

References

- [1.1] J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, Fourth Edition*, **1993**.
- [1.2] a) G. A. Lawrance, *Introduction to Coordination Chemistry*, Wiley, **2010**; (b) IUPAC, *Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book")*, **1997**.
- [1.3] N. Norman Greenwood, Alan Earnshaw, *Chemistry of the Elements, 2nd ed.*, **1997**.
- [1.4] a) J. Wang, H. -H. Cui, Y. -Q. Zhang, L. Chen, X. -T. Chen, *Polyhedron* **2018**, *154*, 148-155; b) J. K. Nath, J. B. Baruah, *Polyhedron* **2012**, *36*, 1-5; c) R. N. Patel, Y. P. Singha, Y. Singha, R. J. Butcher, *Polyhedron* **2016**, *104*, 116-126; d) S. C. Manna, J. Ribas, E. Zangrando, N. Ray Chaudhuri, *Inorg. Chim. Acta* **2007**, *360*, 2589-2597.
- [1.5] a) M. D. Allendorf, C. A. Bauer, R. K. Bhakta, R. J. T. Houk, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 1330-1352; b) G. B. Li, H. C. Fang, Y. P. Cai, Z. Y. Zhou, P. K. Thallapally, J. Tian, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 7241-7243; c) J. Heine, K. M. Buschbaum, *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 9232-9242; d) L. Xu, Y. Jing, L. Feng, Z. Xian, Y. Yan, Z. Liu, J. Huang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, *15*, 16641-16647; e) P. Yang, X. X. Wu, J. Z. Huo, B. Ding, Y. Wang, X. Wang, *CrystEngComm*, **2013**, *15*, 8097-8109.
- [1.6] a) J. P. Costes, J. M. Clemente-Juan, F. Dahan, F. Nicodeme, M. Verelst, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2002**, *41*, 323-325; b) P. Kanoo, C. Madhu, G. Mostafa, T. K. Maji, A. Sundaresan, S. K. Pati, C. N. R. Rao, *Dalton Trans.* **2009**, 5062-5064; c) M. Kurmoo, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 1353-1379; d) P. Mahata, S. Natarajan, P. Panissod, M. Drillon, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 10140-10150; e) L. -F. Ma, M. -L. Han, J. -H. Qin, L. -Y. Wang, M. Du, *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 9431-9442; f) B. K. Tripuramallu, P. Manna, S. N. Reddy, S. K.

Das, *Cryst. Growth Des.* **2012**, *12*, 777-792; g) Y. -Z. Zheng, Z. Zheng, X. -M. Chen, *Coord. Chem. Rev.* **2014**, *258*, 1-15.

[1.7] a) R. Vaidhyanathan, S. S. Iremonger, K. W. Dawson, G. K. H. Shimizu, *Chem. Commun.* **2009**, 5230-5232; b) O. K. Farha, A. Ö. Yazaydin, I. Eryazici, C. D. Malliakas, B. G. Hauser, M. G. Kanatzidis, S. T. Nguyen, R. Q. Snurr, J. T. Hupp, *Nat. Chem.* **2010**, *2*, 944-948; c) K. Jayaramulu, S. K. Reddy, A. Hazra, S. Balasubramanian, T. K. Maji, *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 7103-7111; d) R. B. Getman, Y. -S. Bae, C. E. Wilmer, R. Q. Snurr, *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 703-723; e) T. A. Makal, J. R. Li, W. Lu, H. C. Zhou, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 7761-7779; f) L. Li, S. Tang, C. Wang, X. Lv, M. Jiang, H. Wu, X. Zhao, *Chem. Commun.* **2014**, *50*, 2304-2307; g) J. A. Mason, M. Veenstra, J. R. Long, *Chem. Sci.* **2014**, *5*, 32-51.

[1.8] a) H. K. Chae, D. Y. Siberio-Perez, J. Kim, Y. Go, M. Eddaoudi, A. J. Matzger, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Nature* **2004**, *427*, 523-527; b) P. Kanoo, K. L. Gurunatha, T. K. Maji, *J. Mater. Chem.* **2010**, *20*, 1322-1331; c) Y. -S. Bae, A. M. Spokoyny, O. K. Farha, R. Q. Snurr, J. T. Hupp, C. A. Mirkin, *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 3478-3480; d) S. Horike, Y. Inubushi, T. Hori, T. Fukushima, S. Kitagawa, *Chem. Sci.* **2012**, *3*, 116-120; e) J. Duan, M. Higuchi, R. Krishna, T. Kiyonaga, Y. Tsutsumi, Y. Sato, Y. Kubota, M. Takata, S. Kitagawa, *Chem. Sci.* **2014**, *5*, 660-666.

[1.9] a) Y. Huang, T. Liu, J. Lin, J. Lü, Z. Lin, R. Cao, *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 2191-2198; b) S. M. F. Vilela, A. D. G. Firmino, R. F. Mendes, J. A. Fernandes, D. Ananias, A. A. Valente, H. Ott, L. D. Carlos, J. Rocha, J. P. C. Tomé, F. A. A. Paz, *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 6400-6402; c) B. Gole, A. K. Bar, A. Mallick, R. Banerjee, P. S. Mukherjee, *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 7439-7441; d) A. Bhunia, M. A. Gotthardt, M. Yadav, M. T. Gamer, A. Eichhöfer, W. Kleist, P. W. Roesky, *Chem. -Eur. J.* **2013**, *19*, 1986-1995; e) B. Bhattacharya, D. K. Maity, P. Pachfule, E. Colacio, D. Ghoshal, *Inorg. Chem. Front.*, **2014**, *1*, 414-425.

- [1.10] a) P. Horcajada, C. Serre, M. Vallet-Regi, M. Sebban, F. Taulelle, G. Férey, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2006**, *45*, 5974-5978; b) P. Horcajada, C. Serre, G. Maurin, N. A. Ramsahye, F. Balas, M. A. Vallet-Regí, M. Sebban, F. Taulelle, G. R. Férey, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 6774-6780; c) N. J. Hinks, A. C. McKinlay, B. Xiao, P. S. Wheatley, R. E. Morris, *Microporous Mesoporous Mater.* **2010**, *129*, 330-334.
- [1.11] a) A. T. Çolak, O. Z. Yeşilel, G. Pamuk, H. Günay, O. Büyükgüngör, *Polyhedron* **2011**, *30*, 1012–1022; b) S. Manna, S. Mistri, E. Zangrando, S. C. Manna, *J. Coord. Chem.* **2014**, *67*, 1174–1185.
- [1.12] a) S. C. Manna, S. Konar, E. Zangrando, K. Okamoto, J. Ribas, N. Ray Chaudhuri, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 4646-4654; b) S. C. Manna, E. Zangrando, N. Ray Chaudhuri, *J. Mol. Struct.* **2008**, *877*, 145-151; c) S. C. Manna, K. Okamoto, E. Zangrando, N. Ray Chaudhuri, *CrystEngComm*, **2007**, *9*, 199-202; d) S. C. Manna, E. Zangrando, J. Ribas, N. Ray Chaudhuri, *Dalton Trans.* **2007**, 1383-1391.
- [1.13] a) J. Li, J. Tao, R. -B. Huang, L. -S. Zheng, *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 5988–5990; b) H. -P. Xiao, X. -H. Li, A. Morsali, J. -G. Wang, W. -B. Zhang, Z. Anorg. Allg. Chem. **2007**, *633*, 1107-1111.
- [1.14] Y. -H. Zhao, Z. -M. Su, Y. -M. Fu, K. -Z. Shao, P. Li, Y. Wang, X. -R. Hao, D. -X. Zhu, S. -D. Liu, *Polyhedron* **2008**, *27*, 583–592.
- [1.15] a) L. Sacconi, *Coord. Chem. Rev.*, **1966**, *1*, 126-132; b) S. Yamanda, A. Takeuchi, *Coord. Chem. Rev.*, **1982**, *43*, 187-204; c) P. A. Vigato, S. Tamburini, *Coord. Chem. Rev.*, **2004**, *248*, 1717-2128.
- [1.16] a) R. J. Fessenden, J. S. Fessenden, *Organic Chemistry*, Brooks/Cole Publishing Company, USA, **1998**; b) Z. Cimerman, S. Miljanic, N. Galic, *Croatica Chemica Acta*, **2000**, *73*, 81-95; c) A. Scheurer, H. Maid, F. Hampel, R. W. Saalfrank, L. Toupet, P. Mosset, R. Puchta, N. J. R. Van E. Hommes, *Eur. J. Org. Chem.* **2005**, 2566-2574.

[1.17] a) T. Shiga, K. Maruyama, G. N. Newton, R. Inglis, E. K. Brechin, H. Oshio, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 4272-4274; b) S. C. Manna, S. Konar, E. Zangrando, M. G. B. Drew, J. Ribas, N. Ray Chaudhuri, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 1751-1758; c) B. Sarkar, S. Konar, C. J. Gómez-García, A. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 11611-11619; d) P. Mukherjee, M. G. B. Drew, M. Estrader, A. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 7784-7791.

[1.18] a) M. Eddaoudi, H. Li, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 1391-1397; b) R. Tagore, R. H. Crabtree, G. W. Brudvig, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 1815-1823; c) J. S. Fossey, R. Matsubara, H. Kiyohara, S. Kobayashi, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 781-783.

[1.19] a) T. Riis-Johannessen, K. Schenk, K. Severin, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 9546-9553; b) L. E. McQuade, S. J. Lippard, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 7464-7471.

[1.20] a) P. J. Sadler, *Platinum Metals Rev.* **2008**, *52*, 21-22; b) K. H. Thompson, C. Orvig, *Dalton Trans.* **2006**, 761-764; c) C. J. Jones, J. R. Thornback, *Medicinal Applications of Coordination Chemistry*, RSC Publishing, Cambridge, **2007**; d) M. S. Islas, J. J. M. Medina, L. L. LópezTévez, T. Rojo, L. Lezama, M. G. Merino, L. Calleros, M. A. Cortes, M. R. Puyol, G. A. Echeverría, O. E. Piro, E. G. Ferrer, P. A. M. Williams, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 5724-5737; e) A. Valent, M. Melník, D. Hudecová, B. Dudová, R. Kivekäs, M. R. Sundberg, *Inorg. Chim. Acta* **2002**, *340*, 15-20; f) N. Raman, J. Joseph, A. S. Kumara Velan, C. Pothiraj, *Mycobiology* **2006**, *34*, 214-218; g) J. Vančo, J. Marek, Z. Trávníček, E. Račanská, J. Muselík, O. Švajlenová, *J. Inorg. Biochem.* **2008**, *102*, 595-605; h) C. Marzano, M. Pellei, F. Tisato, C. Santini, *Anticancer Agents Med. Chem.* **2009**, *9*, 185-211; i) X. Zhong, J. Yi, J. Sun, H. -L. Wei, W. -S. Liu, K. -B. Yu, *Eur. J. Med. Chem.* **2006**, *41*, 1090-1092.

