

BIBLIOGRAPHY

CHAPTER 1

- (1) Du Trémolet de Lacheisserie, É.; Gignoux, D.; Schlenker, M. (2005). *Magnetism: Fundamentals*. Springer. pp. 3–6. ISBN 0-387-22967-1.
- (2) (a) Tamaki, H.; Zhong, Z. J.; Matsumoto, N.; Kida, S.; Koikawa, M.; Achiwa, N.; Hashimoto, Y.; Okawa, H. *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, *114*, 18, 6974–6979. (b) Miyasaka, H.; Saitoh, A.; Abe, S. *Coord. Chem. Rev.* **2007**, *251*, 2622–2664. (c) Okawa, H.; Mitsumi, M.; Ohba, M.; Kodera, M.; Matsumoto, N. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1994**, *67*, 2139–2144. (d) Tanase, S.; Reedijk, J. *Coord. Chem. Rev.* **2006**, *250*, 2501–2510. (e) Ohba, M.; Okawa, H. *Coord. Chem. Rev.* **2000**, *198*, 313–328. (f) Saalfrank, R.W.; Bernt, I. *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **1998**, *3*, 407–413. (g) Matthews, C. J.; Avery, K.; Xu, Z.; Thompson, L. K.; Zhao, L.; Miller, D. O.; Biradha, K.; Poirier, K.; Zaworotko, M. J.; Wilson, C.; Goeta, A. E.; Howard, J. A. K. *Inorg. Chem.* **1999**, *38*, 5266–5276.
- (3) (a) Ratera, I.; Jaume Veciana, J. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 303–349. (b) Iwamura, H. *Adv. Phys. Org. Chem.* **1991**, *26*, 179–253. (c) Dougherty, D. A. *Acc. Chem. Res.* **1991**, *24*, 88–94. (d) Iwamura, H.; Koga, N. *Acc. Chem. Res.* **1993**, *26*, 346–351. (e) Matsuda, K.; Iwamura, H. *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **1997**, *2*, 446–450.
- (4) (a) Crayston, J. A.; Devine, J. N.; Walton, J. C. *Tetrahedron*, **2000**, *56*, 7829–7857. (b) Miller, J. S.; Epstein, A. J. *MRS Bull.* **2000**, *25*, 21–30.
- (5) (a) Itoh K.; Kinoshita, M. *Molecular Magnetism*, Gordon and Breach, Amsterdam (Kodansha asco publisher, Tokyo), (2000). (b) Lahti, P. M. *Magnetic Properties of Organic Materials*, Marcel Dekker, New York (1999).
- (6) Verdaguer, M. *Polyhedron* **2001**, *20*, 1115–1128.
- (7) Miller, J.S. *Mater. Today* **2014**, *17*, 224–235.
- (8) Kahn, O. (1993). *Molecular Magnetism*. John Wiley & Sons, Singapore.
- (9) Bleaney, B.; Bowers, K.D. *Proc. R. Soc. A* **1952**, *214*, 451–465.
- (10) Wickman, H. H.; Trozzolo, A. M.; Williams, H. J.; Hull, G. W.; Merritt, F. R. *Phys. Rev.* **1967**, *155*, 563–566.
- (11) (a) Tamura, M.; Nakazawa, Y.; Shiomi, D.; Nozawa, K.; Hosokoshi, Y.; Ishikawa, M.; Takahashi, M.; Kinoshita, M. *Chem. Phys. Lett.* **1991**, *186*, 401–404. (b) Nakazawa, Y.; Tamura, M.; Shirakawa, N.; Shiomi, D.; Takahashi, M.; Kinoshita, M.; Ishikawa, M. *Phys. Rev. B* **1992**, *46*, 8906–8914.
- (12) (a) Sessoli, R.; Tsai, H.-L.; Schake, A.R.; Wang, S.; Vincent, J.B.; Folting, K.; Gatteschi, D.; Christou, G.; Hendrickson, D.N. *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, *115*, 1804–1816. (b) Packwood, D. M., Reaves, K. T., Federici, F. L., Katzgraber, H. G., & Teizer, W. *Proc. R. Soc. A* **2013**, *469*, 20130373.

- (13) Green, J. E.; Wook Choi, J.; Boukai, A.; Bunimovich, Y.; Johnston-Halperin, E.; DeFonno, E.; Luo, Y.; Sheriff, B. A.; Xu, K.; Shin, Y. S.; Tseng, H. -R.; Stoddart, J. F.; Heath, J. R. *Nature* **2007**, *445*, 414–418.
- (14) (a) Gatteschi, D.; Sessoli, R.; Villain, J. *Molecular Nanomagnets*; Oxford University Press: Oxford, U.K., **2006**. (b) Gatteschi, D. *Adv. Mater.* **1994**, *6*, 635–645.
- (15) (a) Coronado, E.; Epsetin, A. J. *J. Mater. Chem.* **2009**, *19*, 1670–1671. (b) Bogani, L.; Wernsdorfer, W. *Nat. Mater.* **2008**, *7*, 179–186.
- (16) Leuenberger, M. N.; Loss, D. *Nature* **2001**, *410*, 789–793.
- (17) Rumberger, E. M.; Zakharov, L. N.; Rheingold, A. L.; Hendrickson, D. N. *Inorg. Chem.* **2004**, *43*, 6531–6533.
- (18) (a) Barra, A. L.; Gatteschi, D.; Sessoli, R. *Chem. Eur. J.*, **2000**, *6*, 1608–1614. (b) Wieghardt, K.; Pohl, K.; Jibril I.; Huttner, G. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1984**, *23*, 77–78.
- (19) Castro, S. L.; Sun, Z. M.; Grant, C. M.; Bollinger, J. C.; Hendrickson, D. N.; Christou, G. *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, *120*, 2365.
- (20) (a) Sessoli, R.; Powell, A. K. *Coord. Chem. Rev.* **2009**, *253*, 2328–2341. (b) Feltham, H. L. C.; Brooker, S. *Coord. Chem. Rev.* **2014**, *276*, 1–33. (c) Zhang, P.; Guo, Y. -N.; Tang, J. *Coord. Chem. Rev.* **2013**, *257*, 1728–1763. (d) Layfield, R. *Organometallics*, **2014**, *33*, 1084–1099. (e) Pointillart, F.; Cador, O.; Guennic, B. L.; Ouahab, L. *Coord. Chem. Rev.* **2017**, *346*, 150–175. (f) Liu, K.; Zhang, X.; Meng, X.; Shi, W.; Cheng, P.; Powell, A. K. *Chem. Soc. Rev.* **2016**, *45*, 2423–2439. (g) McAdams, S. G.; Ariciu, A. -M.; Kostopoulos, A. K.; Walsh, J. P. S.; Tuna, F. *Coord. Chem. Rev.* **2017**, *346*, 216–239.
- (21) (a) Wang, Y.-L.; Gu, B.; Ma, Y.; Xing, C.; Wang, Q.-L.; Li, L.-C.; Cheng, P.; Liao, D.-Z. *CrystEngComm*. **2014**, *16*, 2283–2289. (b) Silva, M.R.; Martín-Ramos, P.; Coutinho, J.T.; Pereira, L.C.J.; Martín-Gil, J. *Dalton Trans.* **2014**, *43*, 6752–6761. (c) Li, Q.-W.; Liu, J.-L.; Jia, J.-H.; Leng, J.-D.; Lin, W.-Q.; Chen, Y.-C.; Tong, M.-L. *Dalton Trans.* **2013**, *42*, 11262–11270. (d) Jiménez, J.-R.; Díaz-Ortega, I. F.; Ruiz, E.; Aravena, D.; Pope, S. J. A.; Colacio, E.; Herrera, J.M. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 14548–14559. (e) Costes, J.P.; Titos-Padilla, S.; Oyarzabal, I.; Gupta, T.; Duhayon, C.; Rajaraman, G.; Colacio, E. *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 15785 – 15796. (f) Ren, M.; Xu, Z.-L.; Bao, S.-S.; Wang, T.-T.; Zheng, Z.-H.; Ferreira, R.A.S.; Zheng, L.-M.; Carlos, L.D. *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 2974–2982.
- (22) Zhang, K.; Montigaud, V.; Cador, O.; Li, G. -P.; Guennic, B. L.; Tang, J. -K.; Wang, Y. -Y. *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 8550–8557.
- (23) (a) Meihaus, K. R.; Long, J. R. *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 2517–2528. (b) Cooper, O. J.; Mills, D. P.; McMaster, J.; Moro, F.; Davies, E. S.; Lewis, W.; Blake, A. J.; Liddle, S. T. *Angew. Chem.* **2011**, *123*, 2431–2434. (c) Mills, D. P.; Moro, F.; McMaster, J.; van Slageren, J.; Lewis, W.; Blake, A. J.; Liddle, S. T. *Nat. Chem.* **2011**, *3*, 454–460. (d) Antunes, M. A.; Pereira, L. C.; Santos, I. C.; Mazzanti, M.; Marcalo, J.; Almeida, M. *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 9915–9917. (e) King, D. M.; Tuna, F.; McMaster, J.; Lewis, W.; Blake, A. J.; McInnes, E. J.; Liddle, S. T. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, *52*, 4921–4924. (f) Rinehart, J. D.; Long, J. R. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 12558–12559. (g) Mougél, V.; Chatelain, L.; Pécaut, J.; Caciuffo, R.; Colineau, E.;

