



# UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

## TESIS DOCTORAL

Título
<b>Compuestos luminiscentes cicloplatinados con propiedades multifuncionales</b>
Autor/es
<b>Mónica Martínez Junquera</b>
Director/es
Elena Lalinde Peña y María Teresa Moreno García
Facultad
Facultad de Ciencia y Tecnología
Titulación
Departamento
Química
Curso Académico

Tesis presentada como compendio de publicaciones. La edición en abierto de la misma NO incluye las partes afectadas por cesión de derechos



Compuestos luminiscentes cicloplatinados con propiedades multifuncionales, tesis doctoral de Mónica Martínez Junquera, dirigida por Elena Lalinde Peña y María Teresa Moreno García (publicada por la Universidad de La Rioja), se difunde bajo una Licencia Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 3.0 Unported.

Permisos que vayan más allá de lo cubierto por esta licencia pueden solicitarse a los titulares del copyright.



**UNIVERSIDAD  
DE LA RIOJA**

**TESIS DOCTORAL  
2023**

**Programa de Doctorado en Química**

**COMPUESTOS LUMINISCENTES  
CICLOPLATINADOS CON PROPIEDADES  
MULTIFUNCIONALES**

**Mónica Martínez Junquera**

**Director/a:** Elena Lalinde Peña

**Director/a:** M<sup>a</sup> Teresa Moreno García



**ELENA LALINDE PEÑA**, Catedrática de Química Inorgánica de la Universidad de la Rioja.

**M<sup>a</sup> TERESA MORENO GARCÍA**, Catedrática de Química Inorgánica de la Universidad de la Rioja.

**CERTIFICAN:**

Que el siguiente trabajo de investigación, presentando como compendio de publicaciones y titulado **"Compuestos luminiscentes cicloplatinados con propiedades multifuncionales"** ha sido desarrollado en el Departamento de Química-Centro de Investigación en Síntesis Química (CISQ) de la Universidad de la Rioja bajo nuestra dirección por la Graduada Mónica Martínez Junquera y autorizan su presentación para que sea calificado como Tesis Doctoral.

**Logroño, Febrero de 2023**

**Fdo.: Prof. Dra. Elena Lalinde Peña      Fdo.: Prof. Dra. M<sup>a</sup> Teresa Moreno García**



## Índice

• Abbreviations and acronyms / abreviaturas y siglas	3
• Resumen	7
• Summary	11
• Presentación	13
• Lista de artículos	19
• Introducción	21
○ I.1 Principios teóricos de la luminiscencia	25
○ I.2 Luminiscencia en compuestos de platino(II)	33
▪ I.2.1 Agregación en compuestos de platino(II)	36
▪ I.2.2 Cromismos en compuestos de platino(II)	41
▪ I.2.3 Compuestos de platino(II) con ligandos ciclometalados	53
▪ I.2.4 Derivados luminiscentes de platino(II) con ligandos carbenos	65
▪ I.2.5 Derivados de platino(II) con ligandos acetiluros	71
▪ I.2.6 Compuestos de Pt con actividad biológica	79
○ Bibliografía	89
• Objetivos	101
• Chapter 1: Isomerism, aggregation-induced emission and mechanochromism of isocyanide cycloplatinated(II) complexes	107
○ Supporting Information	139
• Chapter 2: Luminescent cyclometalated platinum(II) complexes with acyclic diaminocarbene ligands: structural, photophysical and biological properties	177
○ Supporting Information	213

• Chapter 3: Multi-Stimuli Responsive Properties of Aggregated Isocyanide Cycloplatinated(II) Complexes	241
○ Supporting Information	275
• Chapter 4: <i>Cis/trans</i> [Pt(C <sup>^</sup> N)(C≡CR)(CNBu <sup>t</sup> )] isomers: synthesis, photophysical and DFT studies	327
○ Supporting Information	367
• Conclusiones generales	397



## Abbreviations and acronyms / abreviaturas y siglas

<b>1D-PGSE</b>	<i>Pulse Field Gradient Spin Echo / Eco de espín con gradientes</i>
<b>2D-DOSY</b>	<i>Diffusion Ordered Spectroscopy / Espectroscopía de difusión ordenada</i>
<b>2-Np</b>	<i>2-Naphthyl / 2-Naftilo</i>
<b>4,4'-dcbpy</b>	<i>4,4'-dicarboxy-2,2'-bipyridine acid / Ácido 4,4'-dicarboxi-2,2'-bipiridínico</i>
<b>ACQ</b>	<i>Aggregation-caused quenching / Desactivación causada por agregación</i>
<b>ADC</b>	<i>Acyclic diaminocarbene / Diaminocarbeno acíclico</i>
<b>AIE</b>	<i>Aggregation-induced emission / Emisión inducida por agregación</i>
<b>B3LYP</b>	<i>Becke, 3-parameter, Lee–Yang–Parr</i>
<b>BODIPY</b>	<i>4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacene / 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indaceno</i>
<b>br</b>	<i>Broad / Ancho</i>
<b>bzq</b>	<i>7,8-benzoquinoline / 7,8-benzoquinolina</i>
<b>C≡CR<sup>-</sup></b>	<i>Alkynyl / Alquínilo</i>
<b>CI</b>	<i>Internal conversion / Conversión interna (IC)</i>
<b>CIS/ISC</b>	<i>Intersystem crossing / Cruce intersistémico</i>
<b>CN<sup>-</sup></b>	<i>Cyanide / Cianuro</i>
<b>CNR</b>	<i>Isocyanide / Isocianuro</i>
<b>COSY</b>	<i>Correlation spectroscopy / Espectroscopía de correlación</i>
<b>Cy</b>	<i>Cyclohexyl / Ciclohexilo</i>
<b>d</b>	<i>Doublet / Doblete</i>
<b>D3(BJ)</b>	<i>Grimme's D3(BJ) dispersion correction / Corrección de dispersión Grimme's D3BJ</i>
<b>dfppy</b>	<i>2-(2,4-difluorophenyl)pyridine / 2-(2,4-difluorofenil)piridina</i>
<b>DFT</b>	<i>Density Functional Theory / Teoría del funcional de la densidad</i>
<b>DMSO</b>	<i>Dimethyl sulfoxide / Dimetilsulfóxido</i>
<b>dppp</b>	<i>1,3-Bis(diphenylphosphino)propane / 1,3-Bis(difenilfosfino)propano</i>
<b>E</b>	<i>Electrophile / Electrófilo</i>
<b>ESI</b>	<i>Electrospray ionization / Ionización por electrospray</i>
<b>f</b>	<i>Oscillator strength / Fuerza del oscilador</i>
<b>FBS</b>	<i>Fetal bovine serum / Suero bovino fetal</i>

<b>GHS</b>	Glutation / <i>Glutación</i>
<b>HMBC</b>	Heteronuclear Multiple Bond Correlation / <i>Correlación heteronuclear a enlaces múltiples</i>
<b>HOMO</b>	Highest energy occupied molecular orbital / <i>Orbital molecular ocupado de mayor energía</i>
<b>HS</b>	Hirshfeld Surface / <i>Superficie de Hirshfeld</i>
<b>HSQC</b>	Heteronuclear single quantum correlation / <i>Correlación heteronuclear a un enlace</i>
<b>i. e. / ej.</b>	In example / <i>Ejemplo</i>
<b>IL</b>	Intraligand / <i>Intraligando</i>
<b>ILCT</b>	Intraligand charge transfer / <i>Transferencia de carga intraligando</i>
<b>IR</b>	Infrared radiation / <i>Infrarrojo</i>
$k_{nr}$	Non-radiative rate constant / <i>Constante no-radiativa</i>
$k_r$	Radiative rate constant / <i>Constante radiativa</i>
$\lambda_{abs}$	Absorption wavelength / <i>Longitud de onda de absorción</i>
<b>LC</b>	Ligand centered / <i>Centrada en el ligando</i>
$\lambda_{em}$	Emission wavelength / <i>Longitud de onda emisión</i>
$\lambda_{exc}$	Excitation wavelength / <i>Longitud de onda de excitación</i>
<b>LL'CT</b>	Ligand to ligand charge transfer / <i>Transferencia de carga de un ligando a otro ligando</i>
<b>LMCT</b>	Ligand to metal charge transfer / <i>Transferencia de carga del ligando al metal</i>
<b>LUMO</b>	Lowest energy unoccupied molecular orbital / <i>Orbital molecular desocupado de menor energía</i>
<b>m</b>	Medium / <i>Medio</i>
<b>m</b>	Multiplet / <i>Multiplete</i>
<b>m-</b>	Meta
<b>MALDI</b>	Matrix-assisted laser desorption ionization / <i>Desorción/ionización láser asistida por matriz</i>
<b>max</b>	Maximum / <i>Máximo</i>
<b>MC</b>	Metal-centered / <i>Centrado en el metal</i>
<b>MLCT</b>	Metal to ligand charge transfer / <i>Transferencia de carga del metal al ligando</i>
<b>MMLCT</b>	Metal-metal-to-ligand charge transfer / <i>Transferencia de carga metal-metal al ligando</i>
<b>n<sub>A</sub></b>	Number of absorbed photons / <i>Número de fotones emitidos</i>
<b>n<sub>E</sub></b>	Numbers of emitted photons / <i>Número de fotones emitidos</i>

<b>NHC</b>	N-Heterocyclic Carbene / <i>N-carbenos heterocíclicos</i>
<b>NIC</b>	Non-Covalent Interaction / <i>Interacción no covalente</i>
<b>NIR</b>	Near infrared / <i>Infrarrojo cercano</i>
<b>nm</b>	Nanometer ( $10^{-9}$ meters) / <i>Nanómetro</i>
<b>RMN</b>	Nuclear Magnetic Resonance / <i>Resonancia magnética nuclear</i>
<b><i>o-</i></b>	Ortho / <i>Orto</i>
<b>OLED</b>	Organic light-emitting diode / <i>Dispositivo orgánico emisor de luz</i>
<b>Otf</b>	Trifluoromethanesulfonate / <i>Trifluorometanosulfonato</i>
<b><i>p-</i></b>	Para
<b>pbt</b>	2-phenylbenzothiazole / <i>2-fenilbenzotiazol</i>
<b>PCM</b>	Polarizable continuum model / <i>Modelo continuo polarizable</i>
<b>PDT</b>	Photodynamic therapy / <i>Terapia fotodinámica</i>
<b>piq</b>	1-phenylisoquinoline / <i>1-fenilisoquinolina</i>
<b>PMMA</b>	Poly(methyl methacrylate) / <i>Polimetilmetacrilato</i>
<b>ppy</b>	2-Phenylpyridine / <i>2-fenilpiridina</i>
<b>ppy-CHO</b>	4-(2-Pyridyl)benzaldehyde / <i>4-(2-piridil)benzaldehído</i>
<b>pq</b>	2-phenylquinoline / <i>2-fenilquinolina</i>
<b>PS</b>	Polystyrene / <i>Poliestireno</i>
<b>PXRD</b>	Powder X-ray diffraction / <i>Difracción de rayos X de polvo</i>
<b>py</b>	Pyridine / <i>Piridina</i>
<b>RDG</b>	Reduced density gradient / <i>Gradiente de densidad reducido</i>
<b>RISC</b>	Reverse intersystem crossing / <i>Cruce intersistémico inverso</i>
<b>ROS</b>	Reactive oxygen species / <i>Especies reactivas de oxígeno</i>
<b>RT</b>	Room Temperature / <i>Temperatura ambiente</i>
<b>s</b>	Singlet / <i>Singlete</i>
<b>s</b>	Strong / <i>Fuerte</i>
<b>S<sub>0</sub></b>	Ground state / <i>Estado fundamental</i>
<b>sh</b>	Shoulder / <i>Hombro</i>
<b>S<sub>n</sub></b>	Singlet excited state / <i>Estado excitado singlete</i>
<b>SOMO</b>	Single occupied molecular orbital / <i>Orbital molecular ocupado por un solo electrón</i>