[1.21] a) E. Uller, B. Demleitner, I. Bernt, R. W. Saalfrank, *Structure and Bonding*, M. Fujita (Ed.), Vol 96, Springer, Berlin, **2000**; b) S. Leininger, B. Olenyuk, P. J. Stang, *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 853-908.

[1.22] a) S. R. Seidel, P. J. Stang, *Acc. Chem. Res.* **2002**, *35*, 972-983; b) A. Y. Robin, K. M. Fromm, *Coord. Chem. Rev.* **2006**, *250*, 2127-2157.

[1.23] a) G. A. Jeffrey, *An Introduction to Hydrogen Bonding*, Oxford University Press, Oxford, **1997**; b) G. R. Desiraju, *Acc. Chem. Res.* **2002**, *35*, 565-573; c) C. B. Aakeroy, P. D. Chopade, C. Ganser, J. Desper, *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 4688-4690; d) N. V. Belkova, E. S. Subina, L. M. Epstein, *Acc. Chem. Res.* **2005**, *38*, 624-631; e) J. Reedijk, *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 1776-1783.

[1.24] a) E. R. T. Tiekkink, J. Zukerman-Schpector (Eds), *The Importance of Pi-Interactions in Crystal Engineering: Frontiers in Crystal Engineering*, 1st edn, John Wiley & Sons, Chichester, UK, **2012**; b) T. Kawase, H. Kurata, *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 5250-5273; c) A. Fernández-Botello, A. Holý, V. Moreno, B. P. Operschall, H. Sigel, *Inorg. Chim. Acta* **2009**, *362*, 799-810; d) A. S. Filatov, L. T. Scott, M. A. Petrukhina, *Cryst. Growth Des.* **2010**, *10*, 4607-4621.

[1.25] a) M. Nishio, M. Hirota, Y. Umezawa, *The CH/p Interaction*, Wiley-VCH, New York, **1998**; b) J. J. Campos-Gaxiola, H. Hopfl, M. Parra-Hake, *Inorg. Chim. Acta* **2008**, *361*, 248-254; c) M. B. Bushuev, V. P. Krivopalov, N. V. Pervukhina, D. Naumov, G. G. Moskalenko, K. A. Vinogradova, L. A. Sheludyakova, S. V. Larionov, *Inorg. Chim. Acta* **2010**, *363*, 1547-1555.

[1.26] a) H. -D. Bian, J. -Y. Xu, W. Gu, S. -P. Yan, D. -Z. Liao, Z. -H. Jiang, P. Cheng, *Inorg. Chem. Comm.* **2003**, *6*, 573–576; b) S. Choubey, S. Roy, K. Bhar, R. Ghosh, P. Mitra, C. -H. Lin, J. Ribas, B. K. Ghosh, *Polyhedron* **2013**, *55*, 1-9; c) S. Dutta, S. Jana, P. Mahapatra, A. Bauzá, A. Frontera, A. Ghosha, *CrystEngComm*, **2018**, *20*, 6490-6501.

[1.27] A. Paul, A. Figuerola, H. Puschmann, S. C. Manna, *Polyhedron* **2019**, *157*, 39–48.

[1.28] a) Y. -Y. Zhu, Y. -Q. Zhang, T. -T. Yin, C. Gao, B. -W. Wang, S. Gao, *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 5475–5486; b) R. Herchel, R. Boča, *Dalton Trans.* **2005**, 1352–1353; c) G. A.

Craig, M. Murrie, *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 2135-2147; d) F. Habib, G. Brunet, F. Loiseau, T. Pathmalingam, T. J. Burchell, A. M. Beauchemin, W. Wernsdorfer, R. Clérac, M. Murugesu, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 1296–1303; e) Q. -W. Xie, S. -Q. Wu, W. -B. Shi, C. -M. Liu, A. -L. Cuia, H. -Z. Kou, *Dalton Trans.* **2014**, *43*, 11309-11316; f) S. Das, S. Hossain, A. Dey, S. Biswas, J. -P. Sutter, V. Chandrasekhar, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 5020–5028; g) S. Ghosh, Y. Ida, T. Ishida, A. Ghosh, *Cryst. Growth Des.* **2014**, *14*, 2588–2598.

[1.29] a) M. -N. Belzile, A. A. Neverov, R. S. Brown, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 7916–7925; b) H. Sheng, F. Xu, Y. Yao, Y. Zhang, Q. Shen, *Inorg. Chem.* **2007**, *46*, 7722-7724; c) C. C. H. Atienza, T. Diao, K. J. Weller, S. A. Nye, K. M. Lewis, J. G. P. Delis, J. L. Boyer, A. K. Roy, P. J. Chirik, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 12108–12118; d) T. Punniyamurthy, L. Rout, *Coord. Chem. Rev.* **2008**, *252*, 134–154.

[1.30] a) N. S. Gwaram, H. M. Ali, H. Khaledi, M. A. Abdulla, A. H. A. Hadi, T. K. Lin, C. L. Ching, C. L. Ooi, *Molecules*, **2012**, *17*, 5952-5971; b) T. Mukherjee, J. C. Pessoa, A. Kumar, A. R. Sarkar, *Dalton Trans.* **2013**, *42*, 2594-2607.

[1.31] E. C. Niederhoffer, J. H. Timmons, A. E. Martell, *Chem. Rev.* **1984**, *84*, 137-203.

[1.32] a) T. F. Liu, D. Fu, S. Gao, Y. Z. Zhang, H. L. Sun, Y. Liu, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 13976–13977; b) E. Pardo, R. Ruiz-Garcia, F. Lloret, J. Faus, M. Julve, Y. Journaux, F. Delgado, C. Ruiz-Peres, *Adv. Mater.* **2004**, *16*, 1597–1600.

[1.33] a) Y. Z. Zheng, M. L. Tong, W. -X. Zhang, X. M. Chen, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2006**, *45*, 6310–6314.

[1.34] a) S. J. Lippard, J. M. Berg, *Bioinorganic Chemistry*, University Science Books, Mill Valley, CA, **1994**; b) S. Itoh, S. Fukuzumi, *Acc. Chem. Res.* **2007**, *40*, 592-600; c) K. Ghosh, P. Kumar, V. Mohan, U. P. Singh, S. Kasiri, S. S. Mandal, *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 3343-3345.

[1.35] M. González-Álvarez, G. Alzuet, J. Borrás, M. Pitié, B. Meunier, *J. Biol. Inorg. Chem.* **2003**, *8*, 644-652.

[1.36] W. Kaim, J. Rall, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1996**, *35*, 43-60.

[1.37] a) J. Reedijk, E. Bouwman, *Bioinorganic catalysis*, 2nd Ed., Marcel Dekkar Inc. New York, **1999**; b) R. H. Holm, P. Kinnepohl, E. I. Solomon, *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 2239-2314.

[1.38] R. H. Holm, P. Kinnepohl, E. I. Solomon, *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 2239-2314.

[1.39] a) G. E. Kostakis, P. Xydias, E. Nordlander, J. C. Plakatouras, *Inorg. Chim. Acta* **2012**, *383*, 327-331; b) S. -H. Zhang, Y. -G. Wang, C. Feng, G. Z. Li, *J. Coord. Chem.* **2012**, *63*, 3697-3705; c) S. Roy, R. J. Butcher, M. S. E. Fallah, J. Tercero, J. C. Pessoa, *Polyhedron* **2013**, *53*, 269-277.

[1.40] a) M. Sutradhar, G. Mukherjee, M. G. B. Drew, S. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2007**, *46*, 5069–5075; b) M. Sutradhar, L. M. Carrella, E. Rentschler, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2012**, 4273–4278; c) T. Roy Barman, M. Sutradhar, M. G. B. Drew, E. Rentschler, *Polyhedron* **2013**, *51*, 192–200; d) M. Sutradhar, T. Roy Barman, J. Klanke, M. G. B. Drew, E. Rentschler, *Polyhedron* **2013**, *53*, 48–55; e) Y. Li, Q. Wu, L. Lecren, R. Clérac, *Journal of Molecular Structure*, **2008**, *890*, 339-345.

[1.41] a) L. Banci, A. Bencini, P. Dapporto, A. Dei, D. Gatteschi, *Inorg. Chem.* **1980**, *19*, 3395–3399; b) C. Jocher, T. Pape, W. W. Seidel, P. Gamez, J. Reedijk, F. E. Hahn, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 4914-4923; c) S. K. Dey, A. Mukherjee, *New J. Chem.* **2014**, *38*, 4985-4995.

[1.42] a) G. Ferguson, C. R. Langrick, D. Parker, K. E. Matthes, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* **1985**, 1609–1610; b) R. Sillanpa, J. Valkonen, *Acta Chem. Scand.* **1992**, *46*, 1072–1075; c) J. -C. Zheng, R. J. Rousseau, S. Wang, *Inorg. Chem.* **1992**, *31*, 106–110; d) R. Modak, Y. Sikdar, S. Mandal, S. Goswami, *Inorg. Chem. Commun.* **2013**, *37*, 193–196; e) D.

Wu, X. Zhang, P. Huang, W. Huang, M. Ruan, Z. W. Ouyang, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 10976–10982.