- Griveau, J. C.; Mazzanti, M. *Nat. Chem.* **2012**, *4*, 1011–1017. (h) Pereira, L. C.; Camp, C.; Coutinho, J. T.; Chatelain, L.; Maldivi, P.; Almeida, M.; Mazzanti, M. *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 11809–11811.
- (24) Gaggioli, C. A.; Gagliardi, L. *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 8098-8105.
- (25) (a) Gomberg, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1900**, *22*, 757-771. (b) Gomberg, M. *J. Am. Chem. Soc.*, **1901**, *23*, 496-502. (c) Gomberg, M. *Chem. Rev.* **1924**, *1*, 91-141.
- (26) (a) Leonid Sheps, L.; Andrew C. Crowther, A. C.; Christopher G. Elles, C. G.; F. Fleming Crim, F. F. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 4296-4302. (B) Gibian, M. J.; Corley, R. C. *Chemical Reviews.* **1973**, *73*, 441-464. (C) Rozantsev, E. G.; Loshadkin, D. V. *Designed Monomers and Polymers.* **2001**, *4*, 281–300.
- (27)(a) Kahn, O. *Magnetism: A Supramolecular Function*, Kluwer, Dordrecht, **1996**. (b) Itoh, K.; Kinoshita, M. *Molecular Magnetism*, Kodansha (Gordon and Breach), Tokyo, **2000**. (c) Power, P. P. *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 789-810.(d)Tang, B.; Zhao, J.; Xu, J. –F.; Zhang, X. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 1192-1204.(e) Ventosa, N.; Ruiz, D.; Rovira, C.; Veciana, J. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1993**, *232*, 333-342. (f) Ballester, M. *Adv. Phys. Org. Chem.* **1989**, *25*, 267-445. (g) Armet, O.; Veciana, J.; Rovira, C.; Riera, J.; Castaner, J.; Molins, E.; Rius, J.; Miravittles, C.; Olivella, S.; Brichfeus, J. *J. Phys. Chem.* **1987**, *91*, 5608-5616. (h) Ballester, M.; Pascual, I.; Riera, J.; Castaner, J. *J. Org. Chem.* **1991**, *56*, 217-225. (i) Domingo, V. M.; Castaner, J. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1995**, 895-896.
- (28) Li, Z.; Moalin, M.; Zhang, M.; Vervoort, L.; Mommers, A.; Haenen G. R. M. M. *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, *21*, 2033.
- (29) (a) Shiomi, D.; Ito, K.; Nishizawa, M.; Sato, K.; Takui, T.; Itoh, K. *Syn. Metals* **1999**, *103*, 2271-2272.(b) Romero, F. M.; Ziessel, R.; Bonnet, M.; Pontillon, Y.; Ressouche, E.; Schweizer, J.; Delley, B.; Grand, A.; Paulsen, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 1298-1309. (c) Nagashima, H.; Irisawa, M.; Yoshioka, N.; Inoue, H. *Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sci. Technol. Sect. A* **2002**, *376*, 371-376.(d) Rajadurai, C.; Ivanova, A.; Enkelmann, V.; Baumgarten, M. *J. Org. Chem.* **2003**, *68*, 9907-9915.(f) Deumal, M.; Robb, M. A.; Novoa, J. J. *Polyhedron* **2003**, *22*, 1935-1944. (g) Ishida, T.; Iwamura, H. *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 4238-4241. (h) Kanno, F.; Inoue, K.; Koga, N.; Iwamura, H. *J. Phys. Chem.* **1993**, *97*, 13267-13272. (i) Inoue, K.; Iwamura, H. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 3173-3174. (j) Iwamura, H.; Inoue, K. *Adv. Mater.* **1996**, *8*, 73-76. (k) Inoue, K. *π -Electron Magnetism.* **2001**, *100*, 61-91.
- (30) (a) Ali, M. E.; Roy, A. S.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111*, 5523–5527. (b) Wautelet, P.; Le Moigne, J.; Videva, V.; Turek, P. *J. Org. Chem.* **2003**, *68*, 8025–8036.(c) Ali, M. E.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 2776–2784. (d) Latif, I. A.; Singh, V. P.; Bhattacharjee, U.; Panda, A.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 6648–6656. (e) Ali, M. E.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 10525–10527.
- (31) Nogami, T.; Ishida, T.; Yasui, M.; Iwasaki, F.; Takeda, N.; Ishikawa, M.; Kawakami, T.; Yamaguchi, K. *Bull. Chem. Soc. Japan* **1996**, *69*, 1841-1848.
- (32) Kuhn, R.; Trischmann, H. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1963**, *2*, 155.

- (33) (a) Hicks, R. G. *Can. J. Chem.* **2004**, *82*, 1119-1127. (b) Hicks, R. G.; Lemaire, M. T.; Öhrström, L.; Richardson, J. F.; Thompson, L. K.; Xu, Z. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 7154-7159.
- (34) Hicks, R. G.; Hooper, R. *Inorg. Chem.* **1999**, *38*, 284-286.
- (35) (a) Hicks, R. G.; Ohrstrom, L.; Patenaude, G. W. *Inorg. Chem.* **2001**, *40*, 1865-1870. (b) Koivisto, B. D.; Ichimura, A. S.; McDonald, R.; Lemaire, M. T.; Thompson, L. K.; Hicks, R. G. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 690-691. (c) Koivisto, B. D.; Hicks, R. G. *Coord. Chem. Rev.* **2005**, *249*, 2612-2630.
- (36) (a) Mukai, K.; Konishi, K.; Nedachi, K.; Takeda, K. *J. Magn. Magn. Mater.* **1995**, *140*, 1449-1450. (b) Neugebauer, F. A.; Fisher, H.; Siegel, R. *Chem. Ber.* **1988**, *121*, 815-822.
- (37) (a) Mukai, K.; Nedachi, K.; Takiguchi, M.; Kobayashi, T.; Amaya, K. *Chem. Phys. Lett.* **1995**, *238*, 61-64. (b) Kremer, R. K.; Kanellakopoulos, B.; Bele, P.; Brunner, H.; Neugebauer, F. A. *Chem. Phys. Lett.* **1994**, *230*, 255-259. (c) Mito, M.; Nakano, H.; Kawae, T.; Hitaka, M.; Takagi, S.; Deguchi, H.; Suzuki, K.; Mukai, K.; Takeda, K. *J. Phys. Soc. Jpn.* **1997**, *66*, 2147-2156. (d) Mukai, K.; Nuwa, M.; Morishita, T.; Muramatsu, T.; Kobayashi, T. C.; Amaya, K. *Chem. Phys. Lett.* **1997**, *272*, 501-505. (e) Mukai, K.; Wada, N.; Jamali, J. B.; Achiwa, N.; Narumi, Y.; Kindo, K.; Kobayashi, T.; Amaya, K. *Chem. Phys. Lett.* **1996**, *257*, 538-544.
- (38) Ballester, M. *Acc. Chem. Res.* **1985**, *18*, 380-387.
- (39) (a) Haddon, R. C. *Nature* **1975**, *256*, 394-396. (b) Cordes, A. W.; Haddon, R. C.; Oakley, R. T. *Phosphorus. Sulfur. Silicon Relat. Elem.* **2004**, *179*, 673-684.
- (40) Rawson, J. M.; Alberola, A.; Whalley, A. *J. Mater. Chem.* **2006**, *16*, 2560-2575.
- (41) (a) Vegas, A.; Perez-Salazar, A.; Banister, A. J.; Hey, R. G. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1980**, 1812-1815. (b) Haynes, D. A. *CrystEngComm* **2011**, *13*, 4793-4805.
- (42) (a) Stubbe, J.; Van der Donk, W.A. *Chem. Rev.* **1998**, *98*, 705-762. (b) Amorati, R.; Lucarini, M.; Mugnaini, V.; Pedulli, G. F.; Minisci, F.; Recupero, F.; Fontana, F.; Astolfi, P.; Greci, L. *J. Org. Chem.* **2003**, *68*, 1747-1754.
- (43) (a) Hubbel, W. L.; Gross, A.; Langen, R.; Lietzow, M.A. *Curr. Opin. Struct. Biol.* **1998**, *8*, 649-656. (b) Fanucci G.E.; Cafiso, D.S. *Curr. Opin. Struct. Biol.* **2006**, *16*, 644-653. (c) Roques, N.; Mugnaini, V.; Veciana, J. *Top. Curr. Chem.* **2010**, *293*, 207-258.
- (44) (a) Gatteschi, D. *Adv. Mater.* **1994**, *6*, 635-645. (b) Train, C.; Noreland, L.; Baumgarten, M. *Coord. Chem. Rev.* **2009**, *253*, 2342-2351.
- (45) (a) Hamachi, K.; Matsuda, K.; Itoh, T.; Iwamura, H. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1998**, *71*, 2937-2943. (b) Matsuda, K.; Irie, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 7195-7201. (c) Matsuda, K.; Irie, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 8309-8310. (d) Matsuda, K.; Irie, M. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **2000**, *345*, 155-160.
- (46) (a) Vyas, S.; Ali, M. E.; Hossain, E.; Patwardhan, S.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 4213-4215. (b) Barone, V.; Bencini, A.; Matteo, A. di. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *7863*, 10831-10837. (c) Latif, I. a; Panda, A.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 1595-1600. (d) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Misra, A.; Klein, D. J. *Theor. Chem. Acc.* **2009**, *127*, 57-67.

- (47) Ziessel, R.; Stroh, C.; Heise, H.; Khler, F. H.; Turek, P.; Claiser, N.; Souhassou, M.; Lecomte, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 12604-12613.
- (48) Catala, L.; Le Moigne, J.; Gruber, N.; Novoa, J. J.; Rabu, P.; Belorizky, E.; Turek, P. *Chem. Eur. J.* **2005**, *11*, 2440-2454.
- (49) Trindle, C.; Datta, S. N.; Mallik, B. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 12947-12951.
- (50) (a) Bhattacharya, D.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A*, **2009**, *113*, 5470–5475. (b) Paul, S.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A*, **2010**, *114*, 6641–6647. (c) S. Paul, A. Misra, *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 843-853.
- (51) Coey, J. M. D. *Magnetism and Magnetic Materials*, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., **2010**, ISBN 13: 9780521816144.
- (52) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Misra, A.; Klein, D. J. *Theor. Chem. Acc.* **2010**, *127*, 57-67.
- (53) (a) Shil, S.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 2022-2027. (b) Saha, A.; Latif, I. A.; Datta, S.N. *J. Phys. Chem. A* **2011**, *115*, 1371-1379. (c) Ali, Md. E.; Staemmler, V.; Illas, F.; Oppeneer, P.M.; *J. Comput. Theory Chem.* **2013**, *9*, 5216-5220.
- (54) (a) Rancurel, C.; Heise, H.; Köhler, F. H.; Schatzschneider, U.; Rentschler, E.; Vidal-Gancedo, J.; Veciana, J.; Sutter, J. –P. *J. Phys. Chem. A* **2004**, *108*, 5903-5914. (b) Polo, V.; Alberola, A.; Andres, J.; Anthony, J.; Pilkington, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 857–864. (c) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Panda, A.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 11833–11841. (d) Barclay, T. M.; Hicks, R. G.; Ichimura, A. S.; Patenaude, G. W. *Can. J. Chem.* **2002**, *80*, 1501–1506.
- (55) Ali, M. E.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 13232–13237.
- (56) (a) Ghosh, R.; Seal, P.; Chakrabarti, S. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 93-96. (b) Seal, P.; Chakrabarti, S. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112*, 3409-3413.
- (57) (a) Miller, J. S.; Drillon, M. D. *Magnetism: Molecules to Materials II*; Wiley-VCH: Weinheim, Germany, **2001**. (b) Rajca, A. *Chem. Eur. J.* **2002**, *8*, 4834-4841.
- (58) (a) Pappas, C. *Physics* **2012**, *5*, 28. (b) Togawa, Y.; Koyama, T.; Takayanagi, K.; Mori, S.; Kousaka, Y.; Akimitsu, J.; Nishihara, S.; Inoue, K.; Ovchinnikov, A. S.; Kishine, *J. Phys. Rev. Lett.* **2012**, *108*, 107202.
- (59) (a) Crivillers, N.; Mas-Torrent, M.; Vidal-Gancedo, J.; Veciana, J.; Rovira, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 5499–5506. (b) Yulikov, M.; Lueders, P.; Warsi, M.F.; Chechik, V.; Jeschke, G. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 10732–10746. (c) Miller, J. S.; Gatteschi, D. *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 3065–3066.
- (60) (a) Boehme, C.; Lupton, J. M. *Nat. Nanotechnol.* **2013**, *8*, 612–615. (b) Sun, D.; Ehrenfreund, E.; Vardeny, Z. V. *Chem. Commun. (Cambridge)* **2014**, *50*, 1781–1793.
- (61) (a) Oyaizu, K.; Nishide, H. *Adv. Mater.* **2009**, *21*, 2339–2344. (b) Tomlinson, E. P.; Hay, M. E.; Boudouris, B. W. *Macromolecules* **2014**, *47*, 6145–6158. (c) Lloveras, V.; Vidal-Gancedo, J.; Figueira-Duarte, T. M.; Nierengarten, J. -F.; Novoa, J. J.; Mota, F.; Ventosa, N.; Rovira, C.; Veciana, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 5818–5833.
- (62) (a) Matsumoto, K.; Hyodo, F.; Matsumoto, A.; Koretsky, A. P.; Sowers, A. L.; Mitchell, J. B.; Krishna, M. C. *Clin. Cancer Res.* **2006**, *12*, 2455–2462. (b) Metz, J. M.; Smith, D.; Mick, R.; Lustig, R.; Mitchell, J.; Cherakuri, M.; Glatstein, E.; Hahn, S. M. *Clin. Cancer Res.* **2004**, *10*, 6411–6417. (c) Huang, Z.; Jiang, J.; Belikova, N.