$\tau$	Emission lifetime / <i>Tiempo de vida de emisión</i>
<b>t</b>	Triplet / <i>Triplete</i>
<b>TADF</b>	Thermally activated delayed fluorescence / <i>Fluorescencia retardada activada térmicamente</i>
<b><sup>t</sup>Bu</b>	<i>Tert-butyl / Tert-butilo</i>
<b>TD-DFT</b>	Time Dependent-Density Functional Theory / <i>Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo</i>
<b>TEM</b>	Transmission Electron Microscopy / <i>Microscopía electrónica de transmisión</i>
<b>terpy</b>	Terpyridine / <i>Terpiridina</i>
<b>TGA</b>	Thermogravimetric analysis / <i>Análisis termogravimétrico</i>
<b>thf</b>	Tetrahydrofuran / <i>Tetrahidrofurano</i>
<b>thpy</b>	2-(2-thenyl)pyridine / <i>2-(2-tienil)piridina</i>
<b>tht</b>	Tetrahydrothiophene / <i>Tetrahidrotiofeno</i>
<b>T<sub>n</sub></b>	Triplet excited state / <i>Estado excitado triplete</i>
<b>TOCSY</b>	Total Correlation Spectroscopy / <i>Espectroscopía de Correlación Total</i>
<b>TOF</b>	Time of flight / <i>Tiempo de vuelo</i>
<b>Tol</b>	Tolyl / <i>Tolilo</i>
<b>TTA</b>	Triplet-triplet annihilation / <i>Aniquilación triplete-triplete</i>
<b>TTET</b>	Triplet-Triplet Energy Transfer / <i>Transferencia de energía triplete-triplete</i>
<b>UP</b>	Upconversion / <i>Conversión ascendente</i>
<b>UV-Vis</b>	Ultraviolet–visible / <i>Ultravioleta-visible</i>
<b>VOC</b>	Volatile organic compounds / <i>Compuestos orgánicos volátiles</i>
<b>VR</b>	Vibrational relaxation / <i>Relajación vibracional</i>
<b>vs</b>	Very strong / <i>Muy fuerte</i>
<b>w</b>	Weak / <i>Débil</i>
<b>WOLED</b>	White organic light-emitting diode / <i>Dispositivo orgánico emisor de luz blanca</i>
<b>Xyl</b>	2,6-xylyl / <i>2,6-dimetilfenilo</i>
$\delta$	NMR chemical shift / <i>Desplazamiento químico en RMN</i>
$\epsilon$	Molar extinction coefficient / <i>Coficiente de extinción molar</i>
$\lambda$	Wavelength / <i>Longitud de onda</i>
$\Phi$	Quantum yield / <i>Rendimiento cuántico</i>

# Resumen/ Summary






## Resumen

Los complejos plano cuadrado de platino(II) con ligandos aromáticos conjugados constituyen una nueva clase de materiales supramoleculares con interesantes propiedades espectroscópicas de gran versatilidad debido a su tendencia al apilamiento a través de interacciones metalofílicas Pt(II)-Pt(II), moduladas y, en ocasiones, asistidas por interacciones  $\pi \cdots \pi$  entre los ligandos aromáticos. Estas propiedades se modulan con el tipo de ligandos, la carga del complejo o el microentorno, tanto en el estado fundamental como en el estado excitado. En particular, los compuestos ciclometalados de platino(II) presentan gran interés debido a sus atractivas propiedades fotofísicas con aplicaciones en diversas áreas. En este contexto, esta Tesis Doctoral se centra en la síntesis, caracterización y estudio de las propiedades de nuevos sistemas luminiscentes basados en complejos cicloplatinaados(II) con ligandos isocianuro, isocianuro/acetiluro o carbenos acíclicos.

Se han estudiado dos series de complejos de tipo cloro/isocianuro  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNR})]$  ( $\text{R} = \text{Xyl}$  y  $^t\text{Bu}$ ) y la alquinilación de estos sustratos para obtener compuestos de tipo acetiluro/isocianuro  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CR}')(\text{CNR})]$ . La variación de los ligandos isocianuro, ciclometalado ( $\text{C}^{\wedge}\text{N}$ ) o alquinilo permite estudiar la influencia de estos ligandos en la estructura, empaquetamiento y en las propiedades fotofísicas. Este estudio, apoyado con cálculos teóricos, ha puesto de manifiesto que los compuestos con ligandos ciclometalados planos basados en la fenilpiridina exhiben una mayor tendencia a la agregación molecular a través de interacciones intermoleculares no covalentes Pt $\cdots$ Pt y/o  $\pi \cdots \pi$ , que gobiernan sus propiedades fotofísicas, generando simultáneamente un comportamiento mecanocrómico y emisión inducida por agregación (AIE). Con Cl/CN $^t\text{Bu}$  se favorecen este tipo de interacciones moleculares a largo alcance, dando lugar a materiales supramoleculares multifuncionales con propiedades vapocrómicas, solvatocrómicas, mecanocrómicas y termocrómicas. Además, el empleo de distintas rutas sintéticas ha permitido obtener separadamente isómeros *cis* y *trans*- $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CR}')(\text{CNR})]$ , lo que permite estudiar el efecto de la configuración *cis/trans* en las propiedades ópticas y su capacidad de actuar como sensores selectivos de cationes.

Además, se ha preparado una familia de complejos luminiscentes de tipo carbeno acíclicos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}\{\text{C}(\text{NHXyl})(\text{NHR})\}]$  por adición nucleofílica de aminas primarias sobre el isocianuro coordinado en los precursores  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNXyl})]$ . Estos derivados



representan los primeros ejemplos de complejos diaminocarbenos acíclicos cicloplatinados con propiedades antiproliferativas, como se ha puesto de manifiesto en los estudios de citotoxicidad e interacción del ADN realizados en colaboración con el CIBIR.




## Summary

Square-planar platinum(II) complexes with conjugated aromatic ligands constitute a new class of supramolecular materials with interesting spectroscopic properties of great versatility due to their tendency to stack through metallophilic Pt(II)-Pt(II) interactions, modified and, sometimes assisted, by  $\pi \cdots \pi$  interactions between the aromatic ligands. These properties are modulated by the type of ligands, the charge of the complex and/or the microenvironment, both in the ground state and in the excited state. In particular, platinum(II) cyclometalated compounds are of great interest due to their attractive photophysical properties with applications in several areas. In this context, this PhD Thesis focuses on the synthesis, characterisation and analysis of the properties of new luminescent systems based on cycloplatinated(II) complexes bearing isocyanide, isocyanide/alkynyl or acyclic carbenes ligands.

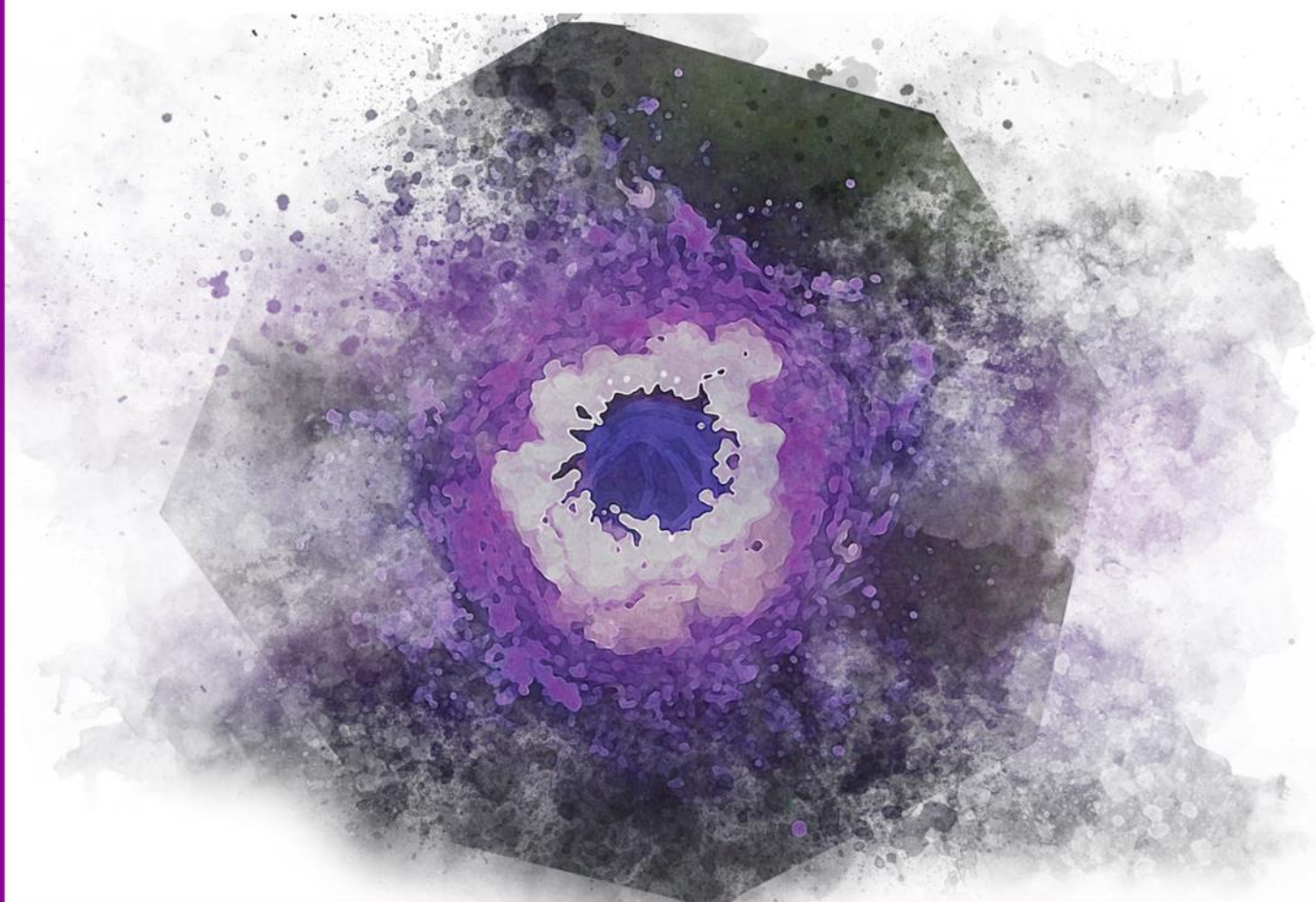
Two series of chloride/isocyanide-type complexes  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNR})]$  ( $\text{R} = \text{Xyl}$  and  $t\text{Bu}$ ) and their corresponding alkynylation process to obtain acetylide/isocyanide-type compounds  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CR}')(\text{CNR})]$  have been studied. The variation of the isocyanide, cyclometalated ( $\text{C}^{\wedge}\text{N}$ ) or alkynyl ligands has allowed us to investigate the influence of these ligands on the structure, packing and on the photophysical properties. This study, supported by theoretical calculations, has shown that compounds with planar cyclometalated ligands based on the phenylpyridinyl group exhibit a greater tendency towards molecular aggregation through non-covalent intermolecular interactions  $\text{Pt} \cdots \text{Pt}$  and/or  $\pi \cdots \pi$ , which govern their photophysical properties, simultaneously generating mechanochromic behavior and aggregation-induced emission (AIE). These long-range molecular interactions are favoured in  $\text{Cl}/\text{CNBu}^t$  derivatives, resulting in multifunctional supramolecular materials with vapochromic, solvatochromic, mechanochromic and thermochromic properties. In addition, *cis* and *trans*-isomers  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CR}')(\text{CNR})]$  were successfully isolated separately by using different synthetic pathways, which has allowed us to study the effect of *cis/trans* configuration on optical properties and their ability to act as selective cation sensors.

Furthermore, a family of acyclic carbene-type luminescent complexes  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}\{\text{C}(\text{NHXyl})(\text{NHR})\}]$  has been prepared by nucleophilic addition of primary amines onto the coordinated isocyanide in the precursors  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNXyl})]$ . These derivatives represent the first examples of cycloplatinated acyclic diaminocarbene



complexes with antiproliferative properties, as evidenced by cytotoxicity and DNA interaction studies carried out in collaboration with CIBIR.

# Presentación





## Presentación

Esta Tesis, titulada "Compuestos luminiscentes cicloplatinados con propiedades multifuncionales", se presenta como una recopilación de los artículos científicos publicados durante la investigación sobre la síntesis y estudio de las propiedades de nuevos complejos luminiscentes de cicloplatinados(II) con ligandos isocianuro, isocianuro/acetiluro o carbenos acíclicos. El trabajo presentado en el último capítulo aún no ha sido publicado, pero ha sido escrito en formato de artículo, ya que se enviará próximamente para su publicación.