[1.43] a) K. Smolander, *Acta Chem. Scand.* **1982**, *A36*, 189–194; b) L. Schwabe, W. Haase, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1985**, 1909–1913; c) X. S. Tan, Y. Fujii, R. Nukada, M. Mikuriya, Y. Nakano, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1999**, 2415–2416; d) R. W. Saalfrank, I. Bernt, F. Hampel, *Angew. Chem.* **2001**, *40*, 1700–1703; e) A. M. Kirillov, M. N. Kopylovich, M. V. Kirillova, M. Haukka, M. F. C. Guedes da Silva, A. J. L. Pombeiro, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *44*, 4345–4349; f) M. Hamid, A. A. Tahir, M. Mazhar, M. Zeller, K. C. Molloy, A. D. Hunter, *Inorg. Chem.* **2006**, *45*, 10457–10466; g) D. Wu, D. Guo, Y. Song, W. Huang, C. Duan, Q. Meng, O. Sato, *Inorg. Chem.* **2009**, *48*, 854–860.

[1.44] a) M. Ahlgren, U. Turpeinen, K. Smolander, *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.* **1980**, *36*, 1091–1095; b) K. Smolander, *Acta Chem. Scand.* **1983**, *A37*, 5–13; c) H. Muhonen, W. E. Hatfield, J. H. Helms, *Inorg. Chem.* **1986**, *25*, 800–805; d) I. C. Lazzarini, L. Carrella, E. Rentschler, P. Alborés, *Polyhedron* **2012**, *31*, 779–788.

[1.45] a) E. Colacio, M. Ghazi, R. Kivekäs, J. M. Moreno, *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 2882–2890; b) K. G. Alley, R. Bircher, O. Waldmann, S. T. Ochsenbein, H. U. Gudel, B. Moubaraki, K. S. Murray, F. Fernandez-Alonso, B. F. Abrahams, C. Boskovic, *Inorg. Chem.* **2006**, *45*, 8950–8957.

[1.46] a) J. Sletten, A. Sorensen, M. Julve, Y. Journaux, *Inorg. Chem.* **1990**, *29*, 5054–5058; b) W. -H. Gu, X. -Y. Chen, L. -H. Yin, A. Yu, X. -Q Fu, P. Cheng, *Inorg. Chim. Acta* **2004**, *357*, 4085–4090; c) M. Sarkar, R. Clerac, C. Mathoniere, N. G. R. Hearns, V. Bertolasi, D. Ray, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 6575–6585; d) H. Liu, H. Wang, H. Wu, D. Niu, *J. Coord. Chem.* **2005**, *58*, 1345–1349; e) S. Jammi, T. Punniyamurthy, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 2508–2511.

[1.47] a) R. Ziessel, L. Charbonnière, M. Cesario, T. Prangé, H. Nierengarten, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 975–979; b) M. Murugesu, R. Clérac, B. Pilawa, A. Mandel, C. E. Anson, A. K. Powell, *Inorg. Chim. Acta* **2002**, *337*, 328–336; c) R. Acevedo-Chávez, M. E. Costas, S. Bernès, G. Medina, L. Gasque, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **2002**, 2553–2558; d) Z. Xu, L. K. Thompson, D. O. Miller, *Chem. Commun.* **2001**, 1170–1171; e) R. H. Bode, W. L. Driessens, F. B. Hulsbergen, J. Reedijk, A. L. Spek, *Eur. J. Inorg. Chem.* **1999**, 505–507; f) B. Graham, M. T. W. Hearn, P. C. Junk, C. M. Kepert, F. E. Mabbs, B. Moubarak, K. S. Murray, L. Spiccia, *Inorg. Chem.* **2001**, *40*, 1536–1543.

[1.48] a) R. Mergehenn, W. Haase, *Acta Crystallogr., Sect. B* **1977**, *33*, 1877–1882; b) C. J. Calzado, *Chem. Eur. J.* **2013**, *19*, 1254–1261; c) E. Ruiz, S. Alvarez, A. Rodríguez-Fortea, P. Alemany, Y. Pouillon, C. Massobrio, J. S. Miller, M. Drillon Eds., *Electronic Structure and Magnetic Behavior in Polynuclear Transition-Metal Compounds*, vol. 2, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2001**; d) E. Ruiz, A. Rodríguez-Fortea, P. Alemany, S. Alvarez, *Polyhedron* **2001**, *20*, 1323–1327.

[1.49] a) S. Thakurta, P. Roy, R. J. Butcher, M. Salah El Fallah, J. Tercero, E. Garribba, S. Mitra, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 4385–4395; b) X. F. Yan, J. Pan, S. R. Li, H. Zhou, Z. Q. Pan, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2009**, *635*, 1481–1484; c) J. Tang, J. S. Costa, A. Pevec, B. Kozlevčar, C. Massera, O. Roubeau, I. Mutikainen, U. Turpeinen, P. Gamez, J. Reedijk, *Crystal Growth & Design*, **2008**, *8*, 1005–1012; d) W. -H. Gu, X. -Y. Chen, L. -H. Yin, A. Yu, X. -Q. Fu, P. Cheng, *Inorg. Chim. Acta* **2004**, *357*, 4085–4090; e) S. S. P. Dias, M. V. Kirillova, V. André, J. Klak, A. M. Kirillov, *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 5204–5212; f) S. Jammi, T. Punniyamurthy, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 2508–2511; g) P. Bhowmik, N. Aliaga-Alcalde, V. Gómez, M. Corbella, S. Chattopadhyay, *Polyhedron* **2013**, *49*, 269–276; h) E. Gungor, H. Kara, E. Colacio, A. J. Mota, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, 1552–1560; i) H. Liu,

- H. Wang, H. Wu, D. Niuj, *J. Coord. Chem.* **2005**, *58*, 1345–1349; j) M. Dey, C. P. Rao, P. K. Saarenketo, K. Rissanen, *Inorg. Chem. Comm.* **2002**, *5*, 380–383.
- [1.50] a) J. -Y. Zhang, K. Wang, X. -B. Li, E. -Q. Gao, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 9306-9314; b) A. Świtlicka-Olszewska, J. Palion-Gazda, T. Klemens, B. Machura, J. Vallejo, J. Cano, F. Lloret, M. Julve, *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 10181-10193; c) G. Aromi, E. K. Brechin, in: R. Winpenny (Ed.), *Structure and Bonding*, vol. 122, **2006**, p.1.
- [1.51] a) V. N. Valentin, A. P. Alexander, V. N. Yulia, M. -E. Boulon, A. V. Oleg, Z. V. Yan, E. P. W. Richard, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9792–9795; b) R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Caneschi, M. A. Novak, *Nature* **1993**, *365*, 141–143; c) D. Gatteschi, R. Sessoli, J. Villain, *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, Oxford, **2006**.
- [1.52] C. Plenk, J. Krause, E. Rentschler, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2015**, 370–374.
- [1.53] V. Chandrasekhar, A. Dey, A. J. Mota, E. Colacio, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 4554–4561.
- [1.54] A. Świtlicka-Olszewska, J. Palion-Gazda, T. Klemens, B. Machura, J. Vallejo, J. Cano, F. Lloretb, M. Julve, *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 10181-10193.
- [1.55] a) D. Gatteschi, R. Sessoli, J. Villain, *Molecular Nanomagnets*, Oxford Press, New York, **2006**; b) M. Kurmoo, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 1353–1379.
- [1.56] a) M. Nakano, H. Oshio, *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 3239–3248; b) E. C. Yang, D. N. Hendrickson, W. Wernsdorfer, M. Nakano, L. N. Zakharov, R. D. Sommer, A. L. Rheingold, M. Ledezma-Gairaud, G. Christou, *J. Appl. Phys.* **2002**, *91*, 7382–7384.
- [1.57] E. Eichhöfer, Y. Lan, V. Mereacre, T. Bodenstein, F. Weigend, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 1962-1974.
- [1.58] a) J. M. Zadrozny, J. Liu, N. A. Piro, C. J. Chang, S. Hill, J. R. Long, *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 3897–4020; b) J. M. Zadrozny, J. R. Long, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 20732–20734.

- [1.59] a) T. Jurca, A. Farghal, P. H. Lin, I. Korobkov, M. Murugesu, D. S. Richeson, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 15814-15817; b) F. Habib, O. R. Luca, V. Vieru, M. Shiddiq, I. Korobkov, S. I. Gorelsky, M. K. Takase, L. F. Chibotaru, S. Hill, R. H. Crabtree, M. Murugesu, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2013**, *52*, 11290-11293.
- [1.60] a) D. M. Pinero Cruz, D. N. Woodruff, I. R. Jeon, I. Bhowmick, M. Secu, E. A. Hillard, P. Dechambenoit, R. Clérac, *New J. Chem.* **2014**, *38*, 3443-3448; b) R. Ruamps, L. J. Batchelor, R. Guillot, G. Zakhia, A. L. Barra, W. Wernsdorfer, N. Guihery, T. Mallah, *Chem. Sci.* **2014**, *5*, 3418-3424.
- [1.61] a) J. Vallejo, I. Castro, R. Ruiz-García, J. Cano, M. Julve, F. Lloret, G. De Munno, W. Wernsdorfer, E. Pardo, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 15704-15707; b) E. Colacio, J. Ruiz, E. Ruiz, E. Cremades, J. Krzystek, S. Carretta, J. Cano, T. Guidi, W. Wernsdorfer, E. K. Brechin, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2013**, *52*, 9130-9134.
- [1.62] E. I. Solomon, U. M. Sundaram, T. E. Machonkin, *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 2563-2605.
- [1.63] a) I. A. Koval, P. Gamez, C. Belle, K. Selmeczi, J. Reedijk, *Chem. Soc. Rev.* **2006**, *35*, 814-840; b) Y. Thio, X. Yang, J. J. Vittal, *Dalton Trans.* **2014**, *43*, 3545-3556.
- [1.64] a) B. G. Malmstrom, *Annu. Rev. Biochem.* **1982**, *51*, 21–59; b) P. M. Colman, H. C. Freeman, J. M. Guss, M. Murata, V. A. Norris, J. A. M. Ramshaw, M. P. Venkatappa, *Nature* **1978**, *272*, 319-324; c) H. B. Gray, B. G. Malmström, R. J. P. Williams, *J. Biol. Inorg. Chem.* **2000**, *5*, 551-559; d) C. Gerdemann, C. Eicken, B. Krebs, *Acc. Chem. Res.* **2002**, *35*, 183-191; e) N. Ito, S. Phillips, C. Stevens, Z. B. Ogel, M. J. McPherson, J. N. Keen, K. D. S. Yadav, P. F. Knowles, *Nature* **1991**, *350*, 87-90; f) A. Volbeda, W. G. Hol, *J. Mol. Biol.* **1989**, *209*, 249-279.
- [1.65] a) P. E. M. Siegbahn, *J. Biol. Inorg. Chem.* **2004**, *9*, 577–590; b) E. Mijangos, J. Reedijk, L. Gasque, *Dalton Trans.* **2008**, 1857–1863; c) M. R. Mendoza-Quijano, G. Ferrer-

Sueta, M. Flores-Álamo, N. Aliaga-Alcalde, V. Gómez-Vidales, V. M. Ugalde-Saldívar, L. Gasque, *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 4985–4997.