- A.; Stoyanovsky, D. A.; Kagan, V. E.; Mintz, A. H. *J. Neuro-Oncol.* **2010**, *100*, 1–8.
- (d) Francese, G.; Dunand, F. A.; Loosli, C.; Merbach, A. E.; Decurtins, S. *Magn. Reson. Chem.* **2003**, *41*, 81–83.
- (63) (a) Bosman, A. W.; Janssen, R. A. J.; Meijer, E. W. *Macromolecules* **1997**, *30*, 3606–3611. (b) Han, H. J.; Sebby, K. B.; Singel, D. J.; Cloninger, M. J. *Macromolecules* **2007**, *40*, 3030–3033. (c) Lei, X. G.; Jockusch, S.; Turro, N. J.; Tomalia, D. A.; Ottaviani, M. F. *J. Colloid Interface Sci.* **2008**, *322*, 457–464. (d) Fukuzaki, E.; Takahashi, N.; Imai, S.; Nishide, H.; Rajca, A. *Polym. J.* **2005**, *37*, 284–293. (e) Badetti, E.; Lloveras, V.; Wurst, K.; Sebastián, R. M.; Caminade, A. -M.; Majoral, J. -P.; Veciana, J.; Vidal-Gancedo, J. *Org. Lett.* **2013**, *15*, 3490–3493. (f) Badetti, E.; Lloveras, V.; Muñoz-Gómez, J. L.; Sebastián, R. M.; Caminade, A. -M.; Majoral, J. P.; Veciana, J.; Vidal-Gancedo, J. *Macromolecules* **2014**, *47*, 7717–7724.
- (64) Hansda, S.; Pal, A. K.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 3754–3761.
- (65) Mañeru, D. R.; Moreira, I. P. R.; Illas, F. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 5271–5275.
- (66) Michinobu, T.; Inui, J.; Nishide, H. *Org. Lett.* **2003**, *5*, 2165–2168.
- (67) Kaneko, T.; Abe, H.; Teraguchi, M.; Aoki, T. *Macromolecules* **2013**, *46*, 2583–2589.
- (68) Lao, K. -U.; Tsou, P. -K.; Lankau, T.; Yu, C. -H.; *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 138–147.
- (69) (a) Allemand, P. -M.; Khemani, K. C.; Koch, A.; Wudl, F.; Holczer, K.; Donovan, S.; Gruner, G.; Thompson, J. D. *Science* **1991**, *253*, 301–302. (b) Mihailovic, D.; Arcon, D.; Venturini, P.; Blinc, R.; Omerzu, A.; Cevc, P. *Science* **1995**, *268*, 400–402. (c) Narymbetov, B.; Omerzu, A.; Kabanov, V. V.; Tokumoto, M.; Kobayashi, H.; Mihailovic, D. *Nature* **2000**, *407*, 883–885. (d) Mrzel, A.; Cevc, P.; Omerzu, A.; Mihailovic, D. *Phys. Rev. B* **1996**, *53*, R2922–R2925. (e) Omerzu, A.; Mihailovic, D.; Tokumoto, M. *Phys. Rev. B* **2000**, *61*, R11883–R11885. (f) Tanaka, K.; Asai, Y.; Sato, T.; Kuga, T.; Yamabe, T.; Tokumoto, M. *Chem. Phys. Lett.* **1996**, *259*, 574–578.
- (70) Rajca, A.; Utamapanya, S.; Thayumanavam, S. *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, *114*, 1884–1885.
- (71) (a) Rajca, A.; Wongsriratanakul, J.; Rajca, S. *Science* **2001**, *294*, 1503–1505. (b) Rajca, A.; Wongsriratanakul, J.; Rajca, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 6608–6626; (c) Rajca, A.; Lu, K.; Rajca, S. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 10335–10345; (d) Rajca, A. *Adv. Phys. Org. Chem.* **2005**, *40*, 153–199; (e) Rajca, A. *Chem. Rev.* **1994**, *94*, 871–893.
- (72) (a) Fang, S.; Lee, M.-S.; Hrovat, D. A.; Borden, W. T. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 6727–6731. (b) Wenthold, P. G.; Kim, J. B.; Lineberger, W. C. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 1354–1359. (c) Zhang, G.; Li, S.; Jiang, Y. *Tetrahedron* **2003**, *59*, 3499–3504. (d) Mañeru, D. R.; Pal, A. K.; Moreira, I.; de, P. R.; Datta, S. N.; Illas, F. *J. Chem. Theory Comput.* **2014**, *10*, 335–345. (e) Pal, A. K.; Mañeru, D. R.; Latif, I. A.; Moreira, I.; de, P. R.; Illas, F.; Datta, S. N. *Theor. Chem. Acc.* **2014**, *133*, 1472.
- (73) Song, M.; Song, X.; Bu, Y. *Organometallics* **2017**, *36*, 1505–1514.
- (74) Yang, Y.; Liu, C.; Xu, X.; Meng, Z.; Tong, W.; Ma, Z.; Zhou, C.; Sun, Y.; Sheng, Z. *Polym. Chem.* **2018**, *9*, 5499–5503.

- (75) Wernsdorfer, W. *Int. J. Nanotechnology* **2010**, *7*, 497-522.
- (76) (a) Moore, G. E. *Electronics* **1965**, *38*, 114–117. (b) Moore, G. E. *IEDM Tech. Digest* **1975**, 11–13.
- (77) Waldrop, M. M. *Nature* **2016**, *530*, 144-147.
- (78) Baibich, M. N.; Broto, J. M.; Fert, A.; Dau, F. N. V.; Petroff, F.; Etienne, P.; Creuzet, G.; Friederich, A.; Chazelas, J. *Phys. Rev. Lett.* **1988**, *61*, 2472–2475.
- (79) (a) Mosca, D.H.; Petroff, F.; Fert, A.; Schroeder, P. A.; Pratt, W.P.; Laloe, R. *J. Mag. Mag. Mat.* **1991**, *94*, L1-L5. (b) Schad, R.; Potter, C.D.; Belien, P.; Verbanck, G.; Moshchalkov, V.V.; Bruynseraede, Y. *Appl. Phys. Lett.* **1994**, *64*, 3500.
- (80) (a) Žutic, I.; Das Sarma, S. *Rev. Mod. Phys.* **2004**, *76*, 323–410. (b) Wolf, S. A.; Awschalom, D. D.; Buhrman, R. A.; Daughton, J. M.; von Molnár, S.; Roukes, M. L.; Chtchelkanova, A. Y.; Treger, D. M.; *Science* **2001**, *294*, 1488–1495.
- (81) Miyzaki, T.; Tezuka, N. *J. Mag. Mag. Mat.* **1995**, *139*, L231.
- (82) Moodera, J.S.; Kinder, L.R.; Wong, M.; Meservey, R. *Phys. Rev. Lett.* **1995**, *74*, 3273.
- (83) (a) Zhu, H. J.; Ramsteiner, M.; Kostial, H.; Wassermeier, M.; Schönherr, H.-P.; Ploog, K. H. *Phys. Rev. Lett.* **2001**, *87*, 016601. (b) Malajovich, I.; Kikkawa, J. M.; Awschalom, D. D.; Berry, J. J.; Samarth, N. *Phys. Rev. Lett.* **2000**, *84*, 1015. (c) Labella, V. P.; Bullock, D. W.; Z. Ding, Z.; Emery, C.; Venkatesan, A.; Oliver, W. F.; Salamo, G. J.; Thibado, P. M.; M. Mortazavi, M. *Science*, **2001**, *292*, 1518-1521.
- (84) (a) Schmidt, G. *J. Phys. D. Appl. Phys.* **2005**, *38*, R107-R122. (b) Dediu, V.; Murgia, M.; Maticotta, F. C.; Taliani, C.; Barbanera, S. *Solid State Commun.* **2002**, *122*, 181-184. (c) Xiong, Z.H.; Wu, D.; Vardeny, Z.V.; Shi, J. *Nature* **2004**, *427*, 821-824. (d) Lou, X.; Adelman, C.; Crooker, S. A.; Garlid, E. S.; Zhang, J.; Reddy, K.S.M.; Flexner, S. D.; Palmstrom, C. J.; Crowell, P. A. *Nat. Phys.* **2007**, *3*, 197-202.
- (85) (a) Datta, S.; Das, B. *Appl. Phys. Lett.* **1990**, *56*, 665-667. (b) Ohno, Y.; Young, D. K.; Beschoten, B.; Matsukura, F.; Ohno, H.; Awschalom, D.D. *Nature*. **1999**, *402*, 790-792. (c) Appelbaum, I.; Huang, B.; Monsma, D. J. *Nature* **2007**, *447*, 295-298.
- (86) (a) Chappert, C.; Fert, A.; Nguyen Van Dau, F. *Nat. Mater.* **2007**, *6*, 813–823. (b) Parkin, S. S. P., Hayashi, M., Thomas, L. *Science* **2008**, *320*, 190–194.
- (87) Tsukagoshi, K.; Alphenaar, B.; Ago, H. *Nature* **1999**, *401*, 572-574.
- (88) Camarero, J.; Coronado, E. *J. Mater. Chem.*, **2009**, *19*, 1678.
- (89) (a) Bogani, L.; Wernsdorfer, W. *Nat. Mater.* **2008**, *7*, 179-186. (b) Atodiresei, N.; Brede, J.; Lazic, P.; Caciuc, V.; Hoffmann, G.; Wiesendanger, R.; Blugel, S. *Phys. Rev. Lett.* **2010**, *105*, 066601. (c) Wan, H.; Zhou, B.; Chen, X.; Sun, C. Q.; Zhou, G. *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 2570-2574. (d) Thomas, L.; Lioni, F.; Ballou, R.; Gatteschi, D.; Sessoli, R.; Barbara, B. *Nature* **1996**, *383*, 145-147. (e) Cremades, E.; Pemmaraju, C. D.; Sanvito, S.; Ruiz, E. *Nanoscale* **2013**, *5*, 4751-4757.
- (90) (a) Wu, Q. H.; Zhao, P.; Chen, G. *Org. Electron.* **2015**, *25*, 308-316. (b) Li, X.B.; Gao, H.; Wan, H.Q.; Li, H.L.; Zhou, G.H. *Chem. Phys. Lett.* **2014**, *610*, 298-302.
- (91) (a) Chen, W.; Xu, N.; Wang, B. L.; Bian, B. A. *Phys. Lett. A.* **2014**, *378*, 2020-2023. (b) Zu, F.X.; Gao, G.Y.; Fu, H.H.; Xiong, L.; Zhu, S.C.; Li, P.; Yao, K.L. *Appl. Phys. Lett.* **2015**, *107*, 252403. (c) Zhu, L.; Yao, K. L.; Liu, Z. L. *Appl. Phys.*