La Memoria comienza con una primera sección de Introducción, en la que se contextualiza la unidad temática de la Tesis. En primer lugar se describen brevemente los principios teóricos de la luminiscencia, y más específicamente la luminiscencia en complejos de Pt(II), detallando las interesantes propiedades de agregación de este tipo de compuestos plano-cuadrados que exhiben fascinantes características crómicas, como mecanocromismo, vapocromismo, solvatochromismo, termocromismo o una combinación de estos. Posteriormente, se aporta una visión general de los antecedentes que se conocen hasta la fecha de derivados luminiscentes de Pt(II) con ligandos ciclometalados, éstos con ligandos isocianuros, compuestos de Pt(II) con carbenos acíclicos y alquinil derivados de Pt(II), especificando además los que contienen ligandos ciclometalados e isocianuro y alquinilo conjuntamente. Finalmente, se ofrece una breve explicación sobre la actividad biológica de los complejos de platino, focalizando la discusión en los derivados ciclometalados de Pt(II) de tipo carbeno, relevantes para este trabajo. A continuación, se detallan los objetivos establecidos en este trabajo de investigación.

Posteriormente, la Tesis se divide en capítulos dedicados a cada artículo científico escritos en su idioma original (inglés). El material suplementario se incluye al término de cada capítulo. A continuación, se resume brevemente el contenido de cada capítulo:

### Capítulo 1:

En este trabajo, se describe la síntesis y caracterización de dos series de complejos ciclometalados de Pt(II) con ligandos cloruro/isocianuro  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNXyl})]$  (**1-3**) y alquinilo/isocianuro  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CTol})(\text{CNXyl})]$  (**4-6**). Se utilizaron tres ligandos ciclometalados ( $\text{C}^{\wedge}\text{N}$ ) distintos para estudiar su influencia en las estructuras,

empaquetamiento y en las propiedades ópticas, fenilpiridina (ppy), difluorofenilpiridina (dfppy) y fenilquinoleína (pq). De hecho, el ligando ciclometalado dirige la formación de los dos posibles isómeros geométricos, obteniéndose el isómero *trans*  $\text{N}^{\text{C}^{\wedge}\text{N}},\text{CNR}$  con los ligandos basados en la ppy y el *cis*  $\text{N}^{\text{C}^{\wedge}\text{N}},\text{CNR}$  con la pq, de acuerdo con cálculos teóricos realizados para estudiar la estabilidad de los dos tipos de isómeros. El ligando ciclometalado parece ser crucial no sólo en las estructuras sino también en las propiedades ópticas en disolución, en films y en estado sólido. Así, los resultados de fotoluminiscencia en los complejos con el ligando alabeado (pq) indican que éstos no muestran tendencia a la agregación mientras los ligandos más planos basados en la fenilpiridina (ppy) exhiben una gran tendencia a la agregación molecular favorecida por interacciones  $\pi\cdots\pi$  o incluso  $\text{M}\cdots\text{M}$  con emisiones desplazadas al rojo respecto al monómero en vidrios congelados. El alto grado de agregación molecular induce simultáneamente AIE, con emisiones más fuertes en estado sólido que en film o en fluido y un comportamiento mecanocrómico reversible observable tanto en el color como en la emisión, con un notable desplazamiento al rojo y una disminución de los rendimientos cuánticos. Los estudios de difracción de rayos X de polvo demuestran que el comportamiento mecanocrómico observado tiene su origen en una transición de fase desde un estado cristalino a un estado amorfo al ejercer presión.

## Capítulo 2:

En este capítulo se aborda el estudio de una nueva familia de complejos ciclometalados luminiscentes de Pt(II) con ligandos diaminocarbenos acíclicos (ADC),  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}\{\text{C}(\text{NHXYl})(\text{NHR})\}]$  [ $\text{C}^{\wedge}\text{N}$  = dfppy, pq; R = Pr **3a**, **4a**,  $\text{CH}_2\text{Ph}$  **3b**, **4b**], obtenidos por adición nucleofílica de  $\text{NH}_2\text{R}$  sobre el isocianuro coordinado en los derivados precursores  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{C}\equiv\text{NXyl})]$  ( $\text{C}^{\wedge}\text{N}$  = dfppy **1**, pq **2**). Los complejos **3** muestran en disolución procesos de autoensamblaje molecular favorecidos por la presencia de interacciones intermoleculares dador-aceptor del tipo  $\text{NH}_{(\text{XYl})}\cdots\text{Cl}$ , como se ha comprobado con experimentos de RMN en disolución de  $\text{CDCl}_3$  (RMN 1D-PGSE y 2D-DOSY), estudios de difracción de rayos X y, con estudios teóricos de análisis de superficie de Hirshfield y gráficos de interacciones no covalentes (NCI).

Se han estudiado con detalle las propiedades ópticas de todos los compuestos y el origen de las absorciones y emisiones se han confirmado con cálculos teóricos DFT y

TD-DFT en compuestos seleccionado. Estos complejos muestran en disolución emisión inducida por agregación (AIE), analizada en detalle para los compuestos **3a** y **4a**.

Además, se ha estudiado la actividad biológica de estos derivados. Los estudios de citotoxicidad frente a dos líneas tumorales distintas muestran buena actividad in vitro para los compuestos, superior a la del cisplatino frente a la línea celular HeLa y similar en relación a las células A549. Los estudios de electroforesis revelan que los complejos **3** y **4a** tienen la capacidad de interactuar con el ADN, probablemente por intercalación con el mismo. Estos resultados son de interés y, hasta donde sabemos, estos compuestos representan los primeros ejemplos de diaminocarbenos acíclicos cicloplatinados con propiedades antiproliferativas.

### Capítulo 3:

En este trabajo se presenta la síntesis, estructuras y propiedades ópticas de sistemas ciclometalados basados en *tert*-butilisocianuro complejos de Pt(II): neutros,  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{C}\equiv\text{NBu}^t)]$  **1**, sales dobles,  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{NBu}^t)_2][\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}_2]$  **2** y complejos catiónicos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{NBu}^t)_2]\text{ClO}_4$  **3** con dos ligandos ciclometalados diferentes basados en la fenilpiridina ( $\text{C}^{\wedge}\text{N} = \text{dfppy}$ , **a** y  $\text{ppy-CHO}$ , **b**). Los derivados **1a** y **1b** cristalizan en diferentes pseudopolimorfos (dos para **1a** y tres para **1b**) con diferentes cadenas infinitas 1D, debido a una fuerte tendencia a la agregación a través de interacciones de apilamiento  $\text{Pt}\cdots\text{Pt}$  y/o  $\pi\cdots\pi$  que modulan sus propiedades fotoluminiscentes. Estas interacciones intermoleculares de largo alcance favorecen la formación de especies fosforescentes eficientes, que cambian de color y de emisión desde el verde al rojo en respuesta a compuestos orgánicos volátiles (COVs), disolventes, temperatura y presión. Resaltar que en el complejo **1b** sufre autoensamblaje molecular a través de este tipo de interacciones moleculares en respuesta a vapores de tolueno incluso en el interior de una película polimérica de poliestireno (PS, 10 wt %). Se han realizado simulaciones teóricas DFT de los modelos dímero, trímero y tetrámero de las especies **1a** y **1b** para comprender las propiedades fotofísicas de agregación en estado sólido. Además, **3a** también muestra un comportamiento vapocrómico y vapoluminiscente.

## Capítulo 4:

En este último capítulo se presenta la síntesis y el estudio de la isomerización de cuatro series de derivados *tert*-butilisocianuro/alquínulo del tipo  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CR})(\text{CNBu}^t)]$  en sus formas diferenciadas *trans* o *cis*, en los que se ha variado el ligando ciclometalado y el alquínulo. Se analiza el proceso de isomerización *trans/cis* desde un punto de vista experimental y teórico. Se estudia el efecto de la configuración *trans/cis*, el ligando ciclometalado y el sustituyente del alquínulo en las propiedades ópticas (absorción y emisión) en disolución, con el apoyo de cálculos teóricos DFT y TD-DFT. Finalmente, se ha evaluado la capacidad de una pareja de isómeros *trans/cis* de una especie de actuar como sensores selectivos frente a iones  $\text{Hg}^{2+}$  en disolución.

Para finalizar se incluye un capítulo con las conclusiones generales de cada trabajo, en donde se destacan las aportaciones más relevantes de esta Tesis doctoral.

\*Aviso: Como esta Tesis se realiza por compendio de publicaciones, el formato de los artículos (título o figuras), estilo de las referencias o el tipo de inglés empleado (británico o estadounidense) puede variar en los diferentes capítulos en función de la revista en la que han sido publicados. Para facilitar la lectura de la Tesis como una obra estructuralmente homogénea, las figuras se han colocado después de haber sido mencionadas en el texto y los artículos se han paginado de forma correlativa con el resto de la obra.



## Lista de artículos

Los artículos de investigación publicados incluidos en esta Tesis doctoral son:

### Capítulo 1

Mónica Martínez-Junquera, Rebeca Lara, Elena Lalinde and M. Teresa Moreno. Isomerism, aggregation-induced emission and mechanochromism of isocyanide cycloplatinated(II) complexes. *Journal of Materials Chemistry C*, **2020**, *8*, 7221-7233. <https://doi.org/10.1039/D0TC01163K>

Índice de impacto: 7.393; Q1; 65/336, Área temática: Materials Science Multidisciplinary-SCIE; JCR 2020.

### Capítulo 2

Mónica Martínez-Junquera, Elena Lalinde, M. Teresa Moreno, Elvira Alfaro-Arnedo, Iciar P. López, Ignacio M. Larráyoz and José G. Pichel. Luminescent cyclometalated platinum(II) complexes with acyclic diaminocarbene ligands: structural, photophysical and biological properties. *Dalton Transactions*, **2021**, *50*, 4539-4554. <https://doi.org/10.1039/D1DT00480H>

Índice de impacto: 4.569; Q1; 7/46, Área temática: Chemistry, Inorganic and Nuclear-SCI; JCR 2021.

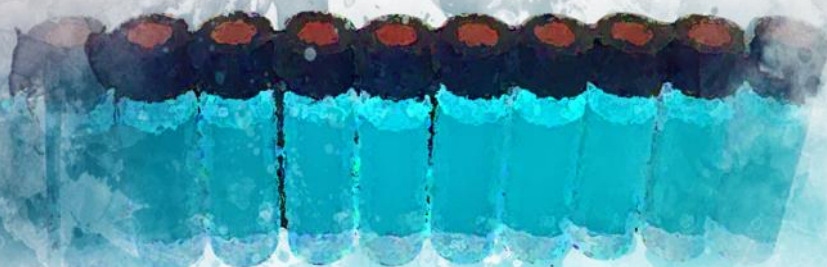
### Capítulo 3

Mónica Martínez-Junquera, Elena Lalinde, and M. Teresa Moreno. Multi-Stimuli-Responsive Properties of Aggregated Isocyanide Cycloplatinated(II) Complexes. *Inorganic Chemistry*, **2022**, *61*, 10898-10914. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c01400>

Índice de impacto: (2021) 5.436; Q1; 5/46, Área temática: Chemistry, Inorganic and Nuclear-SCI, JCR 2021.



# Objetivos





## Objetivos

Dada la amplia experiencia del grupo de investigación “Materiales Moleculares Organometálicos” en la síntesis y estudio de las propiedades fotofísicas de complejos ciclometalados de Pt(II), en este trabajo se propone la síntesis, caracterización y estudio extenso de las propiedades optoelectrónicas, con el apoyo de cálculos teóricos, de nuevos complejos cicloplatinaados con ligandos isocianuro, isocianuro/acetiluro o carbenos acíclicos como grupos auxiliares. Con este estudio pretendemos extender el conocimiento existente acerca de la relación estructura propiedades en sistemas fotoactivos de platino que permitan ampliar las potenciales aplicaciones de estos compuestos en diversos campos.