[1.66] a) A. Biswas, L. K. Das, M. G. B. Drew, C. Diaz, A. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 10111–10121; b) C. –H. Kao, H. –H. Wei, Y. –H. Liu, G. –H. Lee, Y. Wang, C. –J. Lee, *J. Inorg. Biochem.* **2001**, *84*, 171–178; c) S. Mistri, V. Bertolasi, S. C. Manna, *Polyhedron* **2015**, *88*, 101-109; d) K. S. Banu, T. Chattopadhyay, A. Banerjee, S. Bhattacharya, E. Suresh, M. Nethaji, E. Zangrando, D. Das, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 7083-7093; e) A. Das, K. Bhattacharya, L. K. Das, S. Giri, A. Ghosh, *Dalton Trans.* **2018**, *47*, 9385-9399; f) A. Hazari, L. K. Das, R. M. Kadam, A. Bauzá, A. Frontera, A. Ghosh, *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 3862–3876; g) M. Mitra, T. Kundu, G. Kaur, G. Sharma, A. R. Choudhury, Y. Singh, R. Ghosh, *RSC Adv.* **2016**, *6*, 58831-58838; h) S. Majumder, S. Sarkar, S. Sasmal, E. C. Sañudo, S. Mohanta, *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 7540–7554.

[1.67] a) E. Meggers, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, *50*, 2442–2448; b) G. Sava, G. Jaouen, E. A. Hillard, A. Bergamo, *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 8226–8234; c) C. G. Hartinger, N. Metzler-Nolte, P. J. Dyson, *Organometallics*, **2012**, *31*, 5677–5685; d) N. P. Barry, P. J. Sadler, *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 5106–5131.

[1.68] a) V. Rajendiran, M. Murali, E. Suresh, S. Sinha, K. Somasundaram, M. Palaniandavar, *Dalton Trans.* **2008**, 148–163; b) B. Neto, A. Lapis, *Molecules*, **2009**, *14*, 1725–1746.

[1.69] J. T. Hartmann, H. -P. Lipp, *Expert Opin. Pharmacother.* **2003**, *4*, 889-901.

[1.70] a) F. Tisato, C. Marzano, M. Porchia, M. Pellei, C. Santini, *Med. Res. Rev.* **2010**, *30*, 708–749; b) F. P. Dwyer, E. Mayhew, E. M. Roe, A. Shulman, *Br. J. Cancer*, **1965**, *19*, 195–199; c) C. Santini, M. Pellei, V. Gandin, M. Porchia, F. Tisato, C. Marzano, *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 815-862; d) K. Zheng, F. Liu, X. -M. Xu, Y. -T. Li, Z. -Y. Wu, C. -W. Yan, *New J. Chem.*, **2014**, *38*, 2964-2978.

[1.71] a) L. Strekowski, B. Wilson, *Mutat. Res., Fundam. Mol. Mech. Mutagen.* **2007**, *623*, 3–13; b) M. Navarro, E. J. Cisneros-Fajardo, A. Sierralta, M. Fernández-Mestre, P. Silva, D. Arrieche, E. Marchán, *J. Biol. Inorg. Chem.* **2003**, *8*, 401–408; c) J. Jiang, X. Tang, W. Dou, H. Zhang, W. Liu, C. Wang, J. Zheng, *J. Inorg. Biochem.* **2010**, *104*, 583–591; d) W. -J. Lian, X. -T. Wang, C. -Z. Xie, H. Tian, X. -Q. Song, H. -T. Pan, X. Qiao, J. -Y. Xu, *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 9073-9087; e) K. Jeyalakshmi, Y. Arun, N. S. P. Bhuvanesh, P. T. Perumal, A. Sreekantha, R. Karvembu, *Inorg. Chem. Front.*, **2015**, *2*, 780-798.

[1.72] a) D. C. Carter, J. X. Ho, *Adv. Protein Chem.* **1994**, *45*, 153–176; b) Y. -Z. Zhang, J. Dai, X. Xiang, W. -W. Li, Y. Liu, *Mol. Biol. Rep.* **2010**, *37*, 1541–1549; c) T. M. Sielecki, J. F. Boylan, P. A. Benfield, G. L. Trainor, *J. Med. Chem.* **1999**, *43*, 1–18; d) P. K. M. Siu, D. L. Ma, C. M. Che, *Chem. Commun.* **2005**, 1025–1027; e) Y. Z. Zhang, B. Zhou, Y. X. Liu, C. X. Zhou, X. L. Ding, Y. J. Liu, *Fluoresc.* **2008**, *18*, 109-118.

[1.73] a) S. Kathiresan, S. Mugesh, M. Murugan, F. Ahamed, J. Annaraj, *RSC Adv.*, **2016**, *6*, 1810-1825; b) K. Hu, C. Liu, J. Lia, F. Liang, *Med. Chem. Commun.*, **2018**, *9*, 1663-1672.

[2.1] a) V. N. Valentin, A. P. Alexander, V. N. Yulia, M. -E. Boulon, A. V. Oleg, Z. V. Yan, E. P. W. Richard, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9792-9795; b) R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Caneschi and M. A. Novak, *Nature* **1993**, *365*, 141-143; c) D. Gatteschi, R. Sessoli, J. Villain, *Molecular Nanomagnets; Oxford University Press, Oxford*, **2006**.

[2.2] M. Mannini, F. Pineider, P. Sainctavit, C. Danieli, E. Otero, C. Sciancalepore, A. M. Talarico, M. -A. Arrio, A. Cornia, D. Gatteschi, *Nat. Mater.* **2009**, *8*, 194-197.

[2.3] a) R. E. P. Winpenny, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 7992–7994; *Angew. Chem.* **2008**, *120*, 8112-8114; b) J. M. Clemente-Juan, E. Coronado, A. Gaita-Ariño, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 7464–7478; c) G. Aromi, D. Aguilà, P. Gamez, F. Luis, O. Roubeau, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 537–546.

[2.4] a) L. Bogani, W. Wernsdorfer, *Nat. Mater.* **2008**, *7*, 179–186; b) B. Pang, L. Zhang, Y. B. Chen, J. Zhou, S. Yao, S. Zhang, Y. Chen, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, *9*, 3201–3207; c) P. -C. Wu, P. -F. Chen, T. H. Do, Y. -H. Hsieh, C. -H. Ma, T. D. Ha, K. -H. Wu, Y. -J. Wang, H. -B. Li, Y. -C. Chen, J. -Y. Juang, P. Yu, L. M. Eng, C. -F. Chang, P. -W. Chiu, L. H. Tjeng, Y. -H. Chu, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2016**, *8*, 33794–33801; d) M. Saloaro, M. Hoffmann, W. A. Adeagbo, S. Granroth, H. Deniz, H. Palonen, H. Huhtinen, S. Majumdar, P. Laukkanen, W. Hergert, A. Ernst, P. Paturi, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2016**, *8*, 20440–20447; e) A. Saraiva-Souza, M. Smeu, L. Zhang, A. G. S. Filho, H. Guo, M. A. Ratner, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 15065–15071.

[2.5] a) G. Karotsis, S. Kennedy, S. J. Teat, C. M. Beavers, D. A. Fowler, J. J. Morales, M. Evangelisti, S. J. Dalgarno, E. K. Brechin, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 12983–12990; b) J. -B. Peng, Q. -C. Zhang, X. -J. Kong, Y. -Z. Zheng, Y. -P. Ren, L. -S. Long, R. -B. Huang, L. -S. Zheng, Z. Zheng, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 3314–3417; c) Y. -Y. Zhu, Y. -Q. Zhang, T. -T. Yin, C. Gao, B. -W. Wang, S. Gao, *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 5475–5486; d) S. -J. Liu, J. -P. Zhao, J. Tao, J. -M. Jia, S. -D. Han, Y. Li, Y. -C. Chen, X. -H. Bu, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 9163–9165; J. A. Sheikh, A. Clearfield, *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 2843–2848; e) A. K. Mondal, H. Jena, A. Malviya, S. Konar, *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 5237–5244; f) S. Biswas, A. K. Mondal, S. Konar, *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 2085–2090.

[2.6] R. Herchel, L. Váhovská, I. Potočnák, Z. Trávníček, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 5896–5898.

[2.7] a) D. E. Freedman, W. H. Harman, T. D. Harris, G. J. Long, C. J. Chang, J. R. Long, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 1224–1225; b) W. H. Harman, T. D. Harris, D. E. Freedman, H. Fong, A. Chang, J. D. Rinehart, A. Ozarowski, M. T. Sougrati, F. Grandjean, G. J. Long, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 18115–18126; c) G. A. Craig, M. Murrie, *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 2135–2147.