- Lett.* **2010**, *96*, 082115. (d) Li, E. Y.; Marzari, N. *ACS Nano*. **2011**, *5*, 9726-9736. (e) Maslyuk, V. V.; Bagrets, A.; Meded, V.; Arnold, A.; Evers, F.; Brandbyge, M.; Bredow, T.; Mertig, I. *Phys. Rev. Lett.* **2006**, *97*, 097201. (f) Mannini, M.; Pineider, F.; Sainctavit, P.; Danieli, C.; Otero, E.; Sciancalepore, C.; Talarico, A. M.; Arrio, M.; Cornia, A.; Gatteschi, D.; Sessoli, R. *Nature Mater.* **2009**, *8*, 194-197. (g) Xiang, H.; Yang, J.; Hou, J. G.; Zhu, Q. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 2310-2314. (h) Shen, X.; Yi, Z.; Shen, Z.; Zhao, X.; Wu, J.; Hou, S.; Sanvito, S. *Nanotechnology*. **2009**, *20*, 385401. (i) Zhou, L.; Yang, S.W.; Ng, M. F.; Sullivan, M. B.; Tan, V. B. C.; Shen, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 4023-4027. (j) Pemmaraju, C. D.; Rungger, I.; Sanvito, S. *Phys. Rev. B*. **2009**, *80*, 104422. (k) Shukla, S. K.; Sanvito, S. *Phys. Rev. B*. **2009**, *80*, 184429.
- (92) Huang, J.; Wang, W. Y.; Yang, S. F.; Su, H. B.; Li, Q. X.; Yang, J. L. *Chem. Phys. Lett.* **2012**, *539-540*, 102-106.
- (93) Deng, X. Q.; Zhang, Z. H.; Tang, G. P.; Fan, Z. Q.; Sun, L.; Li, C. X. *Org. Electron.* **2016**, *35*, 1-5.
- (94) Shen, X.; Sun, L. L.; Yi, Z. L.; Benassi, E.; Zhang, R. X.; Shen, Z. Y.; Sanvito, S.; Hou, S. M. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2010**, *12*, 10805-10811.
- (95) Zhao, P.; Chen, G. *J. Chem. Phys.* **2018**, *149*, 134305.
- (96) (a) Shojaei, F.; Hahn, J. R. *Chem. Mater.* **2014**, *26*, 2967-2974. (b) Huang, X.; Sheng, P.; Tu, Z.; Zhang, F.; Wang, J.; Geng, H.; Zou, Y.; Di, C.; Yi, Y.; Sun, Y.; Xu, W.; Zhu, D. *Nature. Commun.* **2015**, *6*, 7408. (c) Sarkar, S.; Pramanik, A.; Sarkar, P. *Chem. Phys.* **2016**, *478*, 173-177. (d) Chakravarty, C.; Mandal, B.; Sarka, P. *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 28307-28319. (e) Clough, C. A. J.; Skelton, J. M.; Dowbes, C. A.; Rosa, A. A.; Yoo, J. W.; Walsh, A.; Melot, B. C.; Marinescu, S. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 10863-10867.
- (97) Pearson, C.; Moore, A. J.; Gibson, J. E.; Bryce, M. R.; Petty, M. C. *Thin Solid Films.* **1994**, *244*, 932-935.
- (98) Huong, V. T. T.; Tai, T. B.; Jiang, J. -C.; Nguyen, M. T.; *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 32536-32543.
- (99) Peng, J.; Zhou, W. -X.; Chen, K. -Q. *Phys. Lett. A*. **2014**, *378*, 3126-3130.
- (100) Wu, Q. H.; Zhao, P.; Su, Y.; Li S. J.; Gou, J. H. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 52938-52944.
- (101) Wu, Q. H.; Zhao, P.; Chen, G. *Org. Electron.* **2015**, *25*, 308-316.
- (102) (a) Heersche, H. B.; Groot, Z. D.; Folk, J. A.; van der Zant, H. S. J.; Romeike, C.; Wegewijs, M. R.; Zobbi, L.; Barreca, D.; Tondello, E.; Cornia, A. *Phys. Rev. Lett.* **2006**, *96*, 206801. (b) Voss, S.; Zander, O.; Fonin, M.; Rüdiger, U.; Burgert, M.; Groth, U. *Phys. Rev. B* **2008**, *78*, 155403. (c) Ni, C.; Shah, S.; Hendrickson, D.; Bandaru, P. R. *Appl. Phys. Lett.* **2006**, *89*, 212104. (d) Jo, M.-H.; Grose, J. E.; Baheti, K.; Deshmukh, M. M.; Sokol, J. J.; Rumberger, E. M.; Hendrickson, D. N.; Long, J. R.; Park, H.; Ralph, D. C. *Nano Lett.* **2006**, *6*, 2014-2020. (e) Kim, G.-H.; Kim, T.-S. *Phys. Rev. Lett.* **2004**, *92*, 137203. (f) Henderson, J. J.; Ramsey, C. M.; del Barco, E.; Mishra, A.; Christou, G. *J. Appl. Phys.* **2007**, *101*, 09E102. (g) Romeike, C.; Wegewijs, M. R.; Hofstetter, W.; Schoeller, H. *Phys. Rev. Lett.* **2006**, *96*, 196601. (h) Romeike, C.; Wegewijs, M. R.; Schoeller, H. *Phys. Rev. Lett.* **2006**, *96*, 196805. (i) Misiorny, M.; Barnaś, J. *Europhys. Lett.* **2007**, *78*, 27003.

- (103) (a) Christou, G.; Gatteschi, D.; Hendrickson, D. N.; Sessoli, R. *Mater. Res. Soc. Bull.* **2000**, *25*, 66–71. (b) Gatteschi, D.; Sessoli, R.; Villain, J. *Molecular Nanomagnets* (Oxford Univ. Press, New York, **2007**). (c) Naitabdi, A.; Bucher, J.-P.; Gerbier, P.; Rabu, P.; Drillon, M. *Adv. Mater.* **2005**, *17*, 1612–1616. (d) Fleury, B.; Catala, L.; Huc, V.; David, C.; Zhong, W. Z.; Jegou, P.; Baraton, L.; Palacin, S.; Albouy, P. –A.; Mallah, T. *Chem. Comm.* **2005**, 2020–2022. (e) Coronado, E.; Forment-Aliaga, A.; Gaita-Ariño, A.; Giménez-Saiz, C.; Romero, F. M.; Wernsdorfer, W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 6152–6156.
- (104) (a) Misiorny, M.; Barnaś, J. *Phys. Rev. B* **2007**, *75*, 134425. (b) Misiorny, M.; Barnaś, J. *Phys. Status Solidi B* **2009**, *246*, 695.
- (105) (a) Timm, C.; Elste, F. *Phys. Rev. B* **2006**, *73*, 235304. (b) Misiorny, M.; Barnaś, J. *Phys. Rev. B* **2008**, *77*, 172414.
- (106) (a) Urdampilleta, M.; Klyatskaya, S.; Cleuziou, J.P.; Ruben, M.; Wernsdorfer, W. *Nat. Mater.* **2011**, *10*, 502–506. (b) Urdampilleta, M.; Nguyen, N.V.; Cleuziou, J.P.; Klyatskaya, S.; Ruben, M.; Wernsdorfer, W. *Int. J. Mol. Sci.* **2011**, *12*, 6656–6667.
- (107) Vincent, R.; Klyatskaya, S.; Ruben, M.; Wernsdorfer, W.; Balestro, F. *Nature* **2012**, *488*, 357–360.
- (108) Thiele, S.; Balestro, F.; Ballou, R.; Klyatskaya, S.; Ruben, M.; Wernsdorfer, W. *Science* **2014**, *344*, 1135–1138.
- (109) (a) Misiorny, M.; Barnaś, J. *Phys. Rev. B* **2007**, *76*, 054448. (b) Misiorny, M.; Weymann, I.; Barnaś, J. *Phys. Rev. B* **2011**, *84*, 035445. (c) Misiorny, M.; Barnaś, J. *Phys. Rev. B* **2009**, *79*, 224420. (d) Misiorny, M.; Weymann, I.; Barnaś, J. *Phys. Rev. Lett.* **2011**, *106*, 126602.
- (110) Misiorny, M.; Barnaś, J. *Europhys. Lett.* **2010**, *89*, 18003.
- (111) (a) Larade, B.; Taylor, J.; Mehrez, H.; Guo, H. *Phys. Rev. B* **2001**, *64*, 075420. (b) Sotthewes, K.; Geskin, V.; Heimbuch, R.; Kumar, A.; Zandvliet, H. J. W. *APL Mat.* **2014**, *2*, 010701. (c) Tsukagoshi, K.; Alphenaar, B. W.; Ago, H. *Nature* **1999**, *401*, 572–574. (d) Ouyang, M.; Awschalom, D. D. *Science* **2003**, *301*, 1074–1078. (e) Pati, R.; Senapati, L.; Ajayan, P. M.; Nayak, S. K. *Phys. Rev. B* **2003**, *68*, 100407.
- (112) (a) Datta, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, New York, 1997). (b) Chun, D.; Cheng, Y.; Wudl, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 8380–8385. (c) Mondal, R.; Shah, B. K.; Neckers, D. C. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 9612–9613. (d) Tonshoff, C.; Bettinger, H. F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 4125–4128. (e) Anthony, J. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 452–483.
- (113) (a) Meng, H.; Bendikov, M.; Mitchell, G.; Helgeson, R.; Wudl, F.; Bao, Z.; Siegrist, T.; Kloc, C.; Chen, C. –H. *Adv. Mater.* **2003**, *15*, 1090–1093. (b) Katz, H. E. *Chem. Mat.* **2004**, *16*, 4748–4756.
- (114) (a) Bendikov, M.; Duong, H. M.; Starkey, K.; Houk, K. N.; Carter, E. A. Wudl, F. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 7416–7417. (b) Hachmann, J.; Dorando, J. J.; Aviles, M.; Chan, G. K. *J. Chem. Phys.* **2007**, *127*, 134309. (c) Hajgato, B.; Szieberth, D.; Geerlings, P.; Proft, F. D.; Deleuze, M.S. *J. Chem. Phys.* **2009**, *131*, 224321. (d) Qu,