- En primer lugar, en el **Capítulo 1** se propone:
  - Evaluar la influencia de diferentes ligandos ciclometalados en las estructuras, empaquetamiento y propiedades ópticas de una serie de complejos de tipo  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNXyl})]$ .
  - Utilizarlos como precursores para la síntesis de derivados de tipo  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CTol})(\text{CNXyl})]$  con el fin de analizar en éstos el efecto de la sustitución de un ligando de campo débil como es el cloruro por el ligando tolil-acetiluro de campo fuerte, así como el efecto del ligando ciclometalado en la configuración, estructuras y propiedades emisivas, con el apoyo de cálculos teóricos.
  - Analizar los cambios en el color y en la emisión cuando estos compuestos son sometidos a perturbaciones externas como fuerza mecánica, exposición a vapores o cambios en la temperatura.
- En el **Capítulo 2**, teniendo en cuenta la interesante reactividad en los ligandos CNR coordinados al metal y la escasez de estudios publicados de compuestos cicloplatinaados con carbenos acíclicos (ADC) nos propusimos:
  - Sintetizar nuevos complejos cicloplatinaados con carbenos acíclicos del tipo  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}\{\text{C}(\text{NHXyl})(\text{NHR})\}]$  por ataque nucleófilo de aminas primarias a los complejos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNXyl})]$ , descritos en el capítulo anterior.
  - Analizar los posibles procesos de ensamblaje molecular mediante interacciones intermoleculares no covalentes en disolución, en estado sólido y mediante cálculos teóricos.

- Estudiar sus propiedades ópticas (absorción y emisión en varios medios) con el soporte de cálculos teóricos DFT y TD-DFT.
  - Estudiar la actividad biológica de estos compuestos, evaluando su estabilidad en medio celular/DMSO, su actividad biológica frente a distintas líneas celulares tumorales y su efecto sobre la movilidad electroforética del ADN.
- En el **Capítulo 3** se propuso el estudio de nuevos derivados de tipo  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNBu}^t)]$  con dos ligandos ciclometalados distintos basados en la fenilpiridina, con especial énfasis en la influencia de los disolventes en la obtención de polimorfos y el estudio detallado de sus propiedades fotofísicas. Así, se pretende
  - Estudiar las estructuras cristalinas de los posibles pseudopolimorfos formados por agregación a través de interacciones  $\text{Pt}\cdots\text{Pt}$  y/o  $\pi\cdots\pi$ .
  - Evaluar las transformaciones estructurales entre pseudopolimorfos y evaluar sus propiedades ópticas en respuesta a multiestímulos externos incluyendo vapores de diferentes compuestos orgánicos, disolventes, temperatura y presión.
  - Llevar a cabo un estudio teórico de los sistemas agregados para comprender las propiedades fotofísicas en estado sólido.
- En el **Capítulo 4** se pretende:
  - Estudiar distintas vías sintéticas con el fin de obtener separadamente parejas de isómeros *trans* y *cis* de *tert*-butilisocianuro/alquinil complejos cicloplatinaados  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CR})(\text{CNBu}^t)]$ .
  - Estudiar la isomerización *trans/cis* tanto desde un punto de vista experimental como teórico.
  - Evaluar el efecto del isomerismo *trans/cis*, el cambio de ligando ciclometalado y de alquinilo en las propiedades ópticas en disolución de estos sistemas.
  - Analizar la influencia de estos factores en las propiedades ópticas mediante cálculos teóricos DFT y TD-DFT.
  - Estudiar cómo afecta la presencia de iones metálicos en la fosforescencia en disolución de las formas *trans* y *cis* de una especie.

# Conclusiones generales







## Conclusiones generales

Las conclusiones de cada trabajo se exponen al final de cada capítulo. A continuación, se remarcan las conclusiones generales de la Tesis.

- Se han sintetizado y estudiado las propiedades fotoluminiscentes de dos series de complejos cicloplatinados con el ligando xililisocianuro  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{X}(\text{CNXyl})]$  ( $\text{C}^{\wedge}\text{N}$  = ppy, dfppy, pq; X = Cl,  $\text{C}\equiv\text{CTol}$ ). El análisis de sus datos estructurales y espectroscópicos indica que los complejos con ligandos basados en la fenilpiridina, cuando se produce la alquinilación, mantienen la estereoquímica de los compuestos precursores *trans*  $\text{N}_{\text{C}^{\wedge}\text{N}},\text{CNXyl}$ , mientras que en el complejo con fenilquinoleína, se produce una isomerización al isómero más estable (*cis*  $\text{N}_{\text{C}^{\wedge}\text{N}},\text{CNXyl}$ ), como se ha justificado mediante cálculos teóricos.
- Todos los complejos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{X}(\text{CNXyl})]$  (X = Cl,  $\text{C}\equiv\text{CTol}$ ) son fosforescentes en diferentes medios, con emisiones asignadas en general a una mezcla  ${}^3\text{IL}/{}^3\text{MLCT}$  para los derivados de cloro y a una mezcla  ${}^3\text{IL}/{}^3\text{L}'\text{LCT}/{}^3\text{MLCT}$  (L =  $\text{C}^{\wedge}\text{N}$ , L' =  $\text{C}\equiv\text{CTol}$ ) para los acetiluros. La planaridad de los derivados de fenilpiridina favorece la agregación con la formación de excímeros o agregados ( ${}^3\pi\pi^*$ ) por apilamiento a través de interacciones  $\pi\cdots\pi$  o incluso  $\text{Pt}\cdots\text{Pt}$ . El alto grado de agregación molecular se manifiesta en el simultáneo comportamiento mecanocrómico reversible y en efecto de emisión fosforescente inducida por agregación (AIE) con emisiones más intensas en estado sólido que en films o en fluido. Por el contrario, los complejos con el ciclometalado fenilquinoleína no muestran tendencia al apilamiento debido probablemente a su disposición alabeada.
- En estos compuestos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{X}(\text{CNXyl})]$  el ligando ciclometalado influye tanto en la energía de la emisión siguiendo el orden  $\text{dfppy} > \text{ppy} > \text{pq}$ , como en los rendimientos cuánticos ( $\phi$  30-46 % ppy, dfppy vs 9-11% pq), modulados por el efecto AIE.
- Se ha obtenido una nueva familia de complejos ciclometalados diaminocarbeno (ADC) de Pt(II),  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}\{\text{C}(\text{NHXyl})(\text{NHR})\}]$  ( $\text{C}^{\wedge}\text{N}$  = dfppy, pq; R = Pr,  $\text{CH}_2\text{Ph}$ ) por ataque nucleofílico de aminas primarias al isocianuro coordinado en los precursores  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{X}(\text{CNXyl})]$ . Los derivados con difluorofenilpiridina exhiben interacciones intermoleculares dador-aceptor  $\text{NH}_{(\text{Xyl})}\cdots\text{Cl}$ , apoyadas con experimentos de RMN (1D-PGSE y 2D-DOSY NMR) y estudios de difracción de

rayos X, y análisis teóricos de superficie de Hirshfield e interacciones no covalentes (NCI).

- Los compuestos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}\{\text{C}(\text{NHXyl})(\text{NHR})\}]$  muestran una fosforescencia  ${}^3\text{IL}/{}^3\text{MLCT}$ , verde en el caso de los dfppy y naranja para los de pq, con rendimientos cuánticos que alcanzan el 70% para los derivados en dfppy en sólido o films. Además, los derivados de dfppy presentan propiedades de agregación AIE.
- Se ha demostrado que los complejos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}\{\text{C}(\text{NHXyl})(\text{NHR})\}]$  presentan valores de citotoxicidad *in vitro* superiores al cisplatino frente a la línea celular HeLa y valores similares en la línea A549, con movilidad electroforética del ADN distinta a la del cisplatino
- Se han preparado nuevos complejos fosforescentes de Pt(II) con *tert*-butilisocianuro: neutros  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNBu}^t)]$ , sales dobles  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{CNBu}^t)_2][\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}_2]$  y catiónicos  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{CNBu}^t)_2]\text{ClO}_4$ , ( $\text{C}^{\wedge}\text{N} = \text{dfppy}, \text{ppy-CHO}$ ).
- Los derivados cloro-isocianuro  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNBu}^t)]$  muestran una gran tendencia para autoensamblarse en estado sólido formando cadenas infinitas unidimensionales a través de interacciones  $\pi \cdots \pi$  y/o  $\text{Pt} \cdots \text{Pt}$ , como se ha demostrado analizando el empaquetamiento cristalino de los diferentes pseudopolimorfos que forman las estructuras 1D en las que los ligandos ciclometalado se colocan cabeza-cola muestran distancias  $\text{Pt} \cdots \text{Pt}$  mucho más largas que los que localizan a los ligandos en disposición cabeza-cabeza, lo que se refleja en las emisiones que van desde el verde al rojo.
- Estos derivados presentan transformaciones entre los distintos pseudopolimorfos en respuesta a multi-estímulos externos como vapocromismo, vapoluminiscencia, solvatocromismo, termocromismo y mecanocromismo, con cambios de color de verde a rojo en estado sólido atribuidas a la modulación de las interacciones no covalente. Esta gran tendencia al autoensamblaje a través de interacciones no covalentes  $\text{Pt} \cdots \text{Pt}$  y/o  $\pi \cdots \pi$  se produce en el complejo de ppy-CHO incluso en el interior de una matriz polimérica (PS, 10 wt %), al ser expuesto a vapores de tolueno. La respuesta de los materiales no solvatados a vapores o disolventes se puede explicar a la vista de las estructuras de los distintos pseudopolimorfos, que presentan canales paralelas a las columnas, que se ocupan por el correspondiente disolvente.
- Cálculos teóricos en modelos dímeros, trímeros y tetrámeros de  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Cl}(\text{CNBu}^t)]$  revelan que los contactos  $\text{Pt} \cdots \text{Pt}$  están favorecidos en las geometrías dímera y trímera

en el derivado de dfppy y para el tetrámero en el de ppy-CHO, especialmente en sus estados triplete  $T_1$ , en coherencia con el carácter  $^3\text{MMLCT}$  de las emisiones.

- Se han obtenido separadamente las formas *trans* y *cis* de una serie *tert*-butilisocianuro/alquinil complejos cicloplatinados  $[\text{Pt}(\text{C}^{\wedge}\text{N})(\text{C}\equiv\text{CR})(\text{CNBu}^{\prime})]$  y se ha estudiado la isomerización *trans/cis* desde un punto de vista experimental y teórico.
- En sus propiedades de absorción y de emisión influyen tanto la configuración (*trans/cis*) como la identidad del ligando ciclometalado y el alquinilo. Esta influencia se justifica además mediante cálculos teóricos DFT y TD-DFT.
- La pareja *trans/cis* **2a** reacciona selectivamente con iones  $\text{Hg}^{2+}$ , por lo que podrían usarse como sensores de Hg(II) eficientes en disolución.



