

# BIBLIOGRAPHY

## Chapter 1

1. Faraday, M. M. *Phil.Trans.Roy.London.* **1825**, 115, 440.
2. (a) Kekulé, A. *Bull.Soc.Chim.Paris* **1865**, 3, 98-100. (b) Kekulé, A. *Ann.Chem.Pharm*, **1866**, 137,129.
3. Erlenmeyer, E. *Ann. Chem. Pharm.* **1866**, 137, 327.
4. Dewar, J (1867). "On the Oxidation of Phenyl Alcohol, and a Mechanical Arrangement adapted to illustrate Structure in the Non-saturated Hydrocarbons". *Proc. R. Soc. Edinb.* 6: 82–86.
5. (a) Hückel, E. *Z. Phys* **1931**, 70, 204. (b) Hückel, *Z.Phys.* **1932**, 76,628-648. (c) Hückel, E. *Z.Electrochem, Angew.Phys.Chem.* **1937**, 43, 752-788. (d)Hückel, E. *Z.Electrochem, Angew.Phys.Chem* **1995**, 61,866-890.
6. Clar, E. *The Aromatic Sextet.* Wiley & Sons: New York, **1970**.
7. Calvin, M.; Wilson. K. *J. Am. Chem. Soc.* **1945**, 67, 2003.
8. Heilbronner, E. *Tet Lett* **1964**, 5, 1923.
9. Katz, T. H; Garratt, P. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1963**, 85, 2852.
10. (a) Colin, B. N. *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, 94, 4941. (b) Henrik, O, *Nat Chem*, **2012**, 4, 969.
11. Aihara, J. *J. Am. Chem. Soc.* **1978**, 100, 3339.
12. Li, X.; Kuznetsov, A.; Zhang, H.; Boldyrev, A. Wang, L. *Science* **2001**, 291, 859.
13. Jose, M. M.; Boldyrev, A. I.; Merino, G.; Ugalde, M. J. *Chem.Soc.Rev.* **2015**, 44, 6519.
14. Tsipis, A.; Kefalidis, C.; Tsipis, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 9144.
15. Pauling, L; Wheland, G.W. *J. Chem. Phys.* **1933**, 1, 362.
16. Pauling, L. In *The Nature of the Chemical Bond*, 3<sup>rd</sup> ed., Cornell University Press: Ithaca, New York, 1960.
17. Goldstein. M.J.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1971**, 93, 6193.
18. Chen, Z.; Wannere, C. S.; Corminboeuf, C.; Puchta, R.; Schleyer, P. v. R.; *Chem. Rev.* **2005** 105 (10), 3842.
19. Schleyer, P.V.R. Introduction: Aromaticity. *Chem. Rev.* **2001**, 101, 1115.
20. Fernández, I.; Dyker, C. A.; DeHope, A.; Donnadiou, B.; Frenking, G.; Bertrand, G. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 11875.
21. Gutowsky, H. S.; McCall, D. W. *J. Phys. Chem.* **1953**, 21, 279.
22. Onak T. P.; Landesman, H; Williams R E.; Shapiro, I paper presented to the Division of Inorganic Chemistry, 135th National Meeting of the American Chemical Society, Boston, Mass, April 1959.
23. Cotton, F. A.; Wilkinson, G. "*Advanced Inorganic Chemistry*," Interscience, London, 1966, 256.

24. Olah, G. A.; Mo, Y. K.; Halpern, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, *94*, 3551.
25. Thorn, D. L.; Hoffmann, R. *Nouv. J. Chim.* **1979**, *3*, 39.
26. Bursten, B. E.; Fenske, R. F. *Inorg. Chem.* **1979**, *18*, 1760.
27. Li, X.-W.; Pennington, W. T.; Robinson, G. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 7578.
28. Li, X.; Zhang, H. F.; Wang, L. S.; Kuznetsov, A. E.; Cannon, N. A.; Boldyrev, A. I. *Angew Chem Int Ed* **2001**, *40*, 1867.
29. Díaz-Cervantes, E.; Poater, J.; Robles, J.; Swart, M.; Solà, M. *J. Phys. Chem. A* **2013**, *117*, 40, 10462.
30. Kuznetsov, A. E.; Boldyrev, A. I.; Li, X.; Wang, L. S. *J Am Chem Soc* **2001**, *123*, 8825.
31. Twamley, B.; Power, P. P.; *Angew Chem Int Ed* **2000**, *39*, 3500.
32. Cisar, A.; Corbett, J. D. *Inorg Chem* **1977**, *16*, 2482.
33. Critchlow, S. C.; Corbett, J. D. *Inorg Chem* **1984**, *23*, 770.
34. Tuononen, H. M.; Suontamo, R.; Valkonen, J.; Laitinen, R. S. *J Phys Chem A* **2004**, *108*, 5670.
35. Todorov, I.; Sevov, S. C. *Inorg Chem* **2004**, *43*, 6490.
36. Todorov, I.; Sevov, S. C. *Inorg Chem* **2005**, *44*, 5361.
37. Gillespie, R. J.; Barr, J.; Kapoor, R.; Malhotra, K. C. *Can J Chem* **1968**, *46*, 149.
38. Gillespie, R. J.; Barr, J.; Crump, D. B.; Kapoor, R.; Ummat, P. K. *Can J Chem* **1968**, *46*, 3607.
39. Barr, J.; Gillespie, R. J.; Kapoor, R.; Pez, G. P. *J Am Chem Soc* **1968**, *90*, 6855.
40. Couch, T. W.; Lokken, D. A.; Corbett, J. D. *Inorg Chem* **1972**, *11*, 357.
41. Burford, N.; Passmore, J.; Sanders, J. C. P. In: Liebman, J. F.; Greenburg, A. (eds) From atoms to polymers. Isoelectronic analogies. VCH, New York, 1989, p 53.
42. Li, X.; Wang, X. B.; Wang, L. S. *Phys Rev Lett* **1998**, *81*, 1909.
43. Wu, H.; Li, X.; Wang, X. B.; Ding, C. F.; Wang, L. S. *J Chem Phys* **1998**, *109*, 449.
44. Baeck, K. K.; Bartlett, R. J.; *J Chem Phys* **1998**, *109*, 1334.
45. Kuznetsov, A. E.; Boldyrev, A. I. *Struct Chem* **2002**, *13*, 141.
46. Kuznetsov, A. E.; Boldyrev, A. I.; Zhai, H. J.; Li, X.; Wang, L. S. *J Am Chem Soc* **2002**, *124*, 11791.
47. Gausa, M.; Kaschner, R.; Lutz, H. O.; Seifert, G.; Meiwes-Broer, K. H. *Chem Phys Lett* **1994**, *230*, 99.
48. Gausa, M.; Kaschner, R.; Seifert, G.; Faehrmann, J. H.; Lutz, H. O.; Meiwes, K. H. B. *J Chem Phys* **1996**, *104*, 9719.
49. Zhai, H. J.; Wang, L.S.; Kuznetsov, A. E.; Boldyrev A. I. *J Phys Chem A* **2002**, *106*, 5600.
50. Tanaka, H.; Neukermans, S.; Janssens, E.; Silverans, R. E.; Lievens. P. *J Am Chem Soc* **2002**, *125*, 2862.
51. Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A. I.; Zhai, H. I.; Wang, L. S. *J Phys Chem A* **2005**, *109*, 562 .
52. Wannere, C. S.; Corminboeuf, C.; Wang, Z. X.; Wodrich, M. D.; King, R. B.; Schleyer, P. v. R. *J Am Chem Soc* **2005**, *127*, 5701.
53. Lein, M.; Frunzke, J.; Frenking, G. *Angew Chem Int Ed* **2003**, *42*, 1303.
54. Van Zandwijk, G.; Janssen, R. A. J.; Buck, H. M. *J Am Chem Soc* **1990**, *112*, 4155.