- [2.8] a) R. Sessoli, A. K. Powell, *Coord. Chem. Rev.* **2009**, 253, 2328–2341; b) N. Ishikawa, M. Sugita, T. Ishikawa, S. -y. Koshihara, Y. Kaizu, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, 125, 8694–8695.
- [2.9] K. R. Meihaus, J. R. Long, *Dalton Trans.* **2015**, 44, 2517–2528.
- [2.10] a) P. Zhang, Y. -N. Guo, J. Tang, *Coord. Chem. Rev.* **2013**, 257, 1728–1763; b) P. Zhang, L. Zhang, C. Wang, S. Xue, S. -Y. Lin, J. Tang, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 4484–4487; c) Y. -N. Guo, L. Ungur, G. E. Granroth, A. K. Powell, C. Wu, S. E. Nagler, J. Tang, L. F. Chibotaru, D. Cui, *Sci. Rep.* **2014**, 4, 5471.
- [2.11] a) T. Jurca, A. Farghal, P. -H. Lin, I. Korobkov, M. Murugesu, D. S. Richeson, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 15814–15817; b) J. M. Zadrozny, J. R. Long, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 20732–20734; c) J. Vallejo, I. Castro, R. Ruiz-García, J. Cano, M. Julve, F. Lloret, G. De Munno, W. Wernsdorfer, E. Pardo, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 15704–15707; d) F. Habib, O. R. Luca, V. Vieru, M. Shiddiq, I. Korobkov, S. I. Gorelsky, M. K. Takase, L. F. Chibotaru, S. Hill, R. H. Crabtree, M. Murugesu, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, 52, 11290–11293; *Angew. Chem.* **2013**, 125, 11500; (e) S. Gómez-Coca, E. Cremades, N. Aliaga-Alcalde, E. Ruiz, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 7010–7018; f) Y. -Y. Zhu, C. Cui, Y. -Q. Zhang, J. -H. Jia, X. Guo, C. Gao, K. Qian, S. -D. Jiang, B. -W. Wang, Z. -M. Wang, S. Gao, *Chem. Sci.* **2013**, 4, 1802–1806; g) E. Colacio, J. Ruiz, E. Ruiz, E. Cremades, J. Krzystek, S. Carretta, J. Cano, T. Guidi, W. Wernsdorfer, E. K. Brechin, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, 52, 9130–9134; *Angew. Chem.* **2013**, 125, 9300; h) W. Huang, T. Liu, D. Wu, J. Cheng, Z. W. Ouyang, C. Duan, *Dalton Trans.* **2013**, 42, 15326–15331; (i) R. Boča, J. Miklovič, J. Titiš, *Inorg. Chem.* **2014**, 53, 2367–2369; j) S. Gómez-Coca, A. Urtizberea, E. Cremades, P. J. Alonso, A. Camón, E. Ruiz, F. Luis, *Nat. Commun.* **2014**, 5:4300.
- [2.12] a) J. Vallejo, A. Pascual-Álvarez, J. Cano, I. Castro, M. Julve, F. Lloret, J. Krzystek, G. De Munno, D. Armentano, W. Wernsdorfer, R. Ruiz-García, E. Pardo, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, 52, 14075–14079; *Angew. Chem.* **2013**, 125, 14325; b) R. Ishikawa, R. Miyamoto,

- H. Nojiri, B. K. Breedlove, M. Yamashita, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 8300–8302; c) A. Grigoropoulos, M. Pissas, P. Papatolis, V. Pscharis, P. Kyritsis, Y. Sanakis, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 12869–12871.
- [2.13] R. C. Poulten, M. J. Page, A. G. Algarra, J. J. Le Roy, I. López, A. Llobet, S. A. Macgregor, M. F. Mahon, D. M. Murphy, M. Murugesu, M. K. Whittlesey, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 13640–13643.
- [2.14] a) P. -H. Lin, N. C. Smythe, S. J. Gorelsky, S. Maguire, N. J. Henson, I. Korobkov, B. L. Scott, J. C. Gordon, R. T. Baker, M. Murugesu, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 15806–15809; (b) D. Weismann, Y. Sun, Y. Lan, G. Wolmershäuser, A. K. Powell, H. Sitzmann, *Chem. Eur. J.* **2011**, *17*, 4700–4704; c) J. M. Zadrozny, M. Atanasov, A. M. Bryan, C. -Y. Lin, B. D. Rekken, P. P. Power, F. Neese, J. R. Long, *Chem. Sci.* **2013**, *4*, 125–138.
- [2.15] S. Mossin, B. L. Tran, D. Adhikari, M. Pink, F. W. Heinemann, J. -P. Sutter, R. K. Szilagyi, K. Meyer, D. J. Mindiola, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 13651–13661.
- [2.16] N. Nedelko, A. Kornowicz, I. Justyniak, P. Aleshkevych, D. Prochowicz, P. Krupiński, O. Dorosh, Ś. -W. Anna, J. Lewiński, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 12870–12876.
- [2.17] V. Chandrasekhar, A. Dey, A. J. Mota, E. Colacio, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 4554–4561.
- [2.18] J. M. Zadrozny, J. Liu, N. A. Piro, C. J. Chang, S. Hill, J. R. Long, *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 3897–4020.
- [2.19] D. D. Perrin, W. L. F. Armarego, D. R. Perrin, Purification of Laboratory Chemicals, Pergamon Press, Oxford, U.K., **1980**.
- [2.20] *CrysAlis PRO Version 1.171.36.24*, Agilent Technologies, Yarnton, **2012**.
- [2.21] O. V. Dolomanov, L. J. Bourhis, R. J. Gildea, J. A. K. Howard, H. Puschmann, *J. Appl. Crystallogr.* **2009**, *42*, 339–341.
- [2.22] G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr.* **2008**, *A64*, 112–122.

- [2.23] F. Neese, *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.* **2012**, *2*, 73-78.
- [2.24] a) A. Schäfer, H. Horn, R. Ahlrichs, *J. Chem. Phys.* **1992**, *97*, 2571-2577; b) A. Schäfer, C. Huber, R. Ahlrichs, *J. Chem. Phys.* **1994**, *100*, 5829-5835.
- [2.25] a) K. Eichkorn, O. Treutler, H. Ohm, M. Haser, R. Ahlrichs, *Chem. Phys. Lett.* **1995**, *240*, 283-289; b) K. Eichkorn, O. Treutler, H. Ohm, M. Haser, R. Ahlrichs, *Chem. Phys. Lett.* **1995**, *242*, 652-660; c) K. Eichkorn, F. Weigend, O. Treutler, H. Ohm, R. Ahlrichs, *Theor. Chem. Acc.* **1997**, *97*, 19.
- [2.26] S. Vancoillie, J. Chalupský, U. Ryde, E. I. Solomon, K. Pierloot, F. Neese, L. Rulíšek, *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114*, 7692-7702.
- [2.27] a) H. Ke, L. Zhao, Y. Guo, J. Tang, *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 9760-9765; b) T. R. Barman, M. Sutradhar, M. G. B. Drew, E. Rentschler, *Polyhedron* **2013**, *51*, 192-200; (c) S. - Y. Zhang, B. Xu, L. Zheng, W. Chen, Y. Li, W. Li, *Inorg. Chim. Acta* **2011**, *367*, 44-50.
- [2.28] A. L. Spek, *J. Appl. Crystallogr.* **2003**, *36*, 7-13.
- [2.29] a) J. M. Frost, K. L. M. Harriman, M. Murugesu, *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 2470–2491; b) S. Gómez-Coca, D. Aravena, R. Morales, E. Ruiz, *Coord. Chem. Rev.* **2015**, *289–290*, 379–392.
- [2.30] M. Llunell, D. Casanova, J. Cirera, P. Alemany, S. Alvarez, *SHAPE (2.1)*, Universitat de Barcelona, **2013**.
- [2.31] J. Vallejo, E. Pardo, M. Vicianco-Chumillas, I. Castro, P. Amoros del Torro, M. Déniz, C. Ruiz-Perez, C. Yuste, J. Krzystek, M. Julve, F. Lloret, J. Cano, *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 3694–3702.
- [2.32] R. H. Cole, K. S. Cole, *J. Chem. Soc.* **1941**, *9*, 341.
- [2.33] J. A. Mydosh, *Spin Glasses: An Experimental Introduction*, Taylor & Francis, London, **1993**.
- [2.34] a) J. Martínez-Lillo, T. F. Mastropietro, E. Lhotel, C. Paulsen, J. Cano, G. D. Munno, J. Faus, F. Lloret, M. Julve, S. Nellutla, J. Krzystek, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 13737–

13748; b) C. H. Woodall, G. A. Craig, A. Prescimone, M. Misek, J. Cano, J. Faus, M. R. Probert, S. Parsons, S. Moggach, J. Martinez-Lillo, M. Murrie, K. V. Kamenev, E. K. Brechin, *Nat. Commun.* **2016**, *7*, 13870.

[2.35] (a) L. F. Chibotaru, L. Ungur, C. Aronica, H. Elmoll, G. Pilet, D. Luneau, *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, *130*, 12445–12455; (b) N. E. Brese, M. O’Keeffe, *Acta Crystallogr.* **1991**, *B47*, 192–197; (c) I. D. Brown, D. Altermatt, *Acta Cryst.* **1985**, *B41*, 244–247.

[3.1] a) D. Gatteschi, R. Sessoli, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 268–297; b) R. E. P. Winpenny, *Adv. Inorg. Chem.* **2001**, *52*, 1–111; c) L. Tjioe, A. Meininger, T. Joshi, L. Spiccia, B. Graham, *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 4327–4339; d) V. N. Valentin, A. P. Alexander, V. N. Yulia, M. -E. Boulon, A. V. Oleg, Z. V. Yan, R. E. P. Winpenny, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9792–9795; e) S. C. Manna, E. Zangrand, J. Ribas, N. Ray Chaudhuri, *Dalton Trans.* **2007**, 1383–1391; f) A. Bhunia, S. Manna, S. Mistri, A. Paul, R. Manne, M. K. Santra, V. Bertolasic, S. C. Manna, *RSC Adv.* **2015**, *5*, 67727–67737; g) A. Paul, S. Mistri, A. Bhunia, S. Manna, H. Puschmann, S. C. Manna, *RSC Adv.* **2016**, *6*, 60487–60501; h) S. Mistri, E. Zangrand, A. Figuerola, A. Adhikary, S. Konar, J. Cano, S. C. Manna, *Cryst. Growth Des.* **2014**, *14*, 3276–3285.

[3.2] a) C. -B. Tian, H. -B. Zhang, Y. Peng, Y. -E. Xie, P. Lin, Z. -H. Li, S. -W. Du, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2012**, 4029–4035; b) T. Nakajima, K. Seto, A. Scheurer, B. Kure, T. Kajiwara, T. Tanase, M. Mikuriya, H. Sakiyama, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, 5021–5033.

