur internet le 05 juillet 2005