55. Kuznetsov, A. E.; Boldyrev, A. I. *Chem. Phys. Lett.* **2004**, 388, 452.
56. Yong, L.; Chi, X. *Theochem* **2007**, 818, 93.
57. Roy, D. R.; Chattaraj, P. K. *J Phys Chem A* **2008**, 112, 1612.
58. Hoffmann, R.; Schleyer, P. v. R.; Schaefer, H. F., III. *Angew Chem Int Ed* **2008**, 47, 7164.
59. (a) Parkin, G. *Acc Chem Res* **1992**, 25, 455. (b) Parkin, G. *Chem Rev* **1993**, 93, 887.
60. Stohrer W. D.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, 94, 779.
61. Stohrer W. D.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, 94, 1661.
62. Jean, Y.; Lledos, A.; Burdett, J. K.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, 110, 4506.

## Chapter 2

1. Cryański, M. K.; Krygowski, T. M.; Katritzky, A. R.; Schleyer, P. v. R. *J. Org. Chem* **2002**, 67, 1333.
2. Minkin, V.; Glukhovtsev, M.; Simkin, B. In *Aromaticity and Antiaromaticity*; Wiley Interscience, New York, **1994**.
3. Schleyer, P. v. R.; Jiao, H. **1996**, 68, 209.
4. Poranne, G. P.; Stranger, A. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, 44, 6597.
5. Schleyer, P. v. R. *Chem. Rev.* **2001**, 101, 1115.
6. Schleyer, P. v. R.; Maerke, C.; Dransfeld, A.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. v. E. *J Am Chem Soc* **1996**, 118, 6317.
7. London, F. *J. Phys. Radium.* **1937**, 8, 397.
8. Cheeseman, J. R.; Trucks, G. W.; Keith, T. A.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **1996**, 104, 5497.
9. Schreckenbach, G.; Ziegler, T. *J. Phys. Chem.* **1995**, 99, 606.
10. Schreckenbach, G.; Ziegler, T. *Theor. Chem. Acc.* **1998**, 99, 71.
11. Heine, T.; Schleyer, P. v. R.; Corminboeuf, C.; Seifert, G.; Reviakine, R.; Weber, J. *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107, 6470.
12. Giambiagi, M.; de Giambiagi, M. S.; Mundim, K. C. *Struct. Chem.* **1990**, 1, 423–427.
13. Giambiagi, M.; de Giambiagi, M. S.; dos Santos Silva, C. D.; de Figueiredo, A. P. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2000**, 2, 3381–3392.
14. Bultinck, P.; Ponec, R.; Van Damme, S. *J. Phys. Org. Chem.* **2005**, 18, 706–718.
15. Becke A. D.; Edgecomb K. E. *J. Chem. Phys.* **1990**, 92, 5397-5403.
16. Savin, A.; Jepsen, O.; Flad, J.; Andersen, O. K.; Preuss, H.; von Schnering, H. G. (1992). "Electron localization in solid-state structures of the elements – the diamond structure". *Angewandte Chemie International Edition in English.* **31** (2): 187–188.
17. Paul, S.; Goswami, T.; Misra, A. *AIP Advances*, **2015**, 5, 107211.
18. Anderson, P. W. *Phys. Rev.* **1950**, 79, 350.
19. Anderson, P. W. *Phys. Rev.* **1959**, 115, 2.

20. Anderson, P. W. Theory of the magnetic interaction: exchange in insulators and superconductors. In solid state physics; Turnbull, F., Seitz, F., Eds.; Academic Press: New York, 1963; Vol. 14, p 99.
21. Ziegler, T.; Rauk, A. *Theor. Chim. Acta* **1977**, *46*, 1.
22. Pinter, B.; Fievez, T.; Bickelhaupt, F. M.; Geerlings, P.; DeProft, F. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 9846.
23. Michalak, A.; Mitoraj, M.; Ziegler, T. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112*, 1933.
24. (a) Mitoraj, M.; Michalak, A. *J. Mol. Model.* **2007**, *13*, 347–355; (b) Mitoraj, M. P.; Michalak, A.; Ziegler, T. *J. Chem. Theory Comput.*, **2009**, *5*, 962–975.
25. Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*; Oxford University Press Oxford UK, 1990.
26. Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. M.; Frontera, A. *Chem. Phys. Lett.* **2012**, *536*, 165.
27. Zubarev, D. Yu.; Boldyrev, A. I. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 5207.
28. Foster, J. P.; Weinhold, F. *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 7211.
29. Reed, A. E.; Curtiss, L. A.; Weinhold, F. *Chem. Rev.* **1988**, *88*, 899.
30. Marx, D.; Hutter, J.; J. Grotendorst (Ed.), *Proceedings of Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry*, John von Neumann Institute for Computing, Jurich, Germany, 2000.
31. Schlegel, H. B.; Millam, J. M.; Iyengar, S. S.; Voth, G. A.; Daniels, A. D.; Scuseria, G. E.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **2011**, *114*, 9758-9763.
32. Iyengar, S. S.; Schlegel, H. B.; Millam, J. M.; Voth, G. A.; Scuseria, G.E.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **2011**, *115*, 10291-10302.
33. Schlegel, H. B.; Iyengar, S. S.; Li, X.; Millam, J. M.; Voth, G. A.; Scuseria, G. E.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 8694-8704.
34. McWeeny, R. *Rev. Mod. Phys.* **1960**, *32*, 335.
35. Pearson, R. G. Recent Advances in the Concept of Hard and Soft Acids and Bases. *J. Chem. Edu.* **1987**, *64*, 561-567.
36. Parr, R. G.; Chattaraj, P. K. *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 1854-1855.
37. Ayers, P. W.; Parr, R. G. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 2010-2018.
38. Chattaraj, P. K.; Sengupta, S. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 16126-16130.
39. Fuentealba, P.; Simon-Manso, Y.; Chattaraj, P. K. *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 3185-3187.
40. Pan, S.; Solà, M.; Chattaraj, P. K. *J. Phys. Chem. A* **2013**, *117*, 1843-1852.
41. Saha, R.; Pan, S.; Chattaraj, P. K. *Molecules* **2016**, *21*, 1477-1493.
42. Chamorro, E.; Chattaraj, P. K.; Fuentealba, P. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 7068-7072.
43. Parthasarathi, R.; Elango, M.; Subramanian, V.; Chattaraj, P. K. *Theo. Chem. Acc.* **2005**, *113*, 257-266.
44. Geerlings, P.; De, P. F.; Langenaeker, W. *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 1793-1874.
45. Chattaraj, P. K. *J. Indian. Chem. Soc.* **1992**, *69*, 173-183.
46. Parr, R. G.; Donnelly, R. A.; Levy, M.; Palke, W. E. *J. Chem. Phys.* **1978**, *68*, 3801.
47. Chattaraj, P. K.; Sarkar, U.; Roy, D. R. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 2065-2091.
48. Chattaraj, P. K.; Roy, D. R. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, PR46-PR74.
49. Parr, R. G.; Szentpaly, L. v.; Liu, S. *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 1922-1924.
50. Koopmans, T. A. *Physica* **1993**, *1*, 104-113.