[3.3] a) A. M. Kirillov, M. V. Kirillova, A. J. L. Pombeiro, *Coord. Chem. Rev.* **2012**, 256, 2741–2759; b) S. E. Allen, R. R. Walvoord, R. Padilla-Salinas, M. C. Kozlowski, *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 6234–6458; c) A. M. Kirillov, M. N. Kopylovich, M. V. Kirillova, M. Haukka, M. F. C. Guedes da Silva, A. J. L. Pombeiro, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2005**, *44*, 4345–4349.

[3.4] R. Than, A. A. Feldmann, B. Krebs, *Coord. Chem. Rev.* **1999**, *182*, 211–241.

[3.5] a) D. L. Reger, A. E. Pascui, M. D. Smith, J. Jezierska, A. Ozarowski, *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 7966–7968; b) N. Chopin, G. Chastanet, B. Le Guennic, M. Médebielle, G. Pilet, Eur. J. *Inorg. Chem.* **2012**, 5058–5070; c) C. Aronica, Y. Chumakov, E. Jeanneau, D. Luneau, P. Neugebauer, A. -L. Barra, B. Gillon, A. Goujon, A. Cousson, J. Tercero, E. Ruiz, *Chem. -Eur. J.* **2008**, *14*, 9540–9548; d) B. Sarkar, M. Sinha Ray, Y. -Z. Li, Y. Song, A. Figuerola, E. Ruiz, J. Cirera, J. Cano, A. Ghosh, *Chem. -Eur. J.* **2007**, *13*, 9297–9309; e) A. Mukherjee, R. Raghunathan, M. K. Saha, M. Nethaji, S. Ramasesha, A. R. Chakravarty, *Chem. -Eur. J.* **2005**, *11*, 3087–3096.

[3.6] a) J. Tang, J. Sánchez Costa, A. Pevec, B. Kozlevčar, C. Massera, O. Roubeau, I. Mutikainen, U. Turpeinen, P. Gamez, J. Reedijk, *Cryst. Growth Des.* **2008**, *8*, 1005–1012; b) A. Karmakar, C. L. Oliver, S. Roy, L. Öhrström, *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 10156–10165.

[3.7] S. S. P. Dias, M. V. Kirillova, V. André, J. Klak, A. M. Kirillov, *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 5204–5212.

[3.8] Y. Song, C. Massera, O. Roubeau, P. Gamez, A. Maria, M. Lanfredi, J. Reedijk, *Inorg. Chem.* **2004**, *43*, 6842–6847.

[3.9] a) N. Lah, I. Leban, R. Clérac, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2006**, 4888–4894; b) H. Liu, H. Wang, H. Wu, D. Niu, *J. Coord. Chem.* **2005**, *58*, 1345–1349.

[3.10] R. Mergehenn, W. Haase, *Acta Crystallogr., Sect. B* **1977**, *33*, 1877–1882.

[3.11] C. J. Calzado, *Chem. Eur. J.* **2013**, *19*, 1254–1261.

[3.12] a) E. Ruiz, S. Alvarez, A. Rodríguez-Forteá, P. Alemany, Y. Pouillon, C. Massobrio, J. S. Miller, M. Drillon Eds., *Electronic Structure and Magnetic Behavior in Polynuclear Transition-Metal Compounds*, vol. 2, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2001**; b) E. Ruiz, A. Rodríguez-Forteá, P. Alemany, S. Alvarez, *Polyhedron* **2001**, *20*, 1323–1327.

[3.13] D. D. Perrin, W. L. F. Armarego, D. R. Perrin, *Purification of Laboratory Chemicals*; Pergamon Press: Oxford, U.K., **1980**.

- [3.14] (a) Bruker, SMART, SAINT. Software Reference Manual Bruker AXS Inc. Madison, Wisconsin, USA, **2000**; (b) G. M. Sheldrick, *Acta. Crystallogr. Sect A.*, 2008, **64**, 112-122; c) Cameron - A Molecular Graphics Package. D. M. Watkin, L. Pearce, C. K. Prout, Chemical Crystallography Laboratory, University of Oxford, **1993**; (d) K. Brandenburg, (**1999**). DIAMOND. Crystal Impact GbR, Bonn, Germany.
- [3.15] A. W. Addison, T. N. Rao, J. Reedijk, J. Van Rijn, G. C. Verschoor, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1984**, 1349–1356.
- [3.16] J. Tercero, E. Ruiz, S. Alvarez, A. Rodríguez-Forteá, P. Alemany, *J. Mater. Chem.* **2006**, *16*, 2729–2735.
- [3.17] F. H. Allen, *Acta Crystallogr. Sect. B* **2002**, *58*, 380–388.
- [3.18] E. Gungor, H. Kara, E. Colacio, A. J. Mota, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, 1552–1560.
- [3.19] J. -F. Dong, L. -Z. Li, H. -Y. Xu, D. -Q. Wang, *Acta Crystallogr., Sect. E* **2007**, *63*, m2300.
- [3.20] S. Jammi, T. Punniyamurthy, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 2508–2511.
- [3.21] P. Bhowmik, N. Aliaga-Alcalde, V. Gomez, M. Corbella, S. Chattopadhyay, *Polyhedron* **2013**, *49*, 269–276.
- [3.22] W. -H. Gu, X. -Y. Chen, L. -H. Yin, A. Yu, X. -Q. Fu, P. Cheng, *Inorg. Chim. Acta.* **2004**, *357*, 4085–4090.
- [3.23] X. F. Yan, J. Pan, S. R. Li, H. Zhou, Z. Q. Pan, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2009**, *635*, 1481–1484.
- [3.24] S. Shit, G. Rosair, S. Mitra, *J. Mol. Struct.* **2011**, *991*, 79–83.
- [3.25] M. Nihei, A. Yoshida, S. Koizumi, H. Oshio, *Polyhedron* **2007**, *26*, 1997–2007.
- [3.26] M. Dey, C. P. Rao, P. K. Saarenketo, K. Rissanen, *Inorg. Chem. Commun.* **2002**, *5*, 380–383.

- [3.27] S. Thakurta, P. Roy, R. J. Butcher, M. S. ElFallah, J. Tercero, E. Garribba, S. Mitra, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 4385–4395.
- [3.28] H. Oshio, Y. Saito, T. Ito, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1997**, 36, 2673–2675.
- [3.29] H. Xiang, H. -Y. Li, X. -D. Zheng, L. Jiang, Y. Li, *Chin. J. Inorg. Chem.* **2012**, 28, 1763–1768.
- [3.30] L. -X. Xie, M. -L. Wei, Q. -Z. Sun, C. -Y. Duan, *Chin. J. Inorg. Chem.* **2007**, 23, 484–488.
- [3.31] H. Xiang, Y. Lan, L. Jiang, W. -X. Zhang, C. E. Anson, T. -B. Lu, A. K. Powell, *Inorg. Chem. Commun.* **2012**, 16, 51–54.
- [3.32] Y. M. Chumakov, V. N. Biyushkin, T. I. Malinovskii, S. Kulemu, V. I. Tsapkov, M. S. Popov, N. M. Samus, *Koord. Khim.* **1990**, 16, 945–949.
- [3.33] J. -F. Dong, L. -Z. Li, T. Xu, H. Cui, D. -Q. Wang, *Acta Crystallogr., Sect. E* **2007**, 63, m1501-m1502.
- [3.34] Y. Xie, J. Ni, F. Zheng, Y. Cui, Q. Wang, S. W. Ng, W. Zhu, *Cryst. Growth Des.* **2009**, 9, 118–126.
- [3.35] S. -F. Si, J. -K. Tang, D. -Z. Liao, Z. -H. Jiang, S. -P. Yan, *Inorg. Chem. Commun.* **2002**, 5, 76–77.
- [3.36] A. B. Canaj, D. I. Tzimopoulos, A. Philippidis, G. E. Kostakis, C. J. Milius, *Inorg. Chem.* **2012**, 51, 10461–10470.
- [3.37] N. F. Chilton, R. P. Anderson, L. D. Turner, A. Soncini, K. S. Murray, *J. Comput. Chem.* **2013**, 34, 1164–1175.
- [3.38] R. Papadakis, E. Rivière, M. Giorgi, H. Jamet, P. Rousselot-Pailley, M. Réglier, A. J. Simaan, T. Tron, *Inorg. Chem.* **2013**, 52, 5824–5830.
- [3.39] H. Astheimer, F. Nepveu, L. Walz, W. Haase, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1985**, 315–320.

- [3.40] E. Ruiz, P. Alemany, S. Alvarez, J. Cano, *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 1297–1303.
- [3.41] E. A. Buvaylo, V. N. Kokozay, O. Y. Vassilyeva, B. W. Skelton, J. Jeziorska, L. C. Brunel, A. Ozarowski, *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 206–216.
- [4.1] a) O. Kahn, *Molecular Magnetism*, VCH, New York, **1993**; b) O. Kahn, *Acc. Chem. Res.* **2000**, *33*, 647–657; c) E. Coronado, P. Day, *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 5419–5448; d) S. C. Manna, S. Konar, E. Zangrandino, M. G. B. Drew, J. Ribas, N. Ray Chaudhuri, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 1751–1758; e) S. C. Manna, J. Ribas, E. Zangrandino, N. Ray Chaudhuri, *Inorg. Chim. Acta* **2007**, *360*, 2589–2597; f) S. C. Manna, J. Ribas, E. Zangrandino, N. Ray Chaudhuri, *Polyhedron* **2007**, *26*, 4923–4928; g) A. Paul, A. Figuerola, V. Bertolas, S. C. Manna, *Polyhedron* **2016**, *119*, 460–470.
- [4.2] a) R. Huber, *Angew. Chem.* **1989**, *101*, 849–871; *Angew. Chem., Int. Ed.* **1989**, *28*, 848–869; b) E. I. Solomon, U. M. Sundaram, T. E. Machonkin, *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 2563–2606; c) P. Gamez, P. G. Aubel, W. L. Driessens, J. Reedijk, *Chem. Soc. Rev.* **2001**, *30*, 376–385; d) E. I. Solomon, R. K. Szilagyi, S. G. DeBeer, L. Basumallick, *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 419–458; e) G. Henkel, B. Krebs, *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 801–824.
- [4.3] a) R. Wegner, M. Gottschaldt, H. Görts, E. -G. Jäger, D. Klemm, *Chem. -Eur. J.* **2001**, *7*, 2143–2157; b) M. M. Díaz-Requejo, P. J. Pérez, *Chem. Rev.* **2008**, *108*, 3379–3394; c) A. M. Kirillov, M. V. Kirillova, A. J. L. Pombeiro, *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 2741–2759.
- [4.4] a) J. A. Bertrand, E. Fujita, D. G. VanDerveer, *Inorg. Chem.* **1980**, *19*, 2022–2028; b) G. Nieuwpoort, G. C. Verschoor, J. Reedijk, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1983**, 531–538; c) V. Tudor, G. Marin, V. Kavtsov, Y. A. Simonov, M. Julve, F. Lloret, M. Andruh, *Rev. Roum. Chim.* **2006**, *51*, 367–371.
- [4.5] a) M. Mikuriya, Y. Nishida, S. Kida, T. Uechi, I. Ueda, *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.* **1977**, *33*, 538–540; b) L. Banci, A. Bencini, P. Dapporto, A. Dei, D. Gatteschi, *Inorg. Chem.* **1980**, *19*, 3395–3399; c) J. C. Zheng, R. J. Rousseau, S.