## Bibliografía

### • Bibliografía Introducción:

1. Chaaban, M.; Zhou, C.; Lin, H.; Chyi, B.; Ma, B., *J. Mater. Chem. C* **2019**, *7*, 5910.
2. (a) Xu, H.; Chen, R.; Sun, Q.; Lai, W.; Su, Q.; Huang, W.; Liu, X., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 3259; (b) Wang, X.; Wang, S., *Chem. Rec.* **2019**, *19*, 1693; (c) Yersin, H., *Highly efficient OLEDs with phosphorescent materials*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2008**; (d) Cebrián, C.; Mauro, M., *Beilstein J. Org. Chem.* **2018**, *14*, 1459; (e) Williams, J. A. G.; Develay, S.; Rochester, D. L.; Murphy, L., *Coord. Chem. Rev.* **2008**, *252*, 2596; (f) Chen, Z.; Ho, C. L.; Wang, L.; Wong, W. Y., *Adv. Mater.* **2020**, *32*, 1903269; (g) Yersin, H.; Rausch, A. F.; Czerwieniec, R.; Hofbeck, T.; Fischer, T., *Coord. Chem. Rev.* **2011**, *255*, 2622.
3. (a) Kume, S.; Nishihara, H., *Photofunctional Transition Metal Complexes*, ed. V. W. W. Yam, Springer, Berlin, Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **2007**, 123, 79; (b) Ko, C.-C.; Wing-Wah Yam, V., *J. Mater. Chem.* **2010**, *20*, 2063; (c) Ai, Y.; Chan, M. H.; Chan, A. K.; Ng, M.; Li, Y.; Yam, V. W., *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **2019**, *116*, 13856; (d) Bianchi, A.; Delgado-Pinar, E.; García-España, E.; Giorgi, C.; Pina, F., *Coord. Chem. Rev.* **2014**, *260*, 156.
4. (a) Ma, D.-L.; He, H.-Z.; Leung, K.-H.; Chan, D. S.-H.; Leung, C.-H., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 7666; (b) Li, K.; Ming Tong, G. S.; Wan, Q.; Cheng, G.; Tong, W.-Y.; Ang, W.-H.; Kwong, W.-L.; Che, C.-M., *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 1653; (c) Mauro, M.; Aliprandi, A.; Septiadi, D.; Kehr, N. S.; De Cola, L., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 4144; (d) McGhie, B. S.; Aldrich-Wright, J. R., *Biomedicines* **2022**, *10*, 578; (e) Chen, Y.; Guan, R.; Zhang, C.; Huang, J.; Ji, L.; Chao, H., *Coord. Chem. Rev.* **2016**, *310*, 16; (f) Lo, K. K.-W., *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 2985; (g) Byrne, A.; Cullinane, D.; Gkika, K. S.; Burke, C. S.; Keyes, T. E., *Springer Handbook of Inorganic Photochemistry*, Springer, **2022**, 1073; (h) Jurgens, S.; Kuhn, F. E.; Casini, A., *Curr. Med. Chem.* **2018**, *25*, 437.
5. (a) Gao, L.; Ni, J.; Su, M.; Kang, J.; Zhang, J., *Dyes Pigments* **2019**, *165*, 231; (b) Zhang, K. Y.; Chen, X.; Sun, G.; Zhang, T.; Liu, S.; Zhao, Q.; Huang, W., *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 7137; (c) Song, Z.; Liu, R.; Li, Y.; Shi, H.; Hu, J.; Cai, X.; Zhu, H., *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4*, 2553; (d) Yam, V. W.-W.; Chan, A. K.-W.; Hong, E. Y.-H., *Nat. Rev. Chem.* **2020**, *4*, 528; (e) Sun, H.; Liu, S.; Lin, W.; Zhang, K. Y.; Lv, W.; Huang, X.; Huo, F.; Yang, H.; Jenkins, G.; Zhao, Q.; Huang, W., *Nat. Commun.* **2014**, *5*, 3601; (f) Zhao, Q.; Xu, W.; Sun, H.; Yang, J.; Zhang, K. Y.; Liu, S.; Ma, Y.; Huang, W., *Adv. Optical Mater.* **2016**, *4*, 1167; (g) Li, Y.; Chen, L.; Ai, Y.; Hong, E. Y.; Chan, A. K.; Yam, V. W., *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 13858; (h) Yam, V. W.-W.; Cheng, Y.-H., *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2022**, *95*, 846.
6. (a) Ranieri, A. M.; Burt, L. K.; Stagni, S.; Zacchini, S.; Skelton, B. W.; Ogden, M. I.; Bissember, A. C.; Massi, M., *Organometallics* **2019**, *38*, 1108; (b) Twilton, J.; Le, C.; Zhang, P.; Shaw, M. H.; Evans, R. W.; MacMillan, D. W. C., *Nature Rev. Chem.* **2017**, *1*, 0052; (c) Mede, T.; Jäger, M.; Schubert, U. S., *Chem. Soc. Rev.* **2018**, *47*, 7577; (d) Huang, X.; Meggers, E., *Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 833.
7. (a) Zhao, Q.; Li, F.; Huang, C., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 3007; (b) Ma, D.-L.; Ma, V. P.-Y.; Chan, D. S.-H.; Leung, K.-H.; He, H.-Z.; Leung, C.-H., *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 3087; (c) Saha, M. L.; Yan, X.; Stang, P. J., *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 2527; (d) Wenger, O. S., *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 3686.
8. (a) Pfenning, B. W., *Principles of Inorganic Chemistry*, Wiley, **2015**; (b) Fraga, S.; Karwowski, J.; Saxena, K. M. S., *Handbook of atomic data*, Elsevier Scientific Publishing Company, United States, **1976**.

9. (a) Soto, M. A.; Kandel, R.; MacLachlan, M. J., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, 2021, 894; (b) Yam, V. W.-W.; Wong, K. M.-C.; Zhu, N., *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 6506.
10. Li, B.; Liang, Z.; Yan, H.; Li, Y., *Mol. Syst. Des. Eng.* **2020**, 5, 1578.
11. Magnus, G., *Pogg. Ann.* **1828**, 14, 239.
12. Yam, V. W.-W.; Au, V. K.-M.; Leung, S. Y.-L., *Chem. Rev.* **2015**, 115, 7589.
13. (a) Strassert, C. A.; Chien, C. H.; Galvez Lopez, M. D.; Kourkoulos, D.; Hertel, D.; Meerholz, K.; De Cola, L., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 946; (b) Yang, C.-L.; Wang, L.-N.; Yin, P.; Liu, J.; Chen, M.-X.; Yan, Q.-Q.; Wang, Z.-S.; Xu, S.-L.; Chu, S.-Q.; Cui, C., *Science* **2021**, 374, 459; (c) Chan, M. H.; Yam, V. W., *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 22805.
14. Allampally, N. K.; Strassert, C. A.; De Cola, L., *Dalton Trans.* **2012**, 41, 13132.
15. (a) Yam, V. W., *Nat. Chem.* **2010**, 2, 790; (b) Camerel, F.; Ziessel, R.; Donnio, B.; Bourgogne, C.; Guillon, D.; Schmutz, M.; Iacovita, C.; Bucher, J. P., *Angew. Chem., Int. Ed.* **2007**, 46, 2659.
16. (a) Puttock, E. V.; Walden, M. T.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, 367, 127; (b) Ma, B.; Djurovich, P. I.; Garon, S.; Alleyne, B.; Thompson, M. E., *Adv. Funct. Mater.* **2006**, 16, 2438.
17. Sung, H.; Ferlay, J.; Siegel, R. L.; Laversanne, M.; Soerjomataram, I.; Jemal, A.; Bray, F., *CA Cancer J. Clin.* **2021**, 71, 209.
18. Rosenberg, B.; Vancamp, L.; Trosko, J. E.; Mansour, V. H., *Nature* **1969**, 222, 385.
19. Calvert, A. H.; Harland, S. J.; Newell, D. R.; Siddik, Z. H.; Jones, A. C.; McElwain, T. J.; Raju, S.; Wiltshaw, E.; Smith, I. E.; Baker, J. M.; Peckham, M. J.; Harrap, K. R., *Cancer Chemother. Pharmacol.* **1982**, 9, 140.
20. Perego, P.; Robert, J., *Cancer Chemother. Pharmacol.* **2016**, 77, 5.
21. Hall, M. D.; Mellor, H. R.; Callaghan, R.; Hambley, T. W., *J. Med. Chem.* **2007**, 50, 3403.
22. (a) Lin, S.; Pan, H.; Li, L.; Liao, R.; Yu, S.; Zhao, Q.; Sun, H.; Huang, W., *Journal of Materials Chemistry C* **2019**, 7, 7893; (b) Pasha, S. S.; Das, P.; Rath, N. P.; Bandyopadhyay, D.; Jana, N. R.; Laskar, I. R., *Inorg. Chem. Commun.* **2016**, 67, 107; (c) Wu, P.; Wong, E. L.-M.; Ma, D.-L.; Tong, G. S.-M.; Ng, K.-M.; Che, C.-M., *Chem. Eur. J.* **2009**, 15, 3652.
23. (a) Wu, G.-Y.; Shi, X.; Phan, H.; Qu, H.; Hu, Y.-X.; Yin, G.-Q.; Zhao, X.-L.; Li, X.; Xu, L.; Yu, Q.; Yang, H.-B., *Nat. Commun.* **2020**, 11, 3178; (b) Rubino, S.; Busà, R.; Attanzio, A.; Alduina, R.; Di Stefano, V.; Girasolo, M. A.; Orecchio, S.; Tesoriere, L., *Bioorg. Med. Chem.* **2017**, 25, 2378; (c) Tahir, K.; Nazir, S.; Ahmad, A.; Li, B.; Khan, A. U.; Khan, Z. U. H.; Khan, F. U.; Khan, Q. U.; Khan, A.; Rahman, A. U., *J. Photochem. Photobiol.* **2017**, 166, 246; (d) Faihan, A. S.; Al-Jibori, S. A.; Hatshan, M. R.; Al-Janabi, A. S., *Polyhedron* **2022**, 212, 115602; (e) Odularu, A. T.; Ajibade, P. A.; Mbese, J. Z.; Oyedeji, O. O., *J. Chem.* **2019**, 2019, 5459461.
24. Bischoff, L.; Baudequin, C.; Hoarau, C.; Urriolabeitia, E. P., *Adv. Organomet. Chem.*, Elsevier, **2018**, 69, 73.
25. Lopes, J. M. S.; Barbosa Neto, N. M.; Araujo, P. T., *Springer Handbook of Inorganic Photochemistry*, Springer, **2022**, 131.
26. Sarto Polo, A.; Passalacqua Morelli Frin, K., *Springer Handbook of Inorganic Photochemistry*, Springer, **2022**, 27.
27. Mustroph, H., *Chemphyschem* **2016**, 17, 2616.
28. Kasha, M., *Discuss. Faraday Soc.* **1950**, 9, 14.
29. Murphy, L.; Williams, J. A. G., *Top. Organomet. Chem.* **2010**, 28, 75.
30. Czerwieńiec, R., *Springer Handbook of Inorganic Photochemistry*, Springer, **2022**, 1737.

31. (a) Baldo, M.; O'Brien, D.; Thompson, M.; Forrest, S., *Physical Review B* **1999**, *60*, 14422; (b) Yersin, H., *Transition Metal and Rare Earth Compounds*, ed. Springer, **2004**, 1.
32. (a) Wei, Q.; Fei, N.; Islam, A.; Lei, T.; Hong, L.; Peng, R.; Fan, X.; Chen, L.; Gao, P.; Ge, Z., *Adv. Optical Mater.* **2018**, *6*, 1800512; (b) Li, K.; Chen, Y.; Wang, J.; Yang, C., *Coord. Chem. Rev.* **2021**, *433*, 213755.
33. Romanov, A. S.; Yang, L.; Jones, S. T. E.; Di, D.; Morley, O. J.; Drummond, B. H.; Reponen, A. P. M.; Linnolahti, M.; Credgington, D.; Bochmann, M., *Chem. Mater.* **2019**, *31*, 3613.
34. Di, D.; Romanov, A. S.; Yang, L.; Richter, J. M.; Rivett, J. P.; Jones, S.; Thomas, T. H.; Abdi Jalebi, M.; Friend, R. H.; Linnolahti, M., *Science* **2017**, *356*, 159.
35. Li, G.; Chen, Q.; Zheng, J.; Wang, Q.; Zhan, F.; Lou, W.; Yang, Y.-F.; She, Y., *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 14349.
36. (a) Pander, P.; Zaytsev, A. V.; Sil, A.; Williams, J. A. G.; Lanoe, P.-H.; Kozhevnikov, V. N.; Dias, F. B., *J. Mater. Chem. C* **2021**, *9*, 10276; (b) Pander, P.; Daniels, R.; Zaytsev, A. V.; Horn, A.; Sil, A.; Penfold, T. J.; Williams, J. A. G.; Kozhevnikov, V. N.; Dias, F. B., *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 6172.
37. Gildea, L. F.; Williams, J. A. G., *Organic Light-Emitting Diodes (OLEDs)*, ed. A. Buckley, Woodhead Publishing, Cambridge, UK, **2013**, 77.
38. (a) Fuertes, S.; Chueca, A. J.; Arnal, L.; Martín, A.; Giovanella, U.; Botta, C.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 4829; (b) Na, H.; Canada, L. M.; Wen, Z.; J, I. C. W.; Teets, T. S., *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 6254.
39. Zhang, L.; van Eersel, H.; Bobbert, P. A.; Coehoorn, R., *Chem. Phys. Lett.* **2016**, *652*, 142.
40. Zhou, J.; Liu, Q.; Feng, W.; Sun, Y.; Li, F., *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 395.
41. Manna, M. K.; Shokri, S.; Wiederrecht, G. P.; Gosztola, D. J.; Ayitou, A. J., *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 5809.
42. Gray, V.; Moth-Poulsen, K.; Albinsson, B.; Abrahamsson, M., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, *362*, 54.
43. Dou, Q.; Jiang, L.; Kai, D.; Owh, C.; Loh, X. J., *Drug Discov.* **2017**, *22*, 1400.
44. Haque, A.; Xu, L.; Al-Balushi, R. A.; Al-Suti, M. K.; Ilmi, R.; Guo, Z.; Khan, M. S.; Wong, W. Y.; Raithby, P. R., *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 5547.
45. Perez, M. D.; Djurovich, P. I.; Hassan, A.; Cheng, G. Y.; Stewart, T. J.; Aznavour, K.; Bau, R.; Thompson, M. E., *Chem. Commun.* **2009**, 4215.
46. (a) Lazaro, A.; Cunha, C.; Bosque, R.; Pina, J.; Ward, J. S.; Truong, K. N.; Rissanen, K.; Lima, J. C.; Crespo, M.; Seixas de Melo, J. S.; Rodriguez, L., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 8220; (b) Ashen-Garry, D.; Selke, M., *Photochem. Photobiol.* **2014**, *90*, 257.
47. (a) Huang, H.; Banerjee, S.; Sadler, P. J., *ChemBiochem* **2018**, *19*, 1574; (b) Monsour, C. G.; Decosto, C. M.; Tafolla-Aguirre, B. J.; Morales, L. A.; Selke, M., *Photochem. Photobiol.* **2021**, *97*, 1219; (c) Shafikov, M. Z.; Suleymanova, A. F.; Kutta, R. J.; Gorski, A.; Kowalczyk, A.; Gapińska, M.; Kowalski, K.; Czerwieńiec, R., *J. Mater. Chem. C* **2022**, *10*, 5636; (d) Guan, R.; Xie, L.; Ji, L.; Chao, H., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2020**, *2020*, 3978.
48. Ravotto, L.; Ceroni, P., *Coord. Chem. Rev.* **2017**, *346*, 62.
49. Kwon, M. S.; Yu, Y.; Coburn, C.; Phillips, A. W.; Chung, K.; Shanker, A.; Jung, J.; Kim, G.; Pipe, K.; Forrest, S. R.; Youk, J. H.; Gierschner, J.; Kim, J., *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8947.
50. Liu, D., *Organometallics and Related Molecules for Energy Conversion*, Springer, **2015**, 241.
51. Loukova, G. V., *Springer Handbook of Inorganic Photochemistry*, Springer, **2022**, 459.