51. Janak, J. F. *Phys. Rev. B* **1978**, *18*, 7165.
52. Roy, R.K.; Pal, S.; Hirao, K. *J. Chem. Phys.* **1999**, *110*, 8236
53. Roy, R.K.; Pal, S.; Hirao, K. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 1372
54. Ayers, P.W.; Morrisson, R.C.; Roy, R.K. *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 8731.
55. Hocquet, A.; Toro-Labbé, A.; Chermette, H. *J.Mol. Struc(THEOCHEM)***2004**, *686*, 213-218.
56. Melin, J.; Aparicio, F.; Subramanian, V.; Galván, M.; Chattaraj, P.K. *J.Phys. Chem. A* **2008**, *108*, 2487-2491.
57. Lu, T.; Chen, F. *J. Comp. Chem.* **2012**, *33*, 580-592.

### Chapter 3

1. Faraday, M. *M.Phil.Trans.Roy.London.* 1825, *115*, 440-446.
2. Kekulé, A. *Bull.Soc.Chim.Paris* **1865**, *3*, 98-100.
3. Kekulé, A. *Ann.Chem.Pharm* **1866**, *137*, 129-196.
4. Hückel, E. *Z. Phys.* **1930**, *60*, 423-456.
5. Hückel, E. *Z. Phys.* **1931**, *70*, 204-86.
6. Hückel, E. *Z.Phys.* **1932**, *76*, 628-648.
7. Hückel, E. *Z.Electrochem, Angew.Phys.Chem.* **1937**, *43*, 752-788.
8. Hückel, E. *Z.Electrochem, Angew.Phys.Chem* **1995**, *61*, 866-890.
9. Pauling, L; Wheland, G.W. *J.Chem.Phys.* **1933**, *1*, 362-374.
10. (a) Balaban, A. T.; Oniciu, D.C.; Katritzky, A.R. *Chem. Rev* **2004**, *104*(5), 2777-2812.  
(b) Chattaraj, P. K.; Sarkar, U.; and Roy, D. R. *J. Chem. Educ.*, **2007**, *84*, 354.(c)  
Chattaraj, P.K.; Roy, D. R.; Elango, M.; and Subramanian, V. *J. Phys. Chem.A* **2005**, *109*, 9590.
11. Noorizadeh, S.; Shakerzadeh, E. *Phys.Chem.Chem.Phys.* **2010**, *12*(18), 4742-4749.
12. Chen, Z.; Wannere, C. S.; Corminboeuf, C.; Puchta, R.; Schleyer, P. v. R. *Chem.Rev* **2005**, *105*(10), 3842-3888.
13. Krygowski, T. M.; Cyrański, M. K. *Chem. Rev* **2001**, *101*(5), 1385-1420 .
14. Poater, J.; Duran, M.; Solà, M.; Silvi, B. *Chem.Rev* **2005**, *105*(10), 3911-3947.
15. Cyrański, M. K. *Chem. Rev* **2005**, *105*(10), 3773-3811.
16. Matito, E.; Duran, M.; Solà, M. *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*(1), 014109 .
17. (a) Bultinck, P.; Ponec, R.; Van Damme, S. *J.Phys.Org.Chem* **2005**, *18*(8), 706-718. (b)  
Roy, D.R.; Bultinck, P.; Subramanium, V.; Chattaraj, P.K. *J.Mol.Struc(THEOCHEM)* **2008**, *854*(1-3), 35-39.
18. Misra, A.; Klein, D.J. ; Morikawa, T. *J.Phy.Chem.A* **2009**, *113*(6), 1151-1158.
19. Clar, E. *The Aromatic Sextet*. Wiley & Sons: New York, **1970**.
20. Misra, A.; Schmalz, T. G.; Klein, D. J. *J.Chem.Inf.Model* **2009**, *49*(12), 2670-2676.