- Z.; Zhang, D.; Liu, C.; Jiang, Y. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 7909-7914. (e) Szulczewski, G.; Sanvito, S.; Coey, J. M. D. *Nat. Mater* **2009**, *8*, 693-695.
- (115) (a) Sanvito, S. *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 3336-3355. (b) Mas-Torrent, M.; Crivillers, N.; Mugnaini, V.; Ratera, I.; Rovira, C.; Veciana, J. *J. Mater. Chem.* **2009**, *19*, 1691-1695. (c) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Ratner, M. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 3682-3684. (d) Lee, J.; Lee, E.; Kim, S.; Bang, G. S.; Shultz, D. A.; Schmidt, R. D.; Forbes, M. D. E.; Lee, H. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, *50*, 4414-4418. (e) Yonekuta, Y.; Susuki, K.; Oyaizu, K.; Honda, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 14128-14129. (f) McGuire, J.; Miras, Haralampos N.; Richards, E.; Sproules, S. *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 1483-1491.
- (116) (a) Zhao, X. L.; Ando, Y.; Liu, Y.; Jinno, M.; Suzuki, T. *Phys. Rev. Lett.*, **2003**, *90*, 187401. (b) Muramatsu, H.; Hayashi, T.; Kim, Y. A.; Shimamoto, D.; Endo, M.; Terrones, M.; Dresselhaus, M. S. *Nano Lett.*, **2008**, *8*, 237. (c) Kitaura, R.; Nakanishi, R.; Saito, T.; Yoshikawa, H.; Awaga, K.; Shinohara, H. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2009**, *48*, 8298.
- (117) Prasongkit, J.; Grigoriev, A.; Wendin, G.; Ahuja, R. *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, **2010**, *81*, 115404.
- (118) Kim, W.Y.; Kim, K.S. *Nature Nanotech.* **2008**, *3*, 408-412.
- (119) (a) Zhang, D.; Long, M.Q.; Zhang, X.J.; Xu, H. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 96455-96463. (b) Deng, X.Q.; Zhang, Z.H.; Fang, Z.Q.; Tang, G.P.; Sun, L.; Li, C.X. *Org. Electron.* **2016**, *32*, 41-46. (c) Zhao, P.; Wu, Q.H.; Liu, H.Y.; Liu, D.S.; Chen, G. *J. Mater. Chem. C.* **2014**, *2*, 6648-6654.
- (120) (a) Zeng, M.G.; Shen, L.; Zhang, C.; Feng, Y.P. *Appl. Phys. Lett.* **2011**, *98*, 053101. (b) Deng, X.Q.; Zhang, Z.H.; Tang, G.P.; Fang, Z.Q.; Yang, C.H. *Carbon.* **2014**, *66*, 646-653.
- (121) Lee, M.; Williams, J. R.; Zhang, S.; Frisbie, D.; Goldhaber-Gordon, D. *Phys. Rev. Lett.* **2011**, *107*, 256601.
- (122) (a) Ratera, I.; Veciana, J. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 303-349. (b) Lee, E.C.; Choi, Y.C.; Kim, W.Y.; Singh, N.J.; Lee, S.; Shim, J.H.; Kim, K.S. *Chem. Eur. J.* **2010**, *16*, 12141-12146. (c) Peng, Q.; Obolda, A.; Zhang, M.; Li, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 7091-7095. (d) Sugawara, T.; Komatsu, H.; Suzuki, K. *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 3105-3118. (e) Nakahara, K.; Iwasa, S.; Satoh, M.; Morioka, Y.; Iriyama, J.; Suguro, M.; Hasegawa, E. *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *359*, 351-354. (f) Xu, L.; Yang, F.; Su, C.; Ji, L.; Zhang, C. *Electrochim. Acta* **2014**, *130*, 148-155. (g) Dardenne, N.; Blase, X.; Hautier, G.; Charlier, J. -C.; Rignanes, G. M. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 23373-23378.
- (123) Sen, S.; Chakrabarti, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 15334-15339.
- (124) Chen, W.; Mao, W.; Bian, B.; Xu, N.; Chen, R.; Li, X-a.; Wang, L. *Comput. Theor. Chem.* **2016**, *1091*, 85-91.
- (125) (a) Tour, J. M.; Kozaki, M.; Seminario, J. M. *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, *120*, 8486. (b) Modelli, A.; Venuti, M.; Scagnolari, F.; Contento, M.; Jones, D. *J. Phys. Chem. A*, **2001**, *105*, 219. (c) Distefano, G.; Jones, D.; Guerra, M.; Favaretto, L.; Modelli, L.; Mengoli, G. *J. Phys. Chem.*, **1991**, *95*, 9746. (d) Colle, M. D.; Cova, C.; Distefano, G.; Jones, D.; Modelli, A.; Comisso, N. *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 2828.

- (e) Bredas, J. L.; The´mans, B.; Fripiat, J. G.; Andre´, J. M.; Chance, R. R. *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **1984**, *29*, 6761.
- (126) Deng, Y.-X.; Chen, S.-Z.; Zeng, Y.; Zhou, W.-X.; Chen, K.-Q. *Org. Electron.* **2017**, *50*, 184-190.
- (127) Tagami, K.; Tsukada, M. *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 6441–6444.
- (128) Zhang, J.; Xu, B.; Qin. *Z. Phys. Lett. A* **2018**, *382*, 1226-1230.
- (129) Prins, F.; Barreiro, A.; Ruitenberg, J. W.; Seldenthuis, J. S.; Aliaga-Alcalde, N.; Vandersypen, L.M.K.; van der Zant, H. S. J. *Nano Lett.* **2011**, *11*, 4607–4611.
- (130) Caliskan, S.; Laref, A. *Sci. Rep.* **2015**, *4*, 7363.
- (131) Caliskan, S. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* **2018**, *99*, 43–50.
- (132) Sevov, C.S.; Hickey, D.P.; Cook, M.E.; Robinson, S.G.; Barnett, S.; Minter, S.D.; Sigman, M.S.; Sanford, M.S. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 2924-2927.

CHAPTER 2

- (1) Orio, M.; Pantazis, D. A.; Neese, F. *Photosynth. Res.* **2009**, *102*, 443-453.
- (2) Fermi, E. *Rend. Accad. Naz. Lincei.* **1927**, *6*, 602-607. (b) Thomas, L. H. *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **1927**, *23*, 542-548.
- (3) (a) Noodleman, L. *J. Chem. Phys.* **1981**, *74*, 5737-5743. (b) Noodleman, L.; Baerends, E. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, *106*, 2316-2327. (c) Noodleman, L.; Davidson, E. R. *Chem. Phys.* **1986**, *109*, 131-143. (d) Noodleman, L.; Peng, C. Y.; Case, D. A.; Mouesca, J.-M. *Coord. Chem. Rev.* **1995**, *144*, 199-244.
- (4) Ginsberg, A. P. *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 111-117.
- (5) (a) Bencini, A.; Totti, F.; Daul, C. A.; Doclo, K.; Fantucci, P.; Barone, V. *Inorg. Chem.* **1997**, *36*, 5022-5030. (b) Bencini, A.; Gatteschi, D.; Totti, F.; Sanz, D. N.; McCleverty, J. A.; Ward, M. D. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 10545.
- (6) Ruiz, E.; Cano, J.; Alvarez, S.; Alemany, P. *J. Comput. Chem.* **1999**, *20*, 1391-1400.
- (7) (a) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Nasu, K. *Jpn. J. Appl. Phys.* **1987**, *26*, L1362. (b) Yamaguchi, K.; Jensen, F.; Dorigo, A.; Houk, K. N. *Chem. Phys. Lett.* **1988**, *149*, 537-542. (c) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Houk, K. N. *Theo. Chim. Acta* **1988**, *73*, 337.
- (8) Mahan, G. D. *Many-particle Physics*; Plenum Press: New York, 1990.
- (9) Soler, J. M.; Artacho, E.; Gale, J. D.; Garc´ıa, A.; Junquera, J.; Ordej´on, P.; S´anchez-Portal, D. *J. Phys.: Condens. Matter.* **2002**, *14*, 2745-2779.
- (10) (a) Landauer, R. *IBM J. Res. DeV.* **1957**, *1*, 223–231. (b) M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer and S. Pinhas, *Phys. Rev. B.* **1985**, *31*, 6207-6215.
- (11) (a) Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev.* **1965**, *140*, 1133–1138. (b) Hohenberg, P.; Kohn, W. *Phys. Rev.* **1964**, *136*, 864–871.
- (12) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Ratner, M. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 3682-3684.

- (13) (a) Caroli, C.; Combescot, R.; Nozieres, P.; Saint-James, D. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **1971**, *4*, 916–929. (b) Meir, Y.; Wingreen, N. S. *Phys. Rev. Lett.* **1992**, *68*, 2512–2516.
- (14) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Subotnik, J. E.; Mujica, V.; Ratner, M. A. *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 024103(1–17).
- (15) Herrmann, C.; Groß, L.; Steenbock, T.; Solomon, G. C. Artaios — a transport code for postprocessing quantum chemical electronic structure calculations, **2008-2014**.

CHAPTER 3

- (1) Tian, W.; Datta, S.; Hong, S.; Reifenberger, R.; Henderson, J. I.; Kubiak, C. P. *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 2874–2882.
- (2) Kober, S.; Gotesman, G.; Naaman, R. *J. Phys. Chem. Lett.* **2013**, *4*, 2041–2045.
- (3) Jalili, S.; Rafi-Tabar, H. *Phys. Rev. B* **2005**, *71*, 165410(1–9).
- (4) Magoga, M.; Joachim, C. *Phys. Rev. B* **1997**, *56*, 4722–4729.
- (5) Durig, U.; Zuger, O.; Michel, B.; Haussling, L.; Ringsdorf, H. *Phys. Rev. B* **1993**, *48*, 1711–1717.
- (6) Boulas, C.; Davidovits, J. V.; Rondelez, F.; Vuillaume, D. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *76*, 4797–4800.
- (7) Bumm, L. A.; Arnold, J. J.; Cygan, M. T.; Dunbar, T. D.; Burgin, T. P.; Jones, L.; II, Allara, D. L.; Tour, J. M.; Weiss, P. S. *Science* **1996**, *271*, 1705–1707.
- (8) Andres, R.P.; Bein, T.; Dorogi, M.; Feng, S.; Henderson, J. I.; Kubiak, C. P.; Mahoney, W.; Osifchin, R.G.; Reifenberger, R.G. *Science* **1996**, *272*, 1323–1325.
- (9) Reed, M. A.; Zhou, C.; Muller, C. J.; Burgin, T. P.; Tour, J. M. *Science* **1997**, *278*, 252–254.
- (10) Kushmerick, J. G.; Holt, D. B.; Pollack, S. K.; Ratner, M. A.; Yang, J. C.; Schull, T. L.; Naciri, J.; Moore, M. H.; Shashidhar, R. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 10654–10655.
- (11) Weiss, E. A.; Ahrens, M. J.; Sinks, L. E.; Gusev, A. V.; Ratner, M. A.; Wasielewski, M. R. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 5577–5584.
- (12) Nishizawa, S.; Hasegawa, J.-y.; Matsuda, K. *J. Phys. Chem. C* **2013**, *117*, 26280–26286.
- (13) I. D. W. Samuel, *Philos. Trans. R. Soc., A*, **2000**, 358, 193–210.
- (14) H. Lu, J. Leng and S. Du, *Soft Matter*, **2013**, *9*, 3851–3858.
- (15) H. Lu and S. Du, *Polym. Chem.*, **2014**, *5*, 1155–1162.
- (16) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Ratner, M. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 3682–3684.
- (17) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Subotnik, J. E.; Mujica, V.; Ratner, M. A. *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 024103 (1–17).