52. Zhang, G.; Kim, G.; Choi, W., *Energy Environ. Sci.* **2014**, *7*, 954.
53. (a) Juliá, F.; García-Legaz, M.-D.; Bautista, D.; González-Herrero, P., *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 7647; (b) Vivancos, A.; Poveda, D.; Munoz, A.; Moreno, J.; Bautista, D.; Gonzalez-Herrero, P., *Dalton Trans.* **2019**, *48*, 14367; (c) Vivancos, A.; Bautista, D.; Gonzalez-Herrero, P., *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 12033.
54. Vivancos, Á.; Bautista, D.; González-Herrero, P., *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 6014.
55. Juliá, F.; Aullón, G.; Bautista, D.; González-Herrero, P., *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 17346.
56. Chen, W. C.; Sukpattanacharoen, C.; Chan, W. H.; Huang, C. C.; Hsu, H. F.; Shen, D.; Hung, W. Y.; Kungwan, N.; Escudero, D.; Lee, C. S.; Chi, Y., *Adv. Funct. Mater.* **2020**, *30*, 2002494.
57. Saito, D.; Ogawa, T.; Yoshida, M.; Takayama, J.; Hiura, S.; Murayama, A.; Kobayashi, A.; Kato, M., *Angew. Chem.* **2020**, *132*, 18882.
58. (a) Kang, J.; Zaen, R.; Park, K. M.; Lee, K. H.; Lee, J. Y.; Kang, Y., *Adv. Optical Mater.* **2021**, *9*, 2101233; (b) Kidanu, H. T.; Chen, C.-T., *J. Mater. Chem. C* **2021**, *9*, 15470; (c) Huo, S.; Carroll, J.; Vezzu, D. A. K., *Asian J. Org. Chem.* **2015**, *4*, 1210.
59. Kim, D.; Brédas, J.-L., *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 11371.
60. (a) Sukpattanacharoen, C.; Kumar, P.; Chi, Y.; Kungwan, N.; Escudero, D., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 18253; (b) Eskelinen, T.; Buss, S.; Petrovskii, S. K.; Grachova, E. V.; Krause, M.; Kletsch, L.; Klein, A.; Strassert, C. A.; Koshevoy, I. O.; Hirva, P., *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 8777; (c) Tuong Ly, K.; Chen-Cheng, R.-W.; Lin, H.-W.; Shiau, Y.-J.; Liu, S.-H.; Chou, P.-T.; Tsao, C.-S.; Huang, Y.-C.; Chi, Y., *Nat. Photonics* **2016**, *11*, 63.
61. Hung, W.-Y.; Yu, C.-J.; Fu, L.-W.; Ko, C.-L.; Su, B.-K.; Liu, S.-H.; Kong, Y.-C.; Chou, P.-T.; Chi, Y., *Energy Fuels* **2021**, *35*, 19112.
62. (a) Wan, Q.; Li, D.; Zou, J.; Yan, T.; Zhu, R.; Xiao, K.; Yue, S.; Cui, X.; Weng, Y.; Che, C. M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, 202114323; (b) Salthouse, R. J.; Pander, P.; Yufit, D. S.; Dias, F. B.; Williams, J. A. G., *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 13600.
63. Grimme, S., *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2011**, *1*, 211.
64. Chen, W.-C.; Chou, P.-T.; Cheng, Y.-C., *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 10225.
65. Hong, Y.; Lam, J. W. Y.; Tang, B. Z., *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 5361.
66. Bhosale, R. S.; Aljabri, M.; La, D. D.; Bhosale, S. V.; Jones, L. A.; Bhosale, S. V., *Principles and Applications of Aggregation-Induced Emission*, Springer, **2019**, 223.
67. Luo, J.; Xie, Z.; Lam, J. W.; Cheng, L.; Chen, H.; Qiu, C.; Kwok, H. S.; Zhan, X.; Liu, Y.; Zhu, D.; Tang, B. Z., *Chem. Commun.* **2001**, 1740.
68. Moreno-Alcantar, G.; Aliprandi, A.; Rouquette, R.; Pesce, L.; Wurst, K.; Perego, C.; Bruggeller, P.; Pavan, G. M.; De Cola, L., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 5407.
69. Ni, J.; Zhang, X.; Wu, Y. H.; Zhang, L. Y.; Chen, Z. N., *Dyes Pigm.* **2011**, *17*, 1171.
70. Po, C.; Tam, A. Y.; Wong, K. M.; Yam, V. W., *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 12136.
71. (a) Zhang, X.; Chi, Z.; Zhang, Y.; Liu, S.; Xu, J., *J. Mat. Chem. C* **2013**, *1*, 3376; (b) Sagara, Y.; Yamane, S.; Mitani, M.; Weder, C.; Kato, T., *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 1073; (c) Xue, P.; Ding, J.; Wang, P.; Lu, R., *J. Mat. Chem. C* **2016**, *4*, 6688.
72. Williams, J. A., *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 1783.
73. Zhang, H.-H.; Yang, Q.-Y.; Qi, X.-W.; Sun, S.-S.; Li, B.-S.; Zhang, D.-S.; Zhang, X.-P.; Shi, Z.-F., *Inorganica Chim. Acta* **2021**, *523*, 120411.
74. Zhu, S.; Hu, J.; Zhai, S.; Wang, Y.; Xu, Z.; Liu, R.; Zhu, H., *Inorg. Chem. Front.* **2020**, *7*, 4677.
75. Ai, Y.; Li, Y.; Chan, M. H.; Xiao, G.; Zou, B.; Yam, V. W., *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 10659.
76. Bryant, M. J.; Skelton, J. M.; Hatcher, L. E.; Stubbs, C.; Madrid, E.; Pallipurath, A. R.; Thomas, L. H.; Woodall, C. H.; Christensen, J.; Fuertes, S.; Robinson, T. P.; Beavers, C.



- M.; Teat, S. J.; Warren, M. R.; Pradaux-Caggiano, F.; Walsh, A.; Marken, F.; Carbery, D. R.; Parker, S. C.; McKeown, N. B.; Malpass-Evans, R.; Carta, M.; Raithby, P. R., *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 1800.
77. Kobayashi, A.; Fukuzawa, Y.; Chang, H. C.; Kato, M., *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 7508.
78. Soto, M. A.; Carta, V.; Andrews, R. J.; Chaudhry, M. T.; MacLachlan, M. J., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 10348.
79. Ma, Y.; Chen, K.; Lu, J.; Shen, J.; Ma, C.; Liu, S.; Zhao, Q.; Wong, W. Y., *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 7510.
80. Tam, A. Y.-Y.; Wong, K. M.-C.; Yam, V. W.-W., *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 6253.
81. (a) Liu, L.; Wang, X.; Wang, N.; Peng, T.; Wang, S., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 9160; (b) Cuerva, C.; Campo, J. A.; Cano, M.; Lodeiro, C., *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 12046; (c) Chakraborty, C.; Rana, U.; Moriyama, S.; Higuchi, M., *ACS Applied Polymer Materials* **2020**, *2*, 4149.
82. Ni, J.; Liu, G.; Su, M.; Zheng, W.; Zhang, J., *Dyes Pigm.* **2020**, *180*, 108451.
83. Su, M.; Liu, S.; Zhang, J.; Meng, C.; Ni, J., *Dyes Pigm.* **2022**, *200*, 110139.
84. Shigeta, Y.; Kobayashi, A.; Ohba, T.; Yoshida, M.; Matsumoto, T.; Chang, H. C.; Kato, M., *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 2682.
85. Maestri, M.; Sandrini, D.; Balzani, V.; Chassot, L.; Jolliet, P.; von Zelewsky, A., *Chem. Phys. Lett.* **1985**, *122*, 375.
86. Barigelletti, F.; Sandrini, D.; Maestri, M.; Balzani, V.; von Zelewsky, A.; Chassot, L.; Jolliet, P.; Maeder, U., *Inorg. Chem.* **1988**, *27*, 3644.
87. Chi, Y.; Chou, P. T., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 638.
88. Tang, M.-C.; Chan, A. K.-W.; Chan, M.-Y.; Yam, V. W.-W., *Photoluminescent Materials and Electroluminescent Devices*, eds. N. Armaroli and H. J. Bolink, Springer International Publishing, Cham, **2017**, 67.
89. Dixon, I. M.; Collin, J. P.; Sauvage, J. P.; Flamigni, L.; Encinas Perea, S.; Barigelletti, F., *Chem. Soc. Rev.* **2000**, *29*, 385.
90. Cho, J.-Y.; Suponitsky, K. Y.; Li, J.; Timofeeva, T. V.; Barlow, S.; Marder, S. R., *J. Organomet. Chem.* **2005**, *690*, 4090.
91. Mdleleni, M. M.; Bridgewater, J. S.; Watts, R. J.; Ford, P. C., *Inorg. Chem.* **1995**, *34*, 2334.
92. (a) Balashev, K. P.; Puzyk, M. V.; Kotlyar, V. S.; Kulikova, M. V., *Coord. Chem. Rev.* **1997**, *159*, 109; (b) Jenkins, D. M.; Senn, J. F.; Bernhard, S., *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 8077.
93. (a) Niedermair, F.; Waich, K.; Kappaun, S.; Mayr, T.; Trimmel, G.; Mereiter, K.; Slugovc, C., *Inorg. Chim. Acta* **2007**, *360*, 2767; (b) Berenguer, J. R.; Díez, A.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Ruiz, S.; Sánchez, S., *Organometallics* **2011**, *30*, 5776.
94. (a) Brooks, J.; Babayan, Y.; Lamansky, S.; Djurovich, P. I.; Tsyba, I.; Bau, R.; Thompson, M. E., *Inorg. Chem.* **2002**, *41*, 3055; (b) Bossi, A.; Rausch, A. F.; Leitl, M. J.; Czerwieniec, R.; Whited, M. T.; Djurovich, P. I.; Yersin, H.; Thompson, M. E., *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 12403.
95. (a) Tan, G.; Chen, S.; Siu, C.-H.; Langlois, A.; Qiu, Y.; Fan, H.; Ho, C.-L.; Harvey, P. D.; Lo, Y. H.; Liu, L.; Wong, W.-Y., *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4*, 6016; (b) Wang, D.; Chen, X.; Yang, H.; Zhong, D.; Liu, B.; Yang, X.; Yue, L.; Zhou, G.; Ma, M.; Wu, Z., *Dalton Trans.* **2020**, *49*, 15633; (c) Haque, A.; El Moll, H.; Alenezi, K. M.; Khan, M. S.; Wong, W. Y., *Materials* **2021**, *14*, 4236.
96. Zeng, W.; Sun, M. J.; Gong, Z. L.; Shao, J. Y.; Zhong, Y. W.; Yao, J., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 11316.
97. Di, L.; Xia, Z.; Wang, H.; Xing, Y.; Yang, Z., *Sens. Actuators B Chem.* **2021**, *326*, 128987.