21. Bhattacharya, D.; Panda, A.; Misra, A. ; Klein,D.J. *J.Phys.Chem.A* **2014**, *118*(24), 4325-4338.
22. Cryański, M. K.; Krygowski, T. M.; Katritzky, A. R.; Schleyer, P.v.R. *J.Org.Chem* **2002**, *67*(4), 1333-1338.
23. Paul, S.; Goswami, T.; Misra, A *AIP Advances* **2015**,*5*, 107211.
24. Schleyer, P.v.R.; Jiao, H. *Pure &Appl.Chem.***1996**, *68* 209-218.
25. Islas, R.; Chamorro, E.; Robles, J.; Heine, T.; Santos J.C.; Merino, G. *Struct.Chem.* 2007, *18*, 833.
26. Stock, A.; Pohland, E. Borwasserstoffe, IX.: B3N3H6. *Chem. Ber.*1926, *59B*, 2215.
27. Bhattacharya, D.; Shil, S.; Misra, A.; Bytautasc, L.; Klein, D.J. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015, *17*, 14223.
28. Mo, Y.; Peyerimhoff, S. D. *J.Chem.Phys.*1998, *109*(5), 1687-1697.
29. Pauling, L.; Sherman, J. *J. Chem. Phys.* 1933, *1*(8), 606-617.
30. Hehre, W. J.; Radom, L.; Schleyer, P. v. R.; Pople, J.A. *Ab Initio Molecular Orbital Theory*, Wiley &Sons: New York, **1986**.
31. Hehre, W. J.; McIver, R.T.; Pople, J.A.; Schleyer,P. v. R. *J. Am. Chem. Soc.* **1974**, *96*(22), 7162-7163.
32. Pedley, J. B.; Naylor, R. B.; Kirby, S. P.; *Thermodynamical Data of Organic Compounds*, Chapman & Hall: London, **1986**.
33. Jose, M. M.; Boldyrev, A. I.; Merino, G.; Ugalde, M.J. *Chem.Soc.Rev.* 2015, *44*, 6519.
34. Poater, J.; Fradera, X.; Duran, M.; Solá, *Chem-Eur.J.***2003**, *9*(2), 400-406.
35. Poranne, G. P.; Stranger, A. *Chem.Soc.Rev.* 2015, *44*, 6597.
36. (a) Dewar, M. J. S.; McKee, M.L *Pure Appl. Chem.*1980, *52*, 1431 – 1441. (b)Dewar, M. J. S. *Bull. Soc. Chim.Belg.* 1979, *88*, 957 – 967.
37. Pople, J. A. *Mol,Phys.*, **1958**, *1*,175-180.
38. Gomes, A. N. F.; Mallion, R. B. *Chem.Rev.* **2001**, *101*, 1349-1384.
39. Mitchell, R. H. *Chem.Rev.* **2001**, *101*, 1301-1315.
40. Benassi, R.;Lazzeretti, P.; Taddei, F. *J.Phys.Chem.* 1975, *79*(8), 848-851.
41. Coriani, S.; Lazzeretti, P.; Malagoli, M.; Zanasi. R. *Theor.Chim.Acta.* **1994**, *89*,181-192.
42. Lazzeretti, P.; Malagoli, M.; Zanasi, R. *Chem.Phys.Lett.* **1994**, *220*, 299-309.
43. Zanasi, R. *J.Chem.Phys.* 1996, *105*, 1460-1469.
44. Steiner, E.; Fowler, P.W. *J.Phys.Chem.A* 2001, *105*, 9553-9562.
45. Steiner, E.; Fowler, P.W. *Chem.Commun.* **2001**, 2220-2221.
46. Steiner, E.; Fowler, P. W.; Havenith, R. W .A. *J.Phys.Chem.A* 2002, *106*, 7048-7056.
47. Schleyer, P. v. R; Maerker, C.; Dransfeld, A.; Jiao,H.; Hommes, N. J. R. *J.Am.Chem.Soc.* **1996**, *118*, 6317-6318.
48. London, F. *J. Phys. Radium.* **1937**, *8*, 397.
49. (a) Cheeseman, J. R.; Trucks, G. W.; Keith, T. A.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **1996**, *104*, 5497.(b) Schreckenbach, G.; Ziegler, T. *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 606.(c) Schreckenbach, G.; Ziegler, T. *Theor. Chem. Acc.* **1998**, *99*, 71.
50. Chattaraj, P.K. *Aromaticity and Metal Clusters*,Taylor & Francis/CRC Press: Florida, **2010**.
51. Schleyer, P. v. R; Jiao, H.; Hommes, N. J. R.; Malkin,V. G.; Malkina, O. *J.Am.Chem.Soc.* **1997**, *119*,12669-12670.

52. Putz, M. V. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **2010**, *64*, 391-418.
53. Putz, M. V. *Int. J. Mol. Sci.* **2010**, *11*, 1269-1310.
54. Tarko, L.; Putz, M. V. *J. Math. Chem.*, **2010**, *47(1)*, 487-495.
55. Schleyer, P. v. R. *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1115-1118.
56. Bultinck, P. General discussion. *Faraday Discussions* **2007**, *135*, 367-401.

## **Chapter 4**

1. Garratt, P. J. *Aromaticity*, John Wiley & Sons, 1986.
2. Minkin, V. I.; Glukhotsev, M. N.; Simkin, B. Y. in *Aromaticity and Antiaromaticity: Electronic and Structural Aspects*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1994.
3. Bickelhaupt, F.; de Wolf, W. H. *Recl. Trav. Chim. Pays-Bas* **1988**, *107*, 459-478.
4. Kraakman, P. A.; Valk, J.- M.; Niederländer, H. A. G.; Brouwer, D. B. E.; Bickelhaupt, F. M.; de Wolf, W. H.; Bickelhaupt F.; Stam, C. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, *112*, 6638-6646.
5. Schleyer P. v. R.; Jiao, H. *J. Pure Appl. Chem.* **1996**, *68*, 209-218.
6. Carey F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry: Structure And Mechanisms (Part A)*, Springer, 2000.
7. Faraday, M. *Phil. Trans. R. Soc.* **1825**, *115*, 440-466.
8. Kekulé, A. *Bull. Soc. Chim. Fr.* **1865**, *3*, 98-110.
9. Balaban, A. T.; Schleyer P. v. R.; Rzepa, H. S. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3436-3447.
10. Huckel, E. *Z. Phys.* **1931**, *70*, 204-286.
11. Heilbronner, E. *Tetrahedron Lett.* **1964**, *5*, 1923-1926.
12. Balaban, A. T. *Pure & Appl. Chem.* **1980**, *52*, 1409-1429.
13. Katrizky, A.; Barczymski, P.; Musumarra, G.; Pisano D.; Szafran, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, *111*, 7-15.
14. Schleyer, P. v. R.; Maerker, C.; Dransfeld, A.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. v. E. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 6317-6318.
15. Misra, A.; Klein, D. J.; Morikawa, T. *J. Phys. Chem. A*, **2009**, *113*, 1151-1158.
16. Dewar, M. J. S. Tropolone. *Nature* **1950**, *166*, 790-791.
17. Crocker, E. C. *J. Am. Chem. Soc.*, **1922**, *44*, 1618-1630.
18. Armit, J. W.; Robinson, R. *J. Chem. Soc.* **1925**, *127*, 1604-1618.
19. Gaussian 09, Revision B.01, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, J. A., Jr.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J.