- (18) 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.; et.al. Gaussian09; Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2009.
- (19) Yoshizawa, K. *Acc. Chem. Res.* **2012**, *45*, 1612-1621;
- (20) Yoshizawa, K.; Tada, T.; Staykov, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 9406-9413.
- (21) Noodleman, L. *J. Chem. Phys.* **1981**, *74*, 5737.
- (22) Noodleman, L.; Baerends, E. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, *106*, 2316-2327.
- (23) Ginsberg, A. P. *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 111-117.
- (24) Noodleman, L.; Peng, C. Y.; Case, D. A.; Mouesca, J. M. *Coord. Chem. Rev.* **1995**, *144*, 199-244.
- (25) Noodleman, L.; Davidson, E. R. *Chem. Phys.* **1986**, *109*, 131-143.
- (26) Bencini, A.; Totti, F.; Daul, C. A.; Doclo, K.; Fantucci, P.; Barone, V. *Inorg. Chem.* **1997**, *36*, 5022-5030.
- (27) Bencini, A.; Gatteschi, D.; Totti, F.; Sanz, D. N.; McCleverty, J. A.; Ward, M. D. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 10545.
- (28) Ruiz, E.; Cano, J.; Alvarez, S.; Alemany, P. *J. Comput. Chem.* **1999**, *20*, 1391-1400.
- (29) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Nasu, K. *Jpn. J. Appl. Phys.* **1987**, *26*, L1362.
- (30) Ali, Md. E.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 2776-2784.
- (31) Ali, Md. E.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 13232-13237.
- (32) Polo, V.; Alberola, A.; Andres, J.; Anthony, J.; Pilkington, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 857-864.
- (33) Bhattacharya, D.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 5470-5475.
- (34) Paul, S.; Misra, A. *THEOCHEM* **2009**, *907*, 35-40.
- (35) Paul, S.; Misra, A. *THEOCHEM* **2009**, *895*, 156-160,
- (36) Ashcroft, N.W.; Mermin, N.D, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976.
- (37) F. Pauly, J. K. Viljas, J. C. Cuevas, G. Schön, *Phys. Rev. B*, 2008, *77*, 155312.
- (38) Stuyver, T.; Fias, S.; Proft, De F.; Geerlings, P, *Chem. Phys. Lett.* **2015**, *630*, 51-56.
- (39) Kim, W. Y.; Kim, K. S. *Acc. Chem. Res.* **2010**, *43*, 111-120.
- (40) Choi, Y. C.; Kim, W. Y.; Park, K. -S.; Tarakeshwar, P.; Kim, K. S.; Kim, T. -S.; Lee, J. Y. *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*, 094706 (1-6).
- (41) Shil, S.; Misra, A. *RSC Adv.* **2013**, *3*, 14352-14362.
- (42) Trindle, C.; Datta, S. N. *Int. J. Quantum Chem.* **1996**, *57*, 781-799.
- (43) Stasiw, D. E.; Zhang, J.; Wang, G.; Dangi, R.; Stein, B. W.; Shultz, D.A.; Kirk, M.L.; Wojtas, L.; Sommer, R. D. *J. Am. Chem.Soc.* **2015**, *137*, 9222-9225.

CHAPTER 4

- (1) Nguyen, L. A.; He, H.; Pham-Huy, C. *Int. J. Biomed. Sci.* **2006**, *2*, 85–100.
- (2) Stephens, P. J.; Devlin, F. J.; Pan, J.-J. *Chirality*. **2008**, *20*, 643–663.
- (3) Galán-Mascarós, J. R.; Coronado, E.; Goddard, P. A.; Singleton, J.; Coldea, A. I.; Wallis, J. D.; Coles, S. J.; Alberola, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 9271.
- (4) Pappas, C. *Physics* **2012**, *5*, 28.
- (5) Train, C.; Gheorghe, R.; Krstic, V.; Chamoreau, L.-M.; Ovanesyan, N.S.; Rikken, G.L.J.A.; Gruselle, M.; Verdaguer, M. *nat. mater.* **2008**, *7*, 729-734.
- (6) Togawa, Y.; Koyama, T.; Takayanagi, K.; Mori, S.; Kousaka, Y.; Akimitsu, J.; Nishihara, S.; Inoue, K.; Ovchinnikov, A. S.; Kishine, J. *Phys. Rev. Lett.* **2012**, *108*, 107202.
- (7) Wagnière, G. H. *Chem Phys.* **1999**, *245*, 165–173.
- (8) Bordács, S.; Kézsmárki, I.; Szaller, D.; Demko, L.; Kida, N.; Murakawa, H.; Onose, Y.; Shimano, R.; Rößm, T.; Nagel, U.; Miyahara, S.; Furukawa, N.; Tokura, Y. *Nat. Phys.* **2012**, *8*, 734.
- (9) Minguet, M.; Luneau, D.; Paulsen, C.; Lhotel, E.; Gorski, A.; Waluk, J.; Amabilino, D.B.; Veciana, J.; *Polyhedron* **2003**, *22*, 2349-2354.
- (10) (a) Ishikawa, I.; Tajima, K. *Solid State Commun.* **1976**, *19*, 525-528.
(b) Yu, X. Z.; Onose, Y.; Kanazawa, N.; Park, J.H.; Han, J.H.; Matsui, Y.; Nagaosa, N.; Tokura, Y. *Nature* **2010**, *465*, 901-904.
- (11) Kahn, O. *Molecular Magnetism*, VCH, New York, 1993.
- (12) Coronado E, Delhae` P, Gatteschi D, *Molecular magnetism: from molecular assemblies to devices*; Miller J. S. (Eds); NATO ASI Series E321, vol 321, Kluwer, Dordrecht, 1996.
- (13) Benelli, C.; Gatteschi, D. *Chem. Rev.* **2002**, *102*, 2369-2387.
- (14) Lahti, P. M. *Magnetic Properties of Organic Materials*, Marcel Dekker, New York, 1999.
- (15) (a) Kobayashi, H.; Kobayashi, A.; Cassoux, P.; *Chem. Soc. Rev.* **2000**, *29*, 325–333. (b) Uji, S.; Shinagawa, H.; Terashima, T.; Yakabe, T.; Terai, Y.; Tokumoto, M.; Kobayashi, A.; Tanaka, H.; Kobayashi, H. *Nature*. **2001**, *410*, 908–910.
- (16) (a) Prinz, G. A. *Science*, **1998**, *282*, 1660–1663. (b) Emberly, E. G.; Kirczenow, G. *Chem. Phys.* **2002**, *281*, 311–324.
- (17) (a) Matsuda, K.; Matsuo, M.; Irie, M. *J. Org. Chem.* **2001**, *66*, 8799–8803. (b) Tanifuji, N.; Irie, M.; Matsuda, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 13344–13353.
- (18) (a) Bhattacharya, D.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A*, **2009**, *113*, 5470–5475. (b) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Misra, A.; Klein, D. J. *Theor. Chem. Acc.*, **2010**, *127*, 57–67. (c) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Panda, A.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A*, **2010**, *114*, 11833–11841.
- (19) Ali, Md. E.; Dutta, S.N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 2776-2784.
- (20) (a) Tobe, Y.; Wakabayashi, T.; in *Acetylene Chemistry: Chemistry, Biology, and Material Science* (Eds.: F. Diederich, P. J. Stang, R. R. Tykwinski), Wiley-VCH, Weinheim, **2005**, pp. 387 – 426. (b) Chalifoux, W. A.; Tykwinski, R. R. *Chem. Rec.* **2006**, *6*, 169 –182. (c) Shi Shun, A. L. K.; Tykwinski, R. R. *Angew. Chem. Int.*

- Ed.* **2006**, 45, 1034 – 1057. (d) Raton, B. Polyynes: Synthesis, Properties, and Applications; Cataldo, F. (Eds); Taylor & Francis, **2005**.
- (21) Taylor, D. R. *Chem. Rev.* **1967**, 67, 317.
- (22) Hendon, C.H.; Tiana, D.; Murray, A.T.; Carbery, D.R.; Walsh, A. *Chem. Sci.*, **2013**, 4, 4278–4284.
- (23) Skibar, W.; Kopacka, H.; Wurst, K.; Salzmann, C.; Ongania, K.H.; Biani, F.F.D.; Zanello, P.; Bildstein, B. *Organometallics* **2004**, 23, 1024–1041.
- (24) (a) Januszewski, J.A.; Tykwinski, R.R.; *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 3184–3203.
(b) Januszewski, J.A.; Wendinger, D.; Methfessel, C.D.; Hampel, F.; Tykwinski, R.R.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 1817–1821.
- (25) Gu, X.; Kaiser, R.I.; Mebel, A.M. *Chem. Phys. Chem.* **2008**, 9, 350–369.
- (26) Prasongkit, J.; Grigoriev, A.; Wendin, G.; Ahuja, R. *Phys. Rev. B* **2010**, 81, 115404.
- (27) Noodleman, L. *J. Chem. Phys.* **1981**, 74, 5737–5743.
- (28) Noodleman, L.; Baerends, E. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, 106, 2316–2327.
- (29) Noodleman, L.; Davidson, E. R. *Chem. Phys.* **1986**, 109, 131–143.
- (30) Noodleman, L.; Peng, C. Y.; Case, D. A.; Mouesca, J. -M. *Coord. Chem. Rev.* **1995**, 144, 199–244.
- (31) Yamaguchi, K.; Fukui, H.; Fueno, T. *Chem. Lett.* **1986**, 15, 625–628.
- (32) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Nasu, K. *Jpn. J. Appl. Phys.* **1987**, 26, L1362–L1364.
- (33) Yamaguchi, K.; Jensen, F.; Dorigo, A.; Houk, K. N. *Chem. Phys. Lett.* **1988**, 149, 537–542.
- (34) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Houk, K. N. *Theor. Chim. Acta* **1988**, 73, 337–364.
- (35) 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, M. J.; 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**.
- (36) Trindle, C.; Datta, S. N. *Int. J. Quantum Chem.* **1996**, 57, 781–799.
- (37) Trindle, C.; Datta, S. N.; Mallik, B. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, 119, 12947–12951.
- (38) Hermann, C.; Neugebauer, J.; Gladysz, J. A.; Reiher, M. *Inorg. Chem.* **2005**, 44, 6174–6182.
- (39) Shil, S.; Herrmann, C. *Inorg. Chem.* **2015**, 54, 11733–11740.
- (40) Browne, W. R.; Hage, R.; Vos, J. G. *Coord. Chem. Rev.* **2006**, 250, 1653–1668.