98. Chang, S. Y.; Cheng, Y. M.; Chi, Y.; Lin, Y. C.; Jiang, C. M.; Lee, G. H.; Chou, P. T., *Dalton Trans.* **2008**, 6901.
99. Ebina, M.; Kobayashi, A.; Ogawa, T.; Yoshida, M.; Kato, M., *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 8878.
100. Ohno, K.; Shiraishi, K.; Sugaya, T.; Nagasawa, A.; Fujihara, T., *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 3420.
101. Yoshida, M.; Kato, M., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, *355*, 101.
102. Su, N.; Meng, F.; Chen, J.; Wang, Y.; Tan, H.; Su, S.; Zhu, W., *Dyes Pigm.* **2016**, *128*, 68.
103. (a) Roy, S.; Lopez, A. A.; Yarnell, J. E.; Castellano, F. N., *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 121; (b) Shahsavari, H. R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Niazi, M.; Kazemi, S. H.; Abedanzadeh, S.; Barazandeh, M.; Halvagar, M. R., *New J. Chem.* **2019**, *43*, 7716.
104. Solomatina, A. I.; Chelushkin, P. S.; Abakumova, T. O.; Zhemkov, V. A.; Kim, M.; Bezprozvanny, I.; Gurzhiy, V. V.; Melnikov, A. S.; Anufrikov, Y. A.; Koshevoy, I. O.; Su, S. H.; Chou, P. T.; Tunik, S. P., *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 204.
105. (a) Sicilia, V.; Fuertes, S.; Martín, A.; Palacios, A., *Organometallics* **2013**, *32*, 4092; (b) Solomatina, A. I.; Aleksandrova, I. O.; Karttunen, A. J.; Tunik, S. P.; Koshevoy, I. O., *Dalton Trans.* **2017**, *46*, 3895.
106. Sutton, G. D.; Olumba, M. E.; Nguyen, Y. H.; Teets, T. S., *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 17851.
107. (a) Ugi, I., *Isonitrile chemistry*, Elsevier, **2012**; (b) Mukhopadhyay, S.; Patro, A. G.; Vadavi, R. S.; Nembenna, S., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, *2022*, e202200469.
108. Galli, U.; Tron, G. C.; Purghè, B.; Grosa, G.; Aprile, S., *Chem. Res. Toxicol.* **2020**, *33*, 955.
109. Massarotti, A.; Brunelli, F.; Aprile, S.; Giustiniano, M.; Tron, G. C., *Chem. Rev.* **2021**, *121*, 10742.
110. Knorn, M.; Lutsker, E.; Reiser, O., *Chem. Soc. Rev.* **2020**, *49*, 7730.
111. Lieke, W., *Justus Liebigs Annalen der Chemie* **1859**, *112*, 316.
112. Gautier, A., *Justus Liebigs Annalen der Chemie* **1867**, *142*, 289.
113. Malatesta, L., *Prog. Inorg. Chem.* **1959**, 283.
114. Hammick, D. L.; New, R. C.; Sidgwick, N. V.; Sutton, L. E., *J. Chem. Soc.* **1930**, 1876.
115. Wang, B.; Gao, M.; Uosaki, K.; Taketsugu, T., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 12200.
116. Mironov, M. A., *Isocyanide Chemistry* **2012**, 35.
117. (a) Wang, H.; Wang, W.; Jin, W. J., *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 5072; (b) Mikherdov, A. S.; Katkova, S. A.; Novikov, A. S.; Efremova, M. M.; Reutskaya, E. Y.; Kinzhalov, M. A., *CrystEngComm* **2020**, *22*, 1154.
118. Lai, S.-W.; Chan, M. C.-W.; Cheung, K.-K.; Che, C.-M., *Organometallics* **1999**, *18*, 3327.
119. (a) Wan, Q.; Xiao, X. S.; To, W. P.; Lu, W.; Chen, Y.; Low, K. H.; Che, C. M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 17189; (b) Xiao, X.-S.; Lu, W.; Che, C.-M., *Chem. Sci.* **2014**, *5*, 2482; (c) Chen, Y.; Lu, W.; Che, C.-M., *Organometallics* **2013**, *32*, 350; (d) Lu, W.; Chen, Y.; Roy, V. A.; Chui, S. S.; Che, C. M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 7621; (e) Lai, S. W.; Lam, H. W.; Lu, W.; Cheung, K. K.; Che, C. M., *Organometallics* **2002**, *21*, 226; (f) Yuen, M.-Y.; Roy, V. A. L.; Lu, W.; Kui, S. C. F.; Tong, G. S. M.; So, M.-H.; Chui, S. S.-Y.; Muccini, M.; Ning, J. Q.; Xu, S. J.; Che, C.-M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 9895; (g) Wei, L.; Chan, M. C. W.; Cheung, K. K.; Che, C. M., *Organometallics* **2001**, *20*, 2477.
120. Wang, P.; Leung, C. H.; Ma, D. L.; Sun, R. W.; Yan, S. C.; Chen, Q. S.; Che, C. M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 2554.

121. Liu, J.; Leung, C. H.; Chow, A. L.; Sun, R. W.; Yan, S. C.; Che, C. M., *Chem. Commun.* **2011**, 47, 719.
122. Díez, A.; Forniés, J.; Fuertes, S.; Larraz, C.; López, J. A.; Lalinde, E.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Organometallics* **2009**, 28, 1705.
123. Díez, A.; Forniés, J.; Larraz, C.; Lalinde, E.; López, J. A.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.* **2010**, 49, 3239.
124. Forniés, J.; Fuertes, S.; Larraz, C.; Martín, A.; Sicilia, V.; Tsipis, A. C., *Organometallics* **2012**, 31, 2729.
125. (a) Forniés, J.; Sicilia, V.; Larraz, C.; Camerano, J. A.; Martín, A.; Casas, J. M.; Tsipis, A. C., *Organometallics* **2010**, 29, 1396; (b) Forniés, J.; Sicilia, V.; Borja, P.; Casas, J. M.; Díez, A.; Lalinde, E.; Larraz, C.; Martín, A.; Moreno, M. T., *Chem. Asian J.* **2012**, 7, 2813; (c) Tritto, E.; Chico, R.; Ortega, J.; Folcia, C. L.; Etxebarria, J.; Coco, S.; Espinet, P., *J. Mat. Chem. C* **2015**, 3, 9385; (d) Katlenok, E. A.; Smirnov, S. N.; Ivanov, A. Y.; Makarenko, S. V.; Balashev, K. P., *Opt. Spectrosc.* **2017**, 122, 426.
126. (a) Dobrynin, M. V.; Sokolova, E. V.; Kinzhalov, M. A.; Smirnov, A. S.; Starova, G. L.; Kukushkin, V. Y.; Islamova, R. M., *ACS Appl. Polym. Mater.* **2021**, 3, 857; (b) Katkova, S. A.; Luzyanin, K. V.; Novikov, A. S.; Kinzhalov, M. A., *New J. Chem.* **2021**, 45, 2948; (c) Sokolova, E. V.; Kinzhalov, M. A.; Smirnov, A. S.; Cheranyova, A. M.; Ivanov, D. M.; Kukushkin, V. Y.; Bokach, N. A., *ACS Omega* **2022**, 7, 34454; (d) Katkova, S. A.; Mikhredov, A. S.; Sokolova, E. V.; Novikov, A. S.; Starova, G. L.; Kinzhalov, M. A., *J. Mol. Struct.* **2022**, 1253, 132230.
127. Baya, M.; Belío, Ú.; Forniés, J.; Martín, A.; Perálvarez, M.; Sicilia, V., *Inorg. Chim. Acta* **2015**, 424, 136.
128. Shahsavari, H. R.; Babadi Aghakhanpour, R.; Hossein-Abadi, M.; Golbon Haghghi, M.; Notash, B.; Fereidoonzhad, M., *New J. Chem.* **2017**, 41, 15347.
129. Pombeiro, A. J., *Inorg. Chem. Commun.* **2001**, 4, 585.
130. Luzyanin, K. V.; Pombeiro, A. J., *Isocyanide chemistry* **2012**, 531.
131. (a) Cutillas, N.; Yellol, G. S.; de Haro, C.; Vicente, C.; Rodríguez, V.; Ruiz, J., *Coord. Chem. Rev.* **2013**, 257, 2784; (b) Bellemin-Laponnaz, S., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2020**, 2020, 10.
132. Boyarskiy, V. P.; Luzyanin, K. V.; Kukushkin, V. Y., *Coord. Chem. Rev.* **2012**, 256, 2029.
133. Alder, R. W.; Allen, P. R.; Murray, M.; Orpen, A. G., *Angew. Chem. Int. Ed.* **1996**, 35, 1121.
134. Maxim Tafipolsky, W. S., Karl Öfele, Georg Artus, Bjørn Pedersen, Wolfgang A. Herrmann, G. Sean McGrady, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 5865.
135. Biasiolo, L.; Ciancaleoni, G.; Belpassi, L.; Bistoni, G.; Macchioni, A.; Tarantelli, F.; Zuccaccia, D., *Catal. Sci. Technol.* **2015**, 5, 1558.
136. Kinzhalov, M. A.; Luzyanin, K. V., *Coord. Chem. Rev.* **2019**, 399, 213014.
137. Kinzhalov, M. A.; Luzyanin, K. V., *Russ. J. Inorg. Chem.* **2022**, 67, 48.
138. (a) Vignolle, J.; Cattoën, X.; Bourissou, D., *Chem. Rev.* **2009**, 109, 3333; (b) Boyarskiy, V. P.; Bokach, N. A.; Luzyanin, K. V.; Kukushkin, V. Y., *Chem. Rev.* **2015**, 115, 2698.
139. Michelin, R. A.; Pombeiro, A. J. L.; Guedes da Silva, M. F. C., *Coord. Chem. Rev.* **2001**, 218, 75.
140. Engelman, K. L.; White, P. S.; Templeton, J. L., *Organometallics* **2010**, 29, 4943.
141. Chugaev, L.; Grigorizeva, M., *J. Russ. Chem. Soc.* **1915**, 47, 776.
142. Burke, A.; Balch, A. L.; Enemark, J. H., *J. Am. Chem. Soc.* **1970**, 92, 2555.
143. Strassner, T., *Acc. Chem. Res.* **2016**, 49, 2680.
144. Kinzhalov, M. A.; Grachova, E. V.; Luzyanin, K. V., *Inorg. Chem. Front.* **2022**, 9, 417.