- C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
20. Amsterdam Density Functional (Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands, <http://www.scm.com>).
  21. Ziegler, T.; Rauk, A. *Theor. Chim. Acta.* **1977**, *46*, 1-10.
  22. Yamaguchi, K. *Self-Consistent Field: Theory and Applications*. (Eds Carbo, R., Klobukowski, M.); Elsevier: Amsterdam, 1990.
  23. Corminboeuf, C.; Heine, T.; Weber, J. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, *5*, 246-251.
  24. Corminboeuf, C.; King, R. B.; Schleyer, P. v. R. *Chem. Phys. Chem.* **2007**, *8*, 391-398.
  25. Lu, T.; Chen, F. *J. Comp. Chem.* **2012**, *33*, 580-592.
  26. VandeVondelea, J.; Krackb, M.; Mohamedb, F.; Parrinellob, M.; Chassaingc, T.; Hutter, J. *Comput. Phys. Commun.* **2005**, *167*, 103-128.
  27. Becke, A. D. *Phys. Rev. A* **1988**, *38*, 3098-3100.
  28. Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. *Phys. Rev. B* **1988**, *37*, 785-789.
  29. Goedecker, S.; Teter, M.; Hutter, J. *Phys. Rev. B* **1996**, *54*, 1703-1710.
  30. Hartwigsen, C.; Goedecker, S.; Hutter, J. *Phys. Rev. B* **1998**, *58*, 3641-3662.
  31. Bader, R.F.W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*; Oxford University Press: Oxford, UK, 1990.
  32. Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. M.; Frontera, A. *Chem. Phys. Lett.* **2012**, *536*, 165–169.
  33. Gund, P. *J. Chem. Educ.* **1972**, *49*, 100-103.
  34. McKee, W. C.; Wu, J. I.; Hofmann, M.; Berndt A.; Schleyer, P. v. R. *Org. Lett.*, **2012**, *14*, 5712–5715.
  35. Goswami, T.; Paul, S.; Mandal, S.; Misra, A.; Anoop, A.; Chattaraj, P. K. *Int. J. Quantum Chem.*, **2015**, *115*, 426-433.
  36. Giri, S.; Kumar, R. P. S. A.; Chakraborty A.; Roy, D. R.; Duley, S.; Parthasarathi, R.; Elango, M.; Vijayaraj, R.; Subramanian V.; Merino, G.; Chattaraj, P. K. *Aromaticity and Metal Clusters*, CRC Press, USA, **2011**.
  37. Chattaraj, P. K.; Das, R.; Duley, S.; Vigneresse, J. -L. *Theor. Chem. Acc.*, **2012**, *131*, 1089-1096.
  38. Seeger, R.; Pople, J. A. *J. Chem. Phys.* **1977**, *66*, 3045-3050.
  39. Dohnert, D.; Koutecky, J. *J. Am. Chem. Soc.*, **1980**, *102*, 1789-1796.
  40. Hoffmann, R.; Schleyer, P. v. R.; Schaefer, H. F. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2008**, *47*, 7164-7167.
  41. Wolinski, K.; Hinton, J. F.; Pulay, P. *J. Am. Chem. Soc.*, **199**
  42. Paul, S.; Goswami, T.; Misra, A. *AIP Adv.* **2015**, *5*, 107211.
  43. Steiner, E.; Fowler, P. W.; Soncini, A.; Jenneskens, L. W. *Faraday Discuss.*, **2007**, *135*, 309–323.
  44. Mitoraj, M.; Michalak, A. *J. Mol. Model.*, **2007**, *13*, 347-355.
  45. Mitoraj, M. P.; Michalak, A.; Ziegler, T. *J. Chem. Theory Comput.* **2009**, *5*, 962-975.



46. Zubarev, D. Y.; Boldyrev, A. I. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 5207-5217  
 47. Bromm, D.; Stalke, D.; Heine, A.; Miller, A. *J. Organomet. Chem.*, **1990**, *386*, 1-7.

## Chapter 5

1. Faraday, M. *M.Phil.Trans.Roy.London* 1825, *115*, 440.
2. Kekulé, A. *Bull.Soc.Chim.Paris* **1865**, *3*, 98.
3. Kekulé, A. *Ann.Chem.Pharm* **1866**, *137*, 129.
4. Garratt, P. J. *Aromaticity*; John Wiley & Sons, 1986.
5. Minkin, V. I.; Glukhotsev, M. N.; Simkin, B. Y. *Aromaticity and antiaromaticity: electronic and structural aspects*; John Wiley & Sons, Inc., New York, **1994**.
6. Bickelhaupt, F.; de Wolf, W. H. *Recl. Trav. Chim. Pays-Bas.* **1988**, *107*, 459
7. Kraakman, P. A.; Valk, J. M.; Niederländer, H. A. G.; Brouwer, D. B. E.; Bickelhaupt, F. M.; de Wolf, W. H.; Bickelhaupt, F.; Stam, C. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, *112*, 6638.
8. Schleyer, P. V. R.; Jiao, H. *J. Pure Appl. Chem.* **1996**, *68*, 209.
9. Schleyer, P. V. R.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. v. E.; Malkin, V.G.; Malkina, O. L. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 12669.
10. Poranne, G.P.; Stranger, A. *Magnetic and structural aspects*; Wiley: New York, **1994**.
11. Homray, M.; Misra, A.; Chattaraj, P. K. *Curr. Org. Chem.* **2017**, *21*, 2699.
12. Katritzky, A. R. *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 2125.
13. Aihara, J. I. *Pure Appl. Chem.* **1982**, *54*, 1115.
14. Graovac, A.; Trinajstić, N. International symposium on aromaticity, Dubrovnik, **1979**.
15. Nyulaszi, L. *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1229.
16. Minkin, V. I.; Minyaev, R. M. *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1247.
17. Katritzky, A. R.; Jug, K.; Oniciu, D. C. *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1421.
18. Li, X.; Kuznetsov, A.; Zhang, H.; Boldyrev, A. I.; Wang, L. *Science*, **2001**, *291*, 859.
19. Kuznetsov, A. E.; Birch, K. A.; Boldyrev, A. I.; Li, X.; Zhai, H.; Wang, L. *Science*, **2003**, *300*, 622.
20. Boldyrev, A. I.; Wang, L. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3716.
21. Paul, S.; Misra, A. *Inorg Chem* **2011**, *50*, 3234.
22. Chattaraj, P. K.; Roy, D. R.; Duley, S. *Chem.Phys.Lett.* 2008, *460*, 382.
23. Huckel, E. *Z. Phys.* **1931**, *70*, 204.
24. Hehre, W. J.; Radom, L.; Schleyer, P. v. R.; Pople, J. A. *Ab Initio molecular orbital theory*; Wiley, New York, 1986.
25. Xie, Y.; Schaefer III, H. F.; Thrasher, J. S. *J. Mol. Struct. Theochem.*, **1991**, *234*, 247.
26. Shaik, S.; Shurki, A.; Danovich, D.; Hiberty, P. C. *J. Mol. Struct.Theochem* **1997**, *398*, 155.
27. Krygowski, T. M.; Cyraski, M. K., *Chem. Rev.* 2001, **101**, 1385.
28. Poater, J.; Duran, M.; Solà, M.; Silvi, B. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3911.
29. Cyraski, M. K. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3773.