- (41) Borden, W.T.; Davidson, E.R. *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, *99*, 4587–4594.
- (42) Borden, W.T.; Davidson, E.R. *Acc. Chem. Res.* **1981**, *14*, 69–76.
- (43) Constantinides, C. P.; Koutentis, P. A.; Schatz, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 16232–16241.
- (44) Zhang, G.; Li, S.; Jiang, Y. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 5573–5582.
- (45) Shil, S.; Roy, M.; Misra, A. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 105574–105582.
- (46) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Misra, A.; Bytautas, L.; Klein, D. *J. Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 14223–14237.
- (47) Aoki, Y.; Imamura, A. *J. Chem. Phys.* **1995**, *103*, 9726.
- (48) Imamura, A.; Aoki, Y. *Int. J. of Quantum Chem.* **2006**, *106*, 1924–1933.
- (49) Imamura, A.; Aoki, Y. *Int. J. of Quantum Chem.* **2013**, *113*, 423–427.

CHAPTER 5

- (1) Kahn, O. *Molecular Magnetism*. VCH, New York, **1993**.
- (2) Lahti, P. M. *Magnetic Properties of Organic Materials*, Marcel Dekker, New York, **1999**.
- (3) Kobayashi, H.; Kobayashi, A.; Cassoux, P. *Chem. Soc. Rev.* **2000**, *29*, 325.
- (4) Uji, S.; Shinagawa, H.; Terashima, T.; Yakabe, T.; Terai, Y.; Tokumoto, M.; Kobayashi, A.; Tanaka, H.; Kobayashi, H. *Nature*, **2001**, *410*, 908.
- (5) Matsuda, K.; Matsuo, M.; Irie, M. *J. Org. Chem.*, **2001**, *66*, 8799.
- (6) Tanifuji, N.; Irie, M.; Matsuda, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 13344.
- (7) Prinz, G. A. *Science*, **1998**, *282*, 1660.
- (8) Emberly, E. G.; Kirczenow, G. *Chem. Phys.* **2002**, *281*, 311.
- (9) Wang, F.; Vardeny, Z. V. *J. Mater. Chem.* **2009**, *19*, 1685.
- (10) Michelfeit, M.; Schmidt, G.; Geurts, J.; Molenkamp, L. W. *Phys. Status Solidi*, **2008**, *205*, 656.
- (11) Nguyen, T. D.; Ehrenfreund, E.; Vardeny, Z. V. *Science*, **2012**, *337*, 204.
- (12) Yoo, J. W.; Chen, C. Y.; Jang, H. W.; Bark, C. W.; Prigodin, V. N.; Eom, C. B.; Epstein, A. J. *Nat. Mater.* **2010**, *9*, 638.
- (13) Herrmann, C.; Elmisz, J. *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 10456.
- (14) Eng, M. P.; Albinsson, B. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2006**, *45*, 5626.
- (15) Wenger, O. S. *Acc. Chem. Res.*, **2011**, *44*, 25.
- (16) Nitzan, A.; Ratner, M. A. *Science*, **2003**, *300*, 1384.
- (17) Tao, N. J. *Nat. Nanotechnol.*, **2006**, *1*, 173.
- (18) Park, B. G.; Wunderlich, J.; Martí, X.; Holý, V.; Kurosaki, Y.; Yamada, M.; Yamamoto, H.; Nishide, A.; Hayakawa, J.; Takahashi, H.; Shick, A. B.; Jungwirth, T. *A. Nat. Mater.*, **2011**, *10*, 347.
- (19) Tour, J. M. *Acc. Chem. Res.*, **2000**, *33*, 791.
- (20) Winkler, J. R.; Gray, H. B. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 2930.
- (21) Liu, H.; Wang, N.; Zhao, J.; Guo, Y.; Yin, X.; Boey, F. Y.C.; Zhang, H. *Chem. Phys. Chem.*, **2008**, *9*, 1416.

- (22) Khoo, K. H.; Chen, Y.; Li, S.; Quek, S. Y. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, *17*, 77.
- (23) Zhao, X. L.; Ando, Y.; Liu, Y.; Jinno, M.; Suzuki, T. *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *90*, 187401.
- (24) Muramatsu, H.; Hayashi, T.; Kim, Y. A.; Shimamoto, D.; Endo, M.; Terrones, M.; Dresselhaus, M.S. *Nano. Lett.* **2008**, *8*, 237.
- (25) Kitaura, R.; Nakanishi, R.; Saito, T.; Yoshikawa, H.; Awaga, K.; Shinohara, H. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2009**, *48*, 8298.
- (26) Tobe, Y.; Wakabayashi, T. in *Acetylene Chemistry: Chemistry, Biology, and Material Science* (Eds.: F. Diederich, P. J. Stang, R. R. Tykwinski), Wiley-VCH, Weinheim, **2005**, pp. 387.
- (27) Chalifoux, W. A.; Tykwinski, R. R. *Chem. Rec.*, **2006**, *6*, 169.
- (28) Shi Shun, A. L. K.; Tykwinski, R. R. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 1034.
- (29) Raton, B. *Polyynes: Synthesis, Properties, and Applications*; Cataldo, F. (Eds); Taylor & Francis, **2005**.
- (30) Ma, S. *Acc. Chem. Res.* **2009**, *42*, 1679.
- (31) Smadja, W. *Chem. Rev.* **1983**, *83*, 263.
- (32) Zhang, Y.; Su, Y.; Wang, L.; Kong, E. S.-W.; Chen, X.; Zhang, Y. A. *Nanoscale Research Letters*, **2011**, *6*, 577.
- (33) Gu, X.; Kaiser, R. I.; Mebel, A. M. *Chem. Phys. Chem.*, **2008**, *9*, 350.
- (34) Weimer, M.; Hieringer, W.; Sala, F. D.; Gçrling, A. *Phys.*, **2005**, *309*, 77.
- (35) Skibar, W.; Kopacka, H.; Wurst, K.; Salzmann, C.; Ongania, K. H.; Biani, F. F. D.; Zanello, P.; Bildstein, B. *Organometallics*, **2004**, *23*, 1024.
- (36) Januszewski, J. A.; Tykwinski, R.R. *Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 3184.
- (37) Januszewski, J. A.; Wendinger, D.; Methfessel, C. D.; Hampel, F.; Tykwinski, R. R. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2013**, *52*, 1817.
- (38) Bhattacharya, D.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 5470.
- (39) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Misra, A.; Klein, D. J. *Theor. Chem. Acc.*, **2010**, *127*, 57.
- (40) Shil, S.; Sarbadhikary, P.; Misra, A. *RSC Adv.*, **2016**, *6*, 99467.
- (41) Paul, S.; Misra, A. *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 843.
- (42) Paul, S.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 6641.
- (43) Ali, Md. E.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 2776.
- (44) Ko, K. C.; Cho, D.; Lee, J. Y. *J. Phys. Chem. A* **2013**, *117*, 3561.
- (45) Cho, D.; Ko, K.C.; Ikabata, Y.; Wakayama, K.; Yoshikawa, T.; Nakai, H.; Lee, J. Y. *J. Chem. Phys.* **2015**, *142*, 024318.
- (46) Nam, Y.; Cho, D.; Lee, J. Y. *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 11237.
- (47) Cho, D.; Ko, K. C.; Park, H.; Lee, J. Y. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 10109.
- (48) Cho, D.; Ko, K. C.; Lee, J. Y. *Int. J. Quant. Chem.* **2016**, *116*, 578.
- (49) Ko, K. C.; Cho, D.; Lee, J. Y. *J. Phys. Chem. A* **2012**, *116*, 6837.
- (50) Ko, K. C.; Son, S. U.; Lee, S.; Lee, J. Y. *J. Phys. Chem. B* **2011**, *115*, 8401.
- (51) Cho, D.; Ko, K. C.; Lee, J. Y. *J. Phys. Chem. A* **2014**, *118*, 5112.
- (52) Ko, K. C.; Park, Y. G.; Cho, D.; Lee, J. Y. *J. Phys. Chem. A* **2014**, *118*, 9596.
- (53) Song, M.; Song, X.; Bu, Y. *Chem. Phys. Chem.*, **2017**, *18*, 2487.

- (54) Song, M.; Song, X.; Bu, Y. *J. Phys. Chem. C* **2017**, *121*, 21231.
- (55) Sarbadhikary, P.; Shil, S.; Panda, A.; Misra, A. *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 5623.
- (56) Tamura, M.; Nakazawa, Y.; Shiomi, D.; Nozawa, K.; Hosokoshi, Y.; Ishikawa, M.; Takahashi, M.; Kinoshita, M. *Chem. Phys. Lett.*, **1991**, *186*, 401.
- (57) Noodleman, L. *J. Chem. Phys.*, **1981**, *74*, 5737.
- (58) Noodleman, L.; Baerends, E. *J. Am. Chem. Soc.*, **1984**, *106*, 2316.
- (59) Noodleman, L.; Davidson, E. R. *Chem. Phys.* **1986**, *109*, 131.
- (60) Noodleman, L.; Peng, C. Y.; Case, D. A.; Mouesca, J. M. *Coord. Chem. Rev.*, **1995**, *144*, 199.
- (61) Yamaguchi, K.; Fukui, H.; Fueno, T. *Chem. Lett.* **1986**, *15*, 625.
- (62) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Nasu, K. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **1987**, *26*, L1362.
- (63) Yamaguchi, K.; Jensen, F.; Dorigo, A.; Houk, K. N. *Chem. Phys. Lett.*, **1988**, *149*, 537.
- (64) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Houk, K. N. *Theor. Chim. Acta*, **1988**, *73*, 337.
- (65) 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, M. J.; 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**.
- (66) Büttiker, M.; Imry, Y.; Landauer, R.; Pinhas, S. *Phys. Rev. B*, **1985**, *31*, 6207.
- (67) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Subotnik, J. E.; Mujica, V.; Ratner, M. A. *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 024103 (1-17).
- (68) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Ratner, M. A. *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, *132*, 3682.
- (69) Latif, I. A.; Singh, V. P.; Bhattacharjee, U.; Panda, A.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A*, **2010**, *114*, 6648–6656.
- (70) Herring, C. Magnetism IIB, Direct exchange between well-separated atoms, 5, Eds. G.T. Rado and H. Suhl (1966) Academic Press, New York.
- (71) Polo, V.; Alberola, A.; Andres, J.; Anthony, J.; Pilkington, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2008**, *10*, 857.
- (72) Shil, S.; Roy, M.; Misra, A. *RSC Adv.*, **2015**, *5*, 105574.
- (73) Hermann, C.; Neugebauer, J.; Gladysz, J. A.; Reiher, M. *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 6174.