Wang, *Inorg. Chem.* **1992**, *31*, 106-110; d) J. Pinkas, J. C. Huffman, J. C. Bollinger, W. E. Streib, D. V. Baxter, M. H. Chisholm, K. G. Caulton, *Inorg. Chem.* **1997**, *36*, 2930-2937; e) C. Jocher, T. Pape, W. W. Seidel, P. Gamez, J. Reedijk, F. E. Hahn, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 4914-4923.

[4.6] a) G. Ferguson, C. R. Langrick, D. Parker, K. E. Matthes, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1985**, 1609-1610; b) R. Sillanpa, K. Rissanen, *Acta Chem. Scand.* **1990**, *44*, 1013-1017; c) R. Sillanpa, J. Valkonen, *Acta Chem. Scand.* **1992**, *46*, 1072-1075; d) S. Myllyviita, R. Sillanpa, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1994**, 2125-2128; e) E. A. Vinogradova, O. Y. Vassilyeva, V. N. Kokozay, B. W. Skelton, J. K. Bjernemose, P. R. Raithby, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **2002**, 4248-4252.

[4.7] a) K. Smolander, *Acta Chem. Scand.* **1982**, *A36*, 189-194; b) L. Schwabe, W. Haase, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1985**, 1909-1913; c) X. S. Tan, Y. Fujii, R. Nukada, M. Mikuriya, Y. Nakano, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1999**, 2415-2416; d) R. W. Saalfrank, I. Bernt, F. Hampel, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2001**, *40*, 1700-1703; *Angew. Chem.* **2001**, *113*, 1745–1748; e) A. M. Kirillov, M. N. Kopylovich, M. V. Kirillova, M. Haukka, M. F. C. Guedes da Silva, A. J. L. Pombeiro, *Angew. Chem.* **2005**, *117*, 4419–4423; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *44*, 4345–4349; f) M. Hamid, A. A. Tahir, M. Mazhar, M. Zeller, K. C. Molloy, A. D. Hunter, *Inorg. Chem.* **2006**, *45*, 10457-10466; g) J. Sletten, A. Sørensen, M. Julve, Y. Journaux, *Inorg. Chem.* **1990**, *29*, 5054-5058.

[4.8] a) M. Ahlgren, U. Turpeinen, K. Smolander, *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.* **1980**, *36*, 1091-1095; b) K. Smolander, *Acta Chem. Scand.* **1983**, *A37*, 5; c) H. Muonen, W. E. Hatfield, J. H. Helms, *Inorg. Chem.* **1986**, *25*, 800-805.

[4.9] a) M. Sutradhar, G. Mukherjee, M. G. B. Drew, S. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2007**, *46*, 5069-5075; b) M. Sutradhar, L. M. Carrella, E. Rentschler, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2012**, 4273-4278; c) T. Roy Barman, M. Sutradhar, M. G. B. Drew, E. Rentschler, *Polyhedron*, **2013**, *51*, 192-

200; d) M. Sutradhar, T. Roy Barman, J. Klanke, M. G. B. Drew, E. Rentschler, *Polyhedron*, **2013**, *53*, 48-55.

[4.10] a) S. Triki, J. S. Pala, M. Decoster, P. Molinié, L. Toupet, *Angew. Chem.* **1999**, *111*, 155–158; *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, *38*, 113–115; b) W. Plass, A. Pohlmann, J. Rautengarten, *Angew. Chem.* **2001**, *113*, 4333–4336; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 4207–4210; c) S. Mukherjee, B. Gole, Y. Song, P. S. Mukherjee, *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 3621–3631; d) S. Turba, S. P. Foxon, A. Beitat, F. W. Heinemann, K. Petukhov, P. Müller, O. Walter, F. Lloret, M. Julve, S. Schindler, *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 88–97; e) C. Adhikarya, S. Koner, *Coord. Chem. Rev.* **2010**, *254*, 2933–2958; f) D. Venegas-Yazigia, D. Aravenab, E. Spodineb, E. Ruizd, S. Alvarezd, *Coord. Chem. Rev.* **2010**, *254*, 2086–2095.

[4.11] R. Mergehenn, L. Merz, W. Haase, *ActaCrystallogr.B* **1976**, *32*, 505–510.

[4.12] W. Haase, *J. Mol. Catal.* **1984**, *23*, 331–340.

[4.13] R. Mergehenn, L. Merz, W. Haase, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1980**, 1703–1709.

[4.14] E. Ruiz, A. Rodriguez-Forteá, P. Alemany, S. Alvarez, *Polyhedron* **2001**, *20*, 1323–1327.

[4.15] D. D. Perrin, W. L. F. Armarego, D. R. Perrin, *Purification of Laboratory Chemicals*, Pergamon Press, Oxford, U.K., **1980**.

[4.16] J. R. Lakowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, Springer, New York, USA, 3rd Ed, **2006**.

[4.17] L. H. Lewis, K. M. Bussmann, *Rev. Sci. Instrum.* **1996**, *67*, 3537–3542.

[4.18] a) *Agilent Technologies*, XRD Products 10 Mead Road, Yarnton, Oxfordshire. OX5 1QU, UK; b) G. M. Sheldrick, *ActaCryst.* **2008**, *A64*, 112–122; c) L. J. Farrugia, *J ApplCryst.* **2012**, *45*, 849–854; d) K. Brandenburg, (1999). *DIAMOND*. Crystal Impact GbR, Bonn, Germany. Version 3.2i., **1999**.

[4.19] N. Hoshino, A. M. Ako, A. K. Powell, H. Oshio, *Inorg. Chem.* **2009**, *48*, 3396–3407.

- [4.20] P. -P. Yang, X. -L. Wang, L. -C. Li, D. -Z. Liao, *Dalton Trans.* **2011**, *40*, 4155-4161.
- [4.21] S. Hazra, R. Koner, P. Lemoine, E. C. Sanudo, S. Mohanta, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 3458-3466.
- [4.22] K. Nakamoto, *Infrared Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, John Wiley & Sons, New York, **1997**.
- [4.23] a) S. S. P. Dias, M. V. Kirillova, V. Andre, J. Klak, A. M. Kirillov, *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 5204-5212; b) A. Paul, V. Bertolasi, A. Figuerola, S. C. Manna, *J. Sol. State Chem.* **2017**, *249*, 29-38; c) S. C. Manna, S. Manna, A. Paul, E. Zangrando, A. Figuerola, S. Dolai, K. Das, *ChemistrySelect* **2017**, *2*, 3317-3322.
- [4.24] R. Feyerherm, S. Abens, D. Gunther, T. Ishida, M. Meiner, M. Menschke, T. Nogami, M. Steiner, *J. Phys.: Condens. Matter* **2004**, *12*, 8495-8509.
- [4.25] a) P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **1950**, *79*, 350-356; b) J. B. Goodenough, *Phys. Rev.* **1955**, *100*, 564-573; c) J. B. Goodenough, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **1958**, *6*, 287-297; d) J. Kanamori, *J. Phys. Chem. Solids* **1959**, *10*, 87-98.
- [4.26] C. Calzado, *Chem. Eur. J.* **2013**, *19*, 1254-1261.
- [4.27] J. T. Haraldsen, T. Barnes, J. L. Musfeldt, *Phys. Rev. B* **2005**, *71*, 064403.
- [4.28] a) V. T. Kasumov, F. Köksal, *Spectrochimica Acta Part A*, **2005**, *61*, 225-231; b) S. Mistri, A. Patra, M. K. Santra, D. Paul, E. Zangrando, H. Puschmann, S. C. Manna, *ChemistrySelect* **2018**, *3*, 9102–9112.
- [5.1] a) T. Shiga, K. Maruyama, G. N. Newton, R. Inglis, E. K. Brechin, H. Oshio, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 4272-4274; b) S. C. Manna, S. Konar, E. Zangrando, M. G. B. Drew, J. Ribas, N. Ray Chaudhuri, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 1751-1758; c) B. Sarkar, S. Konar, C. J.