30. Matito, E.; Duran, M.; Solà, M. *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*, 014109.
31. Bultinck, P.; Ponec, R.; Van Damme, S. *J. Phys. Org. Chem.* **2005**, *18*, 706.
32. Feixas, F.; Matito, E.; Poater, J.; Solà, M. On the performance of some aromaticity indices: A critical assessment using a test set. *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 1543-1554.
33. Roy, D. R.; Bultinck, P.; Subramaniam, V.; P. K. Chattaraj, J. *Mol. Struct.*, **2008**, *854*, 35.
34. Feixas, F.; Matito, E.; Poater, J.; Solà, M. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 6434.
35. Misra, A.; Klein, D. J.; Morikawa, T. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 1151.
36. Clar, E. *The Aromatic Sextet*; Wiley & Sons: New York, **1970**.
37. Misra, A.; Schmalz, T. G.; Klein, D. J. *J. Chem. Inf. Model.* **2009**, *49*, 2670.
38. Bhattacharya, D.; Panda, A.; Misra, A.; Klein, D. J. *J. Phys. Chem. A*, **2014**, *118*, 4325.
39. Gund, P. *J. Chem. Educ.* **1972**, *49*, 100.
40. Goswami, T.; Homray, M.; Paul, S.; Bhattacharya, D.; Misra, A. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 11744.
41. Gutowsky, H. S.; McCall, D. W. *J. Phys. Chem.* **1953**, *21*, 279.
42. Onak, T. P.; Landesman, H.; Williams, R. E.; Shapiro, I. paper presented to the Division of Inorganic Chemistry, 135th National Meeting of the American Chemical Society, Boston, Mass., April **1959**.
43. Cotton, F. A.; Wilkinson, G. "Advanced Inorganic Chemistry," Interscience, London, **1966**, 256.
44. Olah, G. A.; Mo, Y. K.; Halpern, Y. *J Am Chem Soc* **1972**, *94*, 3551.
45. Ziegler, T.; Rauk, A. **1977**, *46*, 1.
46. Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*; Oxford University Press, Oxford, UK, **1990**.
47. Schleyer, P. v. R.; Maerke, C.; Dransfeld, A.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. v. E. *J Am Chem Soc*, **1996**, *118*, 6317.
48. Heine, T.; Schleyer, P. v. R.; Corminboeuf, C.; Seifert, G.; Reviakine, R.; Weber, J. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 6470.
49. Zubarev, D. Yu.; Boldyrev, A. I. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 5207.
50. Paul, S.; Goswami, T.; Misra, A. *AIP Advances*, **2015**, *5*, 107211.
51. Gaussian 09, Revision B.01, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Li, X.; Caricato, M.; Marenich, A. V.; Bloino, J.; Janesko, B. G.; Gomperts, R.; Mennucci, B.; Hratchian, H. P.; Ortiz, J. V.; Izmaylov, A. F.; Sonnenberg, J. L.; Williams-Young, D.; Ding, F.; Lipparini, F.; Egidi, F.; Goings, J.; Peng, B.; Petrone, A.; Henderson, T.; Ranasinghe, D.; Zakrzewski, V. G.; Gao, J.; Rega, N.; Zheng, G.; Liang, W.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Throssell, K.; Montgomery, J. A., Jr.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M. J.; Heyd, J. J.; Brothers, E. N.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Keith, T. A.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A. P.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Millam, J. M.; Klene, M.; Adamo, C.; Cammi, R.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Farkas, O.; Foresman, J. B.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

52. Amsterdam Density Functional (Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands, <http://www.scm.com>).
53. AIMAll (Version 17.01.25), Todd A. Keith, TK Gristmill Software, Overland Park KS, USA, 2017
54. Lu, T.; Chen, F. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer *J. Comp. Chem.* **2012**, *33*, 580-592.
55. The DFT code, OPENMX, is available at <http://www.openmx-square.org> under the GNU General Public License.
56. Pinter, B.; Fievez, T.; Bickelhaupt, F. M.; Geerlings, P.; F. DeProft, *Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 9846.
57. Lee, J. T.; Taylor, P. R. *Int. J. Quantum Chem.* **1989**, *36*, 199.
58. Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. M.; Frontera, A. *Chem. Phys. Lett.*, **2012**, *536*, 165.
59. Cox, J. D.; Pilcher, G.; *Thermochemistry of organic and Organometallic compounds*; Academic: London, 1970.
60. Benson, S. W. *Thermochemical Kinetics*; Wiley: New York, 1976.
61. Inagaki, S.; Ishitani, Y.; Kakefu, T. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 13.
62. Dewar, M. J. S. *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, *106*, 669.
63. Aihara, J. *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 7487.
64. Aihara, J. *Theor. Chem. Acc.* **1999**, *102*, 134.
65. Aihara, J. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1999**, *1*, 227.
66. Parr, R. G.; Zhou, Z.; *Acc. Chem. Res.* **1993**, *26*, 256.
67. Liu, X.; Schmalz, T. G.; Klien, D. J. *Chem. Phys. Lett.* **1992**, *188*, 550.
68. Haddon, R. C.; Fukunaga, T. *Tetrahedron Lett.* **1980**, *21*, 1191.
69. Pearson, R. G. *Hard and soft acids and bases*; Dowden, Hutchinson and Ross: Stroudsburg, PA, 1973.
70. Manolopoulos, D. E.; May, J. C.; Down, S. *Chem. Phys. Lett.* **1991**, *181*, 105.
71. Hoffmann, R.; Schleyer, P. V. R.; Schaefer, H. F. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2008**, *47*, 7164.
72. Katrizky, A.; Barczymski, P.; Musumarra, G.; Pisano, D.; Szafran, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, *111*, 7.
73. Schleyer, P. V. R.; Manoharan, M.; Jiao, H.; Stahl, F. *Org Lett.* **2001**, *3*, 3643.
74. Chen, Z.; Wannere, C. S.; Corminboeuf, C.; Puchta, R.; Schleyer, P. V. R. *Chem Rev.* **2005**, *105*, 3842.
75. London, F. *J. Phys. Radium.* **1937**, *8*, 397.
76. Cheeseman, J. R.; Trucks, G. W.; Keith, T. A.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **1996**, *104*, 5497.
77. Schreckenbach, G.; Ziegler, T.; *J. Phys. Chem.* 1995, *99*, 606.
78. Schreckenbach, G.; Ziegler, T.; *Theor. Chem. Acc.* 1998, *99*, 71.
79. Simkin, B. Y.; Minkin, V. I.; Glukhotsev, M. N. *Adv. Heterocyclic Chem.* **1993**, *56*, 304.
80. Foster, J. P.; Weinhold, F. *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 7211.
81. Reed, A. E.; Curtiss, L. A.; Weinhold, F. *Chem. Rev.* **1988**, *88*, 899.
82. Katrizky, A.; Barczymski, P.; Musumarra, G.; Pisano, D.; Szafran, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, *111*, 7.
83. Radhakrishnan, S.; Anathakrishnan, S. J.; Somanathan, N. *Bull. Mater. Sci.* **2011**, *34*, 713.