- (74) Prasongkit, J. ; Grigoriev, A.; Wendin, G. ; Ahuja, R. *Phys. Rev. B*, **2010**, *81*, 115404.
- (75) Kondo, M.; Tada, T. ; Yoshizawa, K. *J. Phys. Chem. A* **2004**, *108*, 9143.
- (76) Stuyver, T.; Fias, S. ; Proft, F. De. ; Geerlings, P. *J. Phys. Chem. C*, **2015**, *119*, 26390.
- (77) Aravena, D.; Ruiz, E. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 777.
- (78) Herrmann, C.; Solomon, G. C.; Ratner, M. A. *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, *132*, 3682.
- (79) Ashcroft, N. W.; Mermin, N. D. *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York, **1976**.
- (80) Pauly, F.; Viljas, J. K. ; Cuevas, J. C. ; Schön, G. *Phys. Rev. B*, **2008**, *77*, 155312.
- (81) Tour, J. M.; Kozaki, M.; Seminario, J. M. *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, *120*, 8486.
- (82) Modelli, A.; Venuti, M.; Scagnolari, F.; Contento, M.; Jones, D. *J. Phys. Chem. A*, **2001**, *105*, 219.
- (83) Distefano, G.; Jones, D. ; Guerra, M. ; Favaretto, L. ; Modelli, A. ; Mengoli, G. *J. Phys. Chem.* **1991**, *95*, 9746.
- (84) Colle, M. D.; Cova, C.; Distefano, G. ; Jones, D. ; Modelli, A. ; Comisso, N. *J. Phys. Chem. A*. **1999**, *103*, 2828.
- (85) Brédas, J. L. ; Thémans, B.; Fripiat, J. G. ; André, J. M. ; Chance, R. R. *Phys. Rev. B*, **1984**, *29*, 6761.
- (86) Schlicke, H.; Herrmann, C. *Chem. Phys. Chem.*, **2014**, *15*, 4011.
- (87) Proppe, J.; Herrman, C. *J. Comput. Chem.* **2015**, *36*, 201.
- (88) Choi, Y. C. ; Kim, W. Y. ; Park, K. S. ; Tarakeshwar, P.; Kim, K. S. ; Kim, T. S. ; Lee, J. Y. *Chem. Phys.*, **2005**, *122*, 094706.
- (89) Hermann, C.; Neugebauer, J.; Gladysz, J. A.; Reiher, M. *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 6174.
- (90) Chumak, A. V. ; Vasyuchka, V. I. ; Serga, A. A. ; Hillebrands, B. *Nat. Phys.*, **2015**, *11*, 453.

CHAPTER 6

- (1) Taylor, D. R. *Chem. Rev.* **1967**, *67*, 317-359.
- (2) Hendon, C.H.; Tiana, D.; Murray, A.T.; Carbery, D.R.; Walsh, A. *Chem. Sci.* **2013**, *4*, 4278–4284.
- (3) Eliel, L. E.; Wilen, S. H. *Stereochemistry of organic compounds*; John Wiley & Sons: New York, **1994**; Chapter 9, p 539.
- (4) Skibar, W.; Kopacka, H.; Wurst, K.; Salzmann, C.; Ongania, K.H.; Biani, F.F.D.; Zanello, P.; Bildstein, B. *Organometallics* **2004**, *23*, 1024-1041.
- (5) Januszewski, J.A.; Tykwinski, R.R. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 3184-3203.
- (6) Januszewski, J.A.; Wendinger, D.; Methfessel, C.D.; Hampel, F.; Tykwinski, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 1817–1821.
- (7) Wendinger, D.; Tykwinski, R.R. *Acc. Chem. Res.* **2017**, *50*, 1468–1479.

- (8) Shil, S.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 2022-2027.
- (9) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Misra, A. *J. Photochem. Photobiol., A* **2011**, *217*, 402-410.
- (10) Zhang, F.; Song, X.; Bu, Y. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 27930-27937.
- (11) Saha, A.; Latif, I. A.; Datta, S.N. *J. Phys. Chem. A* **2011**, *115*, 1371-1379.
- (12) Ali, Md. E.; Staemmler, V.; Illas, F.; Oppeneer, P.M. *J. Comput. Theory Chem.* **2013**, *9*, 5216-5220.
- (13) Bhattacharya, D.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A*, **2009**, *113*, 5470-5475.
- (14) Shil, S.; Sarbadhikary, P.; Misra, A. *RSC Adv.*, **2016**, *6*, 99467.
- (15) Paul, S.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A*. **2010**, *114*, 6641.
- (16) Coey, J. M. D. *Magnetism and magnetic materials*, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., **2010**, ISBN 13: 9780521816144.
- (17) Latif, I. A.; Singh, V. P.; Bhattacharjee, U.; Panda, A.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 6648-6656.
- (18) Ali, Md. E.; Datta, S.N. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 2776-2784.
- (19) Cho, D.; Ko, K. C.; Iwabata, Y.; Wakayama, K.; Yoshikawa, T.; Nakai, H.; Lee, J.Y. *J. Chem. Phys.* **2015**, *142*, 024318.
- (20) Kolanji, K.; Postulka, L.; Wolf, B.; Lang, M.; Schollmeyer, D.; Baumgarten, M. *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 140-149.
- (21) Song, M.; Song, X.; Bu, Y. *Chem. Phys. Chem.* **2017**, *18*, 2487-2498.
- (22) Chen, D.; Deng, T.; Yang, L.; Bu, Y. *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 14152-14163.
- (23) Sarbadhikary, P.; Shil, S.; Panda, A.; Misra, A. *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 5623.
- (24) Sarbadhikary, P.; Shil, S.; Misra, A. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 9364-9375.
- (25) Garner, M. H.; Hoffmann, R.; Rettrup, S.; Solomon, G.C. *ACS Cent. Sci.* **2018**, *4*, 688-700.
- (26) Garner, M. H.; Jensen, A.; Hyllested, L.; Solomon, G. C. *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 4598-4608.
- (27) Aoki, Y.; Orimoto, Y.; Imamura, A. *ACS Cent. Sci.* **2018**, *4*, 664-665.
- (28) Appel, R. *Multiple Bonds and Low Coordination in Phosphorus Chemistry*, Georg Thieme Verlag: Stuttgart, Germany, **1990**; p 157.
- (29) Escudié, J.; Ranaivonjatovo, H.; Rigon, L. *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 3639-3696.
- (30) Eichler, B.; West, R. *Adv. Organomet. Chem.* **2000**, *46*, 1-46.
- (31) Escudié, J.; Ranaivonjatovo, H.; Bouslikhane, M.; Harouch, Y. E; Baiget, L.; Nemes, G.C. *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **2004**, *53*, 1020-1033.
- (32) Escudié, J.; Ranaivonjatovo, H. *Organometallics* **2007**, *26*, 1542-1559.
- (33) Märkl, G.; Sejpka, H.; Dietl, S.; Nuber, B.; Ziegler, M. L. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1986**, *25*, 1003-1004.
- (34) Bouslikhane, M.; Gornitzka, H.; Ranaivonjatovo, H.; Escudié, J. *Organometallics* **2002**, *21*, 1531-1533.
- (35) Rancurel, C.; Heise, H.; Köhler, F. H.; Schatzschneider, U.; Rentschler, E.; Vidal-Gancedo, J.; Veciana, J.; Sutter, J. -P. *J. Phys. Chem. A* **2004**, *108*, 5903-5914.
- (36) Polo, V.; Alberola, A.; Andres, J.; Anthony, J.; Pilkington, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 857-864.

- (37) Bhattacharya, D.; Shil, S.; Panda, A.; Misra, A. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 11833–11841.
- (38) Tamura, M.; Nakazawa, Y.; Shiomi, D.; Nozawa, K.; Hosokoshi, Y.; Ishikawa, M.; Takahashi, M.; Kinoshita, M. *Chem. Phys. Lett.* **1991**, *186*, 401–404.
- (39) Ziessel, R.; Stroh, C.; Heise, H.; Köhler, F. H.; Turek, P.; Claiser, N.; Souhassou, M.; Lecomte, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 12604–12613.
- (40) Hicks, R. G.; Lemaire, M. T.; Öhrström, L.; Richardson, J. F.; Thompson, L. K.; Xu, Z. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 7154–7159.
- (41) Wautelet, P.; Catala, L.; Bieber, A.; Turek, P.; André, J.-J. *Polyhedron* **2001**, *20*, 1571–1576.
- (42) Gomberg, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1900**, *22*, 757–771.
- (43) Gomberg, M. *Chem. Rev.* **1924**, *1*, 91–141.
- (44) Kanno, F.; Inoue, K.; Koga, N.; Iwamura, H. *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, *115*, 847–850.
- (45) Calder, A.; Forester, A. R.; James, P. G.; Luckhurst, G. R. *J. Am. Chem. Soc.* **1969**, *91*, 3724–3727.
- (46) Fang, S.; Lee, M. -S.; Hrovat, D.A.; Borden, W.T. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 6727–6731.
- (47) Jung, M.; Sharma, A.; Hinderberger, D.; Braun, S.; Schatzschneider, U.; Rentschler, E. *Inorg. Chem.* **2009**, *48*, 7244–7250.
- (48) Oniciu, D. C.; Matsuda, K.; Iwamura, H. *J. Chem. Soc., Perkin Trans.* **1996**, *2*, 907–913.
- (49) Inoue, K.; Iwamura, H. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 3173–3174.
- (50) Noodleman, L. *J. Chem. Phys.* **1981**, *74*, 5737–5743.
- (51) Noodleman, L.; Baerends, E. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, *106*, 2316–2327.
- (52) Noodleman, L.; Davidson, E. R. *Chem. Phys.* **1986**, *109*, 131–143.
- (53) Noodleman, L.; Peng, C. Y.; Case, D. A.; Mouesca, J. -M. *Coord. Chem. Rev.* **1995**, *144*, 199–244.
- (54) Martin, R. L.; Illas, F. *Phys. Rev. Lett.* **1997**, *79*, 1539–1542.
- (55) Caballol, R.; O. Castell, O.; Illas, F.; Moreira, I. de P. R.; Malrieu, J. P. *J. Phys. Chem. A* **1997**, *101*, 7860–7866.
- (56) Paul, S.; Misra, A. *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, *8*, 843–853.
- (57) Yamaguchi, K.; Fukui, H.; Fueno, T. *Chem. Lett.* **1986**, *15*, 625–628.
- (58) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Nasu, K. *Jpn. J. Appl. Phys.* **1987**, *26*, L1362–L1364.
- (59) Yamaguchi, K.; Jensen, F.; Dorigo, A.; Houk, K. N. *Chem. Phys. Lett.* **1988**, *149*, 537–542.
- (60) Yamaguchi, K.; Takahara, Y.; Fueno, T.; Houk, K. N. *Theor. Chim. Acta.* **1988**, *73*, 337–364.
- (61) 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, M. J.; 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**.
- (62) Shil, S.; Herrmann, C. *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 11733–11740.
- (63) Ali, M. E.; Roy, A. S.; Datta, S. N. *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111*, 5523–5527.
- (64) Polo, V.; Alberola, A.; Andres, J.; Anthony, J.; Pilkington, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 857-864.
- (65) Shil, S.; Roy, M.; Misra, A. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 105574-105582.
- (66) Herring, C. in Magnetism IIB, Direct exchange between well-separated atoms, ed. G.T. Rado and H. Suhl, Academic Press, New York, **1966**, vol. 5.
- (67) Trindle, C.; Datta, S. N. *Int. J. Quantum Chem.* **1996**, *57*, 781-799.
- (68) Schatzschneider, U.; Rentschler, E. *J. Mol. Struct. (Theochem)* **2003**, *638*, 163–168.
- (69) Hoffmann, R.; Zeiss, G. D.; Dine, G. W. V. *J. Am. Chem. Soc.* **1968**, *90*, 1485.
- (70) Zhang, G.; Li, S.; Jiang, Y. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 5573-5582.