- Gómez-García, A. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 11611-11619; d) P. Mukherjee, M. G. B. Drew, M. Estrader, A. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 7784-7791.
- [5.2] a) M. Eddaoudi, H. Li, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 1391-1397; b) R. Tagore, R. H. Crabtree, G. W. Brudvig, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 1815-1823; c) J. S. Fossey, R. Matsubara, H. Kiyohara, S. Kobayashi, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 781-783.
- [5.3] a) T. Riis-Johannessen, K. Schenk, K. Severin, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 9546-9553; b) L. E. McQuade, S. J. Lippard, *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 7464-7471.
- [5.4] a) P. J. Sadler, *Platinum Metals Rev.* **2008**, *52*, 21-22; b) K. H. Thompson, C. Orvig, *Dalton Trans.* **2006**, 761-764; c) C. J. Jones, J. R. Thornback, *Medicinal Applications of Coordination Chemistry*, RSC Publishing, Cambridge, **2007**.
- [5.5] a) M. S. Islas, J. J. M. Medina, L. L. LópezTévez, T. Rojo, L. Lezama, M. G. Merino, L. Calleros, M. A. Cortes, M. R. Puyol, G. A. Echeverría, O. E. Piro, E. G. Ferrer, P. A. M. Williams, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 5724-5737; b) A. Valent, M. Melník, D. Hudecová, B. Dudová, R. Kivekäs, M. R. Sundberg, *Inorg. Chim. Acta* **2002**, *340*, 15-20.
- [5.6] N. Raman, J. Joseph, A. S. Kumara Velan, C. Pothiraj, *Mycobiology* **2006**, *34*, 214-218.
- [5.7] J. Vančo, J. Marek, Z. Trávníček, E. Račanská, J. Muselík, O. Švajlenová, *J. Inorg. Biochem.* **2008**, *102*, 595-605.
- [5.8] a) C. Marzano, M. Pellei, F. Tisato, C. Santini, *Anticancer Agents Med. Chem.* **2009**, *9*, 185-211; b) X. Zhong, J. Yi, J. Sun, H. -L. Wei, W. -S. Liu, K. -B. Yu, *Eur. J. Med. Chem.* **2006**, *41*, 1090-1092.
- [5.9] J. T. Hartmann, H. -P. Lipp, *Expert Opin. Pharmacother.* **2003**, *4*, 889-901.
- [5.10] J. Sletten, A. Soerensen, M. Julve, Y. Journaux, *Inorg. Chem.* **1990**, *29*, 5054-5058.
- [5.11] Z. Xu, L. K. Thompson, D. O. Miller, *Chem. Commun.* **2001**, 1170-1171.
- [5.12] R. Acevedo-Chavez, M. E. Costas, S. Bernes, G. Medina, L. Gasque, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **2002**, 2553-2558.

- [5.13] B. Graham, M. T. W. Hearn, P. C. Junk, C. M. Kepert, F. E. Mabbs, B. Moubaraki, K. S. Murray, L. Spiccia, *Inorg. Chem.* **2001**, *40*, 1536-1543.
- [5.14] a) I. A. Koval, P. Gamez, C. Belle, K. Selmeczi, J. Reedijk, *Chem. Soc. Rev.* **2006**, *35*, 814-840; b) E. I. Solomon, U. M. Sundaram, T. E. Machonkiu, *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 2563-2606; c) C. Gerdemann, C. Eicken, B. Krebs, *Acc. Chem. Res.* **2002**, *35*, 183-191; d) L. K. Das, A. Biswas, J. S. Kinyon, N. S. Dalal, H. Zhou, A. Ghosh, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 11744-11757.
- [5.15] a) C. Liu, S. Yu, D. Li, Z. Liao, X. Sun, H. Xu, *Inorg. Chem.* **2002**, *41*, 913-922; b) C. Liu, L. Wang, *Dalton Trans.* **2009**, 227-239.
- [5.16] a) S. Mistri, V. Bertolasi, S. C. Manna, *Polyhedron* **2015**, *88*, 101-109; b) S. Mistri, A. Paul, A. Bhunia, R. K. Manne, M. K. Santra, H. Puschmann, S. C. Manna, *Polyhedron* **2016**, *104*, 63-72; c) M. R. Mendoza-Quijano, G. Ferrer-Sueta, M. Flores-Álamo, N. Aliaga-Alcalde, V. Gómez-Vidales, V. M. Ugalde-Saldívara, L. Gasque, *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 4985-4997; d) A. Neves, L. M. Rossi, A. J. Bortoluzzi, B. Szpoganicz, C. Wiezbicki, E. Schwingel, *Inorg. Chem.* **2002**, *41*, 1788-1794; e) K. S. Banu, T. Chattopadhyay, A. Banerjee, S. Bhattacharya, E. Suresh, M. Nethaji, E. Zangrando, D. Das, *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 7083-7093.
- [5.17] M. Mitra, T. Kundu, G. Kaur, G. Sharma, A. R. Choudhury, Y. Singh, R. Ghosh, *RSC Adv.* **2016**, *6*, 58831-58838.
- [5.18] D. D. Perrin, W. L. F. Armarego, D. R. Perrin, *Purification of Laboratory Chemicals, Pergamon Press, Oxford, U.K.*, **1980**.
- [5.19] J. R. Lakowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy, third ed., Springer, New York, USA*, **2006**.
- [5.20] a) S. C. Manna, S. Manna, A. Paul, E. Zangrando, A. Figuerola, S. Dolai, K. Das, *ChemistrySelect* **2017**, *2*, 3317-3322; b) A. Paul, V. Bertolasi, A. Figuerola, S. C. Manna, *J.*

Solid State Chem. **2017**, *249*, 29–38; c) S. Manna, A. Bhunia, S. Mistri, J. Vallejo, E. Zangrando, H. Puschmann, J. Cano, S. C. Manna, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2017**, 2585–2594.

[5.21] *Agilent Technologies, XRD Products 10 Mead Road, Yarnton, Oxfordshire. OX5 1QU, UK.*

[5.22] G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr., Sect: B* **2008**, *A64*, 112–122.

[5.23] L. J. Farrugia, *J. Appl. Crystallogr.* **2012**, *45*, 849–854.

[5.24] K. Brandenburg, *DIAMOND Version 3.2i, Crystal Impact GbR, Bonn, Germany*, **1999**.

[5.25] A. W. Addison, T. N. Rao, J. Reedijk, J. van Rijn, G. C. Verchoor, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1984**, 1349–1356.

[5.26] K. Nakamoto, *Infrared Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, John Wiley & Sons, New York*, **1997**.

[5.27] a) E. Mijangos, J. Reedijk, L. Gasque, *Dalton Trans.* **2008**, 1857–1863; b) R. Sanyal, P. Kundu, E. Rychagova, G. Zhigulin, S. Ketkov, B. Ghosh, S. K. Chattopadhyay, E. Zangrando, D. Das, *New J. Chem.* **2016**, *40*, 6623–6635; c) R. Sanyal, S. Ketkov, S. Purkait, F. A. Mautner, G. Zhigulin, D. Das, *New J. Chem.* **2017**, *41*, 8586–8597; d) O. Seneque, M. Campion, B. Douziech, M. Giorgi, E. Rivière, Y. Journaux, Y. L. Mestand O. Reinaud, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2002**, 2007–2014; (e) D. Das, A. Guha, S. Das, P. Chakraborty, T. K. Mondal, S. Goswami, E. Zangrando, *Inorg. Chem. Commun.* **2012**, *23*, 113–116.

[5.28] a) J. -P. Chyn, F. L. Urbach, *Inorg. Chim. Acta* **1991**, *189*, 157–163; b) A. Bhunia, S. Manna, S. Mistri, A. Paul, R. K. Manne, M. K. Santra, V. Bertolasi, S. C. Manna, *RSC Adv.* **2015**, *5*, 67727–67737.

[5.29] R. K. Gupta, G. Sharma, R. Pandey, A. Kumar, B. Koch, P. -Z. Li, Q. Xu, D. S. Pandey, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 13984–13996.

[5.30] V. T. Kasumov, F. Köksal, *Spectrochim. Acta, Part A: Mol. Biomol. Spectrosc.* **2005**, *61*, 225–231.

List of publications

2014

1. The supramolecular assembly of tetraaqua-(pyridine-2,5-dicarboxylato)-copper(II) complex: crystal structure, TD-DFT approach, electronic spectra, and photoluminescence study

S. Manna, S. Mistri, E. Zangrando, S. C. Manna, *J. Coord. Chem.* **2014**, *67*, 1174-1185.

2015

2. Synthesis, characterization, TDDFT calculation and biological activity of tetridentate ligand based square pyramidal Cu(II) complexes
A. Bhunia, **S. Manna**, S. Mistri, A. Paul, R. K. Mane, M. K. Santra, V. Bertolaso, S. C. Manna, *RSC Adv.*, **2015**, *5*, 67727-67737.

2016

3. Synthesis, crystal structure, DFT/TDDFT calculation, photophysical properties and DNA binding studies of morpholino moiety ligand based two Cu(II) complexes in combination with carboxylates
A. Paul, S. Mistri, A. Bhunia, **S. Manna**, H. Puschmann, S. C. Manna, *RSC Adv.*, **2016**, *6*, 60487-60501.

2017

4. Manganese(IV) complex with a polydentate Schiff base ligand: synthesis, crystal structure, TDDFT calculation, electronic absorption and EPR spectral study
S. Manna, S. Mistri, A. Bhunia, A. Paul, E. Zangrando, S. C. Manna, *J. Coord. Chem.* **2017**, *70*, 296-313.
5. Single-Ion Magnetic Behavior in Co^{II}-Co^{III} Mixed-Valence Dinuclear and Pseudodinuclear Complexes

S. Manna, A. Bhunia, S. Mistri, J. Vallejo, E. Zangrando, H. Puschmann, J. Cano, S. C. Manna, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2017**, 2585-2594.

6. Structural and Magnetic Characterization of Two Tetranuclear Cu(II) Complexes with Closed-Cubane-Like Core Framework

S. C. Manna, **S. Manna**, A. Paul, E. Zangrando, A. Figuerola, S. Dolai, K. Das, *ChemistrySelect* **2017**, 2, 3317-3322.

2018

7. Discrete and 1D Polymeric Copper(II) Complexes of Tetranuclear Cubane-like Units: Structural and Magnetic Characterization

S. C. Manna, **S. Manna**, S. Mistri, A. Patra, E. Zangrando, H. Puschmann, P. A. Goddard, S. Ghannadzadeh, *ChemistrySelect* **2018**, 3, 9885-9891.

2019

8. Tetranuclear Schiff base copper(II) complexes: Syntheses, crystal structure, DNA/protein binding and catecholase-like activity

S. Manna, E. Zangrando, H. Puschmann, S. C. Manna, *Polyhedron* **2019**, 162, 285-292.

9. Two new μ_2 -(1,1-Azido) and μ_2 -(1,1-Phenoxido)-bridged dinuclear nickel(II) complexes: Syntheses, single-crystal structures and magnetic studies

S. C. Manna, S. Dolai, H. Masu, A. Figuerola, **S. Manna**, *J. Mol. Struct.* **2019**, 1180, 849-854.

2020

10. Schiff base and azido coordinated di-/poly-nuclear cadmium(II) complexes: Crystal structure, photocatalytic degradation of methylene blue and thermal analysis

S. Manna, E. Zangrando, S. C. Manna, *Polyhedron* **2020**, 177, 114296.