84. Marzari, N.; Vanderbilt, D. *Phys. Rev. B* **1997**, *56*(20), 12847.

## **Chapter 6**

1. Stohrer, W. D.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, *94*, 779-786.
2. Stohrer, W. D.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, *94*, 1661-1668.
3. Jean, Y.; Lledos, A.; Burdett, J. K.; Hoffmann, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, *110*, 4506-4516.
4. Butcher, A. V.; Chatt, J. *J. Chem. Soc. A*, **1970**, *0*, 2652-2656.
5. Goodgame, M. M.; Goddard III, W. A. *Phys. Rev. Lett.* **1985**, *54*, 661.
6. Moskovits, M.; Limm, W.; T. Mejean. *J. Chem. Phys.* **1985**, *82*, 4875.
7. Rohmer, M. M.; Benard, M. *Chem. Soc. Rev.* **2001**, *30*, 340-354.
8. Wieghardt, K.; Backes-Dahmann, G.; Nuber, B.; Weiss, J. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1985**, *24*, 777-778.
9. Parkin, G. *Acc. Chem. Res.* **1992**, *25*, 455-460.
10. Parkin, G. *Chem. Rev.* **1993**, *93*, 887-912.
11. Rohmer, M. M.; Strich, A.; Benard, M.; Malrieu, J. P. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 9126-9134.
12. Song, J; Hall, M. B. *Inorg. Chem.* **1991**, *30*, 4433-4437.
13. Comba, P.; Hauser, A.; Kerscher, M.; H. Pritzkow. *Angew. Chem.* **2003**, *42*, 4536-4540.
14. Antol, I.; Eckert-Maksic', M.; Lischka, H.; Maksic', Z. B. *Chem. Phys. Chem.* **2004**, *5*, 975-981.
15. Petrov, K. T.; Pinter, B.; Veszpremi, T. *J. Organomet. Chem.* **2012**, *706*, 84-88.
16. Goswami, T.; Paul, S.; Mandal, S.; Misra, A.; Anoop, A.; Chattaraj P. K. *Int. J. Quantum Chem.* **2015**, *115*, 426-433.
17. Chattaraj, P. K.; Roy, D. R.; Elango, M.; Subramanian, V. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 9590-9597.
18. Chattaraj, P. K.; Giri, S. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **2008**, *865*, 53-56.
19. Giri, S.; Roy, D. R.; Duley, S.; Chakraborty, A.; Parthasarathi, R.; Elango, M.; Vijayaraj, R.; Subramanian, V.; Islas, R.; Merino, G.; Chattaraj, P. K. *J. Comp. Chem.* **2010**, *31*, 1815-1821.
20. Roy, D. R.; Chattaraj, P. K. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112*, 1612-1621.
21. Brito, B. G. A.; Hai, G. Q.; Candido, L. *Chem. Phys. Lett.* **2013**, *586*, 108-110.
22. Paul, S.; Misra, A. *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 3234-3246.
23. Mondal, S.; Chattaraj, P. K. *Chem. Phys. Lett.* **2014**, *593*, 128-131.
24. Jiménez-Halla, J. O. C.; Matito, E.; Blancafort, L.; Robles, J.; Solà, M. *J. Comput. Chem.* **2011**, *32*, 372-373.
25. Di Nicola, F. P.; Lanzi, M.; Marchetti, F.; Pampaloni, G.; Zacchini, S. *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 12653-12659.

26. Renner, R. *Z. Phys.* **1934**, *92*, 172-193.
27. Herzberg, G.; Teller, E. *Z. Phys. Chemie B.* **1933**, *21*, 410-446.
28. Herzberg, G. *Molecular Spectra and Molecular Structure* (Reprint Edition, Krieger, Malabar, (1991) Vol. III.
29. GaussView, Version 5, R. Dennington, T. Keith, J. Millam, *Semichem Inc.* Shawnee Mission KS. 2009.
30. Gaussian 09, Revision C.01, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Li, X.; Caricato, M.; Marenich, A. V.; Bloino, J.; Janesko, B. G.; Gomperts, R.; Mennucci, B.; Hratchian, H. P.; Ortiz, J. V.; Izmaylov, A. F.; Sonnenberg, J. L.; Williams-Young, D.; Ding, F.; Lipparini, F.; Egidi, F.; Goings, J.; Peng, B.; Petrone, A.; Henderson, T.; Ranasinghe, D.; Zakrzewski, V. G.; Gao, J.; Rega, N.; Zheng, G.; Liang, W.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Throssell, K.; Montgomery, J. A., Jr.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M. J.; Heyd, J. J.; Brothers, E. N.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Keith, T. A.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A. P.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Millam, J. M.; Klene, M.; Adamo, C.; Cammi, R.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Farkas, O.; Foresman, J. B.; Fox, D. J. *Gaussian, Inc.*, Wallingford CT, 2010.
31. McDouall, J. J.; Peasley, K.; Robb, M. A. *Chem. Phys. Lett.*, **1988**, *148*, 183-189.
32. Bernardi, F.; Bottoni, A.; Field, M. J.; Guest, M. F.; Hillier, I. H.; Robb, M. A.; Venturini, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1988**, *110*, 3050-3055.
33. Tonachini, G.; Schlegel, H. B.; Bernardi, F.; Robb, M. A. *J. Am. Chem. Soc.*, **1990**, *112*, 483-491
34. Marx, D.; Hutter, J.; Grotendorst, J. (Ed.), *Proceedings of Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry*, John von Neumann Institute for Computing, Jurich, Germany (2000).
35. Schlegel, H. B.; Millam, J. M.; Iyengar, S. S.; Voth, G. A.; Daniels, A. D.; Scuseria, G. E.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **2011**, *114*, 9758-9763.
36. Iyengar, S. S.; Schlegel, H. B.; Millam, J. M.; Voth, G. A.; Scuseria, G.E.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **2011**, *115*, 10291-10302.
37. Schlegel, H. B.; Iyengar, S. S.; Li, X.; Millam, J. M.; Voth, G. A.; Scuseria, G. E.; Frisch, M. J. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 8694-8704.
38. Pearson, R. G. Recent Advances in the Concept of Hard and Soft Acids and Bases. *J. Chem. Edu.* **1987**, *64*, 561-567.
39. Parr, R. G.; Chattaraj, P. K. *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 1854-1855.
40. Ayers P. W.; Parr, R. G. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 2010-2018.
41. Chattaraj, P. K.; Sengupta, S. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 16126-16130.
42. Fuentealba, P.; Simon-Manso, Y.; Chattaraj, P. K. *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 3185-3187.
43. Pan, S.; Solà, M.; Chattaraj, P. K. *J. Phys. Chem. A* **2013**, *117*, 1843-1852.
44. Saha, R.; Pan, S.; Chattaraj, P. K. *Molecules* **2016**, *21*, 1477-1493.

45. Chamorro, E.; Chattaraj, P. K.; Fuentealba, P. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 7068-7072.
46. Parthasarathi, R.; Elango, M.; Subramanian, V.; Chattaraj, P. K. *Theo. Chem. Acc.* **2005**, *113*, 257-266.
47. Geerlings, P.; De, P. F.; Langenaeker, W. *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 1793-1874.
48. Chattaraj, P. K. *J. Indian. Chem. Soc.* **1992**, *69*, 173-183.
49. Parr, R. G.; Donnelly, R. A.; Levy, M.; Palke, W. E. *J. Chem. Phys.* **1978**, *68*, 3801.
50. Chattaraj, P. K.; Sarkar, U.; Roy, D. R. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 2065-2091.
51. Chattaraj, P. K.; Roy, D. R. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, PR46-PR74.
52. Parr, R. G.; Szentpaly, L. v.; Liu, S. *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 1922-1924.
53. T. A. Koopmans, *Physica* **1993**, *1*, 104-113.
54. Janak, J. F. *Phys. Rev. B.* **1978**, *18*, 7165.
55. Paul, S.; Goswami, T.; Misra, A. *AIP Advances*, **2015**, *5*, 107211.
56. Goswami, T.; Homray, M.; Paul, S.; Bhattacharya, D.; Misra, A. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 11744-11747.
57. Homray, M.; Paul, S.; Misra, A. *Bull Mater Sci.*, **2019**, *42*, 46.
58. Anderson, P.W. *Phys. Rev.* **1950**, *79*, 350.
59. Anderson, P. W. *Phys. Rev.* **1959**, *115*, 2.
60. Anderson, P. W. Theory of the magnetic interaction: exchange in insulators and superconductors .In solid state physics; Turnbull, F., Seitz, F., Eds.; Academic Press: New York, **1963**; Vol. 14, p 99.
61. Paul, S.; Misra, A. *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 843-853.
62. Lu, T.; Chen, F. *J. Comp. Chem.* **2012**, *33*, 580-592.
63. The DFT code, OPENMX, is available at <http://www.openmx-square.org> under the GNU General Public License.
64. Dewar, M. J. S.; Healy, E. F.; Stewart, J. J. P. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2*, **1984**, *80*, 227-233.
65. Walsh, A. D. *J. Chem. Soc.* **1953**, *0*, 2260-2266.
66. Peric, M.; Engles, E.; Peyerimhoff, S. D. In *Quantum Mechanical Electronic Structure Calculations with Chemical Accuracy*; Langhoff, S. R., Ed., Kluwer: Dordrecht, 1995, p 261.
67. Kar, T.; Scheiner, S. *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 8121-8124.
68. Torrent-Sucarrat, M.; Blancafort, L.; Duran, M.; Luis, J.; Solà, M. In *Theoretical Aspects of Chemical Reactivity*; Toro-Labbe, A., Ed. Elsevier: Amsterdam, 2007.
69. Torrent-Sucarrat, M.; Luis, J. M.; Duran, M.; Solà, M. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 10561.
70. Chattaraj, P. K.; Pérez, P.; Zevallos, J.; Toro-Labbé, A. *J. Phys. Chem. A* **2001**, *105*, 4272-4283.

## Chapter 7

1. Ruppel, W. G. *Z. Physiol. Chem.* **1899**, *26*, 218–232.
2. Gommers-Ampt, J. H.; Borst, P. *FASEB J.* **1995**, *9*, 1034–1042.
3. Johnson, T. B.; Coghill, R. D. *J. Am. Chem. Soc.* **1925**, *47*, 2838–2844.
4. Wyatt, G. R. *Nature* **1950**, *166*, 237–238.
5. Bird, A. *Genes Dev.* **2002**, *16*, 6–21.
6. Deaton, A.; Bird, A. *Genes Dev.* **2011**, *25*, 1010–1022.
7. Jones, P. A. *Nat. Rev. Genet.* **2012**, *13*, 484–492.
8. Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev. B* **1965**, *140*, A1133–A1138.
9. Varsano, D.; Di Felice, R.; Marques, M. A. L.; Rubio, A. *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 7129–7138.
10. Dkhissi, A.; Blossey, R. *J. Phys. Chem. B* **2008**, *112*, 9182–918.
11. GaussView, Version 5, R. Dennington, T. Keith, J. Millam, *Semichem Inc.* Shawnee Mission KS. 2009.
12. Gaussian 09, Revision C.01, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Li, X.; Caricato, M.; Marenich, A. V.; Bloino, J.; Janesko, B. G.; Gomperts, R.; Mennucci, B.; Hratchian, H. P.; Ortiz, J. V.; Izmaylov, A. F.; Sonnenberg, J. L.; Williams-Young, D.; Ding, F.; Lipparini, F.; Egidi, F.; Goings, J.; Peng, B.; Petrone, A.; Henderson, T.; Ranasinghe, D.; Zakrzewski, V. G.; Gao, J.; Rega, N.; Zheng, G.; Liang, W.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Throssell, K.; Montgomery, J. A., Jr.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M. J.; Heyd, J. J.; Brothers, E. N.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Keith, T. A.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A. P.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Millam, J. M.; Klene, M.; Adamo, C.; Cammi, R.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Farkas, O.; Foresman, J. B.; Fox, D. J. *Gaussian, Inc.*, Wallingford CT, 2010.
13. Yanai, T.; Tew, D. P.; Handy, N. C. *ChemPhysLett* **2004**, *393*, 51–57.
14. Geerlings, P.; De, P. F.; Langenaeker, W. *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 1793–1874.
15. Chattaraj, P. K. *J. Indian. Chem. Soc.* **1992**, *69*, 173–183.
16. Parr, R. G.; Donnelly, R. A.; Levy, M.; Palke, W. E. *J. Chem. Phys.* **1978**, *68*, 3801.
17. Chattaraj, P. K.; Sarkar, U.; Roy, D. R. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 2065–2091.
18. Chattaraj, P. K.; Roy, D. R. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, PR46–PR74.
19. Parr, R. G.; Szentpaly, L. v.; Liu, S. *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 1922–1924.
20. Koopmans, T. A. *Physica* **1993**, *1*, 104–113.
21. Janak, J. F. *Phys. Rev. B.* **1978**, *18*, 7165.
22. Roy, R. K.; Pal, S.; Hirao, K. *J. Chem. Phys.* **1999**, *110*, 8236
23. Roy, R. K.; Pal, S.; Hirao, K. *J. Chem. Phys.* **2000**, *113*, 1372
24. Ayers, P. W.; Morrison, R. C.; Roy, R. K. *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 8731.

25. Hocquet, A.; Toro-Labbé, A.; Chermette, H. *J.Mol Struc(THEOCHEM)* **2004**, 686, 213-218.
26. Melin, J.; Aparicio, F.; Subramanian, V.; Galván, M.; Chattaraj, P.K. *J.Phys. Chem. A* **2008**, 108, 2487-2491.
27. Lu, T.; Chen, F. *J. Comp. Chem.* **2012**, 33, 580-592.
28. Schleyer, P. v. R.;Maerke, C.; Dransfeld, A.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. v. E. *J. Am. Chem. Soc.*, 1996, 118, 6317.