145. Lai, S.-W.; Chan, M. C. W.; Wang, Y.; Lam, H.-W.; Peng, S.-M.; Che, C.-M., *J. Organomet. Chem.* **2001**, 617-618, 133.
146. Wu, Y.; Wen, Z.; Wu, J. I.; Teets, T. S., *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 16028.
147. Nguyen, Y. H.; Soares, J. V.; Nguyen, S. H.; Wu, Y.; Wu, J. I.; Teets, T. S., *Inorg. Chem.* **2022**, 61, 8498.
148. Solomatina, A. I.; Krupenya, D. V.; Gurzhiy, V. V.; Zlatkin, I.; Pushkarev, A. P.; Bochkarev, M. N.; Besley, N. A.; Bichoutskaia, E.; Tunik, S. P., *Dalton Trans.* **2015**, 44, 7152.
149. Uesugi, H.; Tsukuda, T.; Takao, K.; Tsubomura, T., *Dalton Trans.* **2013**, 42, 7396.
150. Hu, J. J.; Bai, S.-Q.; Yeh, H. H.; Young, D. J.; Chi, Y.; Hor, T. S. A., *Dalton Trans.* **2011**, 40, 4402.
151. Na, H.; Maity, A.; Morshed, R.; Teets, T. S., *Organometallics* **2017**, 36, 2965.
152. Na, H.; Teets, T. S., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 6353.
153. Eremina, A. A.; Kinzhalov, M. A.; Katlenok, E. A.; Smirnov, A. S.; Andrusenko, E. V.; Pidko, E. A.; Suslonov, V. V.; Luzyanin, K. V., *Inorg. Chem.* **2020**, 59, 2209.
154. Lai, S.-W.; Chan, M. C.-W.; Cheung, K.-K.; Che, C.-M., *Organometallics* **1999**, 18, 3327.
155. Nast, R., *Angew. Chem.* **1960**, 72, 26.
156. Long, N. J.; Williams, C. K., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, 42, 2586.
157. (a) Shi, E.; Gao, Z.; Yuan, M.; Wang, X.; Wang, F., *Polym. Chem.* **2015**, 6, 5575; (b) Zhou, G.-J.; Wong, W.-Y., *Chem. Soc. Rev.* **2011**, 40, 2541.
158. (a) Cerrada, E.; Fernández-Moreira, V.; Gimeno, M. C., *Adv. Organomet. Chem.* **2019**, 71, 227; (b) Haque, A.; Al-Balushi, R. A.; Khan, M. S., *J. Organomet. Chem.* **2019**, 897, 95.
159. (a) Zheng, Q.; Schneider, J. F.; Amini, H.; Hampel, F.; Gladysz, J. A., *Dalton Trans.* **2019**, 48, 5800; (b) Díez, A.; Fernandez, J.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Sánchez, S., *Dalton Trans.* **2008**, 4926; (c) Cooper, T. M.; Haley, J. E.; Stewart, D. J.; Long, S.; Krein, D. M.; Burke, A. R.; Arias, E.; Moggio, I.; Turlakov, G.; Ziolo, R. F.; Biler, M.; Linares, M.; Norman, P., *Adv. Funct. Mater.* **2020**, 30, 1910562; (d) Gottwald, D.; Geidel, C.; Ruffer, T.; Schaarschmidt, D.; Lang, H., *J. Organomet. Chem.* **2022**, 967, 122350; (e) Boixel, J.; Guerchais, V.; Le Bozec, H.; Jacquemin, D.; Amar, A.; Boucekkine, A.; Colombo, A.; Dragonetti, C.; Marinotto, D.; Roberto, D.; Righetto, S.; De Angelis, R., *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 5367.
160. (a) Xiao, X.-S.; Kwong, W.-L.; Guan, X.; Yang, C.; Lu, W.; Che, C.-M., *Chem. Eur. J.* **2013**, 19, 9457; (b) Cadierno, V.; Gimeno, J., *Chem. Rev.* **2009**, 109, 3512.
161. Buschbeck, R.; Low, P. J.; Lang, H., *Coord. Chem. Rev.* **2011**, 255, 241.
162. Han, Y.; Gao, Z.; Wang, C.; Zhong, R.; Wang, F., *Coord. Chem. Rev.* **2020**, 414, 213300.
163. Chan, C. W.; Cheng, L. K.; Che, C. M., *Coord. Chem. Rev.* **1994**, 132, 87.
164. Tam, A. Y.; Wong, K. M.; Zhu, N.; Wang, G.; Yam, V. W., *Langmuir* **2009**, 25, 8685.
165. Wang, W.; Yang, H.-B., *Chem. Commun.* **2014**, 50, 5171.
166. Goeb, S.; Prusakova, V.; Wang, X.; Vézinat, A.; Sallé, M.; Castellano, F. N., *Chem. Commun.* **2011**, 47, 4397.
167. Ruiz, S., Tesis Doctoral. Universidad de La Rioja, **2014**.
168. Díez, Á., Tesis Doctoral. Universidad de La Rioja, **2010**.
169. (a) Berenguer, J. R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Coord. Chem. Rev.* **2010**, 254, 832; (b) Díez, A.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Coord. Chem. Rev.* **2011**, 255, 2426; (c) Berenguer, J. R.; Fernández, J.; Gil, B.; Lalinde, E.; Sánchez, S., *Inorg. Chem.* **2010**, 49, 4232; (d) Fresta, E.; Fernández-Cestau, J.; Gil, B.; Montaña, P.; Berenguer, J. R.; Moreno, M. T.; Coto, P. B.; Lalinde, E.; Costa, R. D., *Adv. Optical Mater.* **2020**, 8, 1901126; (e) Díez,

- Á.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Ruiz, S., *Organometallics* **2016**, *35*, 1735; (f) Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Ruiz, S.; Sánchez, S., *Inorganics* **2014**, *2*, 565.
170. Fernández, S.; Forniés, J.; Gil, B.; Gómez, J.; Lalinde, E., *Dalton Trans.* **2003**, 822.
171. Berenguer, J. R.; Díez, A.; Fernández, J.; Forniés, J.; García, A.; Gil, B.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 7703.
172. Forniés, J.; Fuertes, S.; Martín, A.; Sicilia, V.; Gil, B.; Lalinde, E., *Dalton Trans.* **2009**, 2224.
173. Osakada, K.; Yamamoto, T., *Coord. Chem. Rev.* **2000**, *198*, 379.
174. Díez, A.; García, A.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2009**, 3060.
175. Berenguer, J. R.; Díez, A.; García, A.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Sánchez, S.; Torroba, J., *Organometallics* **2011**, *30*, 1646.
176. Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Ruiz, S.; Sánchez, S., *Organometallics* **2014**, *33*, 3078.
177. Díez, A.; Forniés, J.; García, A.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 2443.
178. Solomatina, A. I.; Baigildin, V. A.; Zhukovsky, D. D.; Krupenya, D. V.; Koshel, E. I.; Shcheslavskiy, V. I.; Tunik, S. P.; Chelushkin, P. S., *Colloid Polym. Sci.* **2019**, *297*, 325.
179. (a) Yang, X.; Yue, L.; Yu, Y.; Liu, B.; Dang, J.; Sun, Y.; Zhou, G.; Wu, Z.; Wong, W. Y., *Adv. Opt. Mater.* **2020**, *8*, 2000079; (b) Sun, Y.; Zhu, C.; Liu, S.; Wang, W.; Chen, X.; Zhou, G.; Yang, X.; Wong, W.-Y., *Chem. Eng. J.* **2022**, *449*, 137457.
180. Rosenberg, B.; Van Camp, L.; Krigas, T., *Nature* **1965**, *205*, 698.
181. Wiltshaw, E., *Platin. Met. Rev.* **1979**, *23*, 90.
182. Wheate, N. J.; Walker, S.; Craig, G. E.; Oun, R., *Dalton Trans.* **2010**, *39*, 8113.
183. Crichton, R., *Biological Inorganic Chemistry*, ed. R. Crichton, Academic Press, **2019**, 599.
184. Peng, K.; Liang, B.-B.; Liu, W.; Mao, Z.-W., *Coord. Chem. Rev.* **2021**, *449*, 214210.
185. Gianferrara, T.; Bratsos, I.; Alessio, E., *Dalton Trans.* **2009**, 7588.
186. (a) Griffith, D.; P Parker, J.; J Marmion, C., *Anticancer Agents Med. Chem.* **2010**, *10*, 354; (b) Johnstone, T. C.; Suntharalingam, K.; Lippard, S. J., *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 3436; (c) Lo, K. K.-W.; Li, S. P.-Y., *RSC Adv.* **2014**, *4*, 10560.
187. Xu, G.-X.; Mak, E. C.-L.; Lo, K. K.-W., *Inorg. Chem. Front.* **2021**, *8*, 4553.
188. (a) Algorri, J. F.; Ochoa, M.; Roldan-Varona, P.; Rodriguez-Cobo, L.; Lopez-Higuera, J. M., *Cancers* **2021**, *13*, 3484; (b) Lara, R.; Millan, G.; Moreno, M. T.; Lalinde, E.; Alfaro-Arnedo, E.; Lopez, I. P.; Larrayoz, I. M.; Pichel, J. G., *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 15757; (c) Imran, M.; Ayub, W.; Butler, I. S., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, *376*, 405.
189. Mauro, M.; De Paoli, G.; Otter, M.; Donghi, D.; D'Alfonso, G.; De Cola, L., *Dalton Trans.* **2011**, *40*, 12106.
190. (a) Septiadi, D.; Aliprandi, A.; Mauro, M.; De Cola, L., *RSC Adv.* **2014**, *4*, 25709; (b) Zhao, Q.; Huang, C.; Li, F., *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 2508; (c) Tsai, J. L.; Zou, T.; Liu, J.; Chen, T.; Chan, A. O.; Yang, C.; Lok, C. N.; Che, C. M., *Chem. Sci.* **2015**, *6*, 3823.
191. Tong, K.-C.; Hu, D.; Wan, P.-K.; Lok, C.-N.; Che, C.-M., *Adv. Inorg. Chem.*, Elsevier, **2020**, *75*, 87.
192. Mitra, K., *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 19157.
193. Niu, L.; Ren, G.; Hou, T.; Shen, X.; Zhu, D., *Inorg. Chem. Commun.* **2021**, *130*, 108737.
194. Dasari, S.; Bernard Tchounwou, P., *Eur. J. Pharmacol.* **2014**, *740*, 364.
195. (a) Okada, T.; El-Mehasseb, I. M.; Kodaka, M.; Tomohiro, T.; Okamoto, K.-i.; Okuno, H., *J. Med. Chem.* **2001**, *44*, 4661; (b) El-Mehasseb, I. M.; Kodaka, M.; Okada, T.; Tomohiro, T.; Okamoto, K.-i.; Okuno, H., *J. Inorg. Biochem.* **2001**, *84*, 157.

196. Edwards, G. L.; Black, D. S. C.; Deacon, G. B.; Wakelin, L. P., *Can. J. Chem.* **2005**, *83*, 980.
197. Ruiz, J.; Vicente, C.; de Haro, C.; Espinosa, A., *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 2151.
198. (a) Liu, J.; Sun, R. W.; Leung, C. H.; Lok, C. N.; Che, C. M., *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 230; (b) Zou, T.; Liu, J.; Lum, C. T.; Ma, C.; Chan, R. C.; Lok, C. N.; Kwok, W. M.; Che, C. M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 10119.
199. Ping, W.; Chung-Hang, L.; Dik-Lung, M.; Wei, L.; Chi-Ming, C., *Chem. Asian J.* **2010**, *5*, 2271.
200. Ramu, V.; Gautam, S.; Garai, A.; Kondaiah, P.; Chakravarty, A. R., *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 1717.
201. (a) Zou, T.; Hung, F.-F.; Yang, C.; Che, C.-M., *Luminescent and Photoactive Transition Metal Complexes as Biomolecular Probes and Cellular Reagents*, Springer, Berlin, Heidelberg, **2015**, 181; (b) Tong, K.-C.; Hu, D.; Wan, P.-K.; Lok, C.-N.; Che, C.-M., *Adv. Inorg. Chem.*, eds. P. J. Sadler and R. van Eldik, Academic Press, **2020**, *75*, 87; (c) Zhao, S.; Yang, Z.; Jiang, G.; Huang, S.; Bian, M.; Lu, Y.; Liu, W., *Coord. Chem. Rev.* **2021**, *449*, 214217; (d) Gautier, A.; Cisnetti, F., *Metallomics* **2012**, *4*, 23.
202. Noffke, A. L.; Habtemariam, A.; Pizarro, A. M.; Sadler, P. J., *Chem. Commun.* **2012**, *48*, 5219.
203. (a) Serebryanskaya, T. V.; Kinzhalov, M. A.; Bakulev, V.; Alekseev, G.; Andreeva, A.; Gushchin, P. V.; Protas, A. V.; Smirnov, A. S.; Panikorovskii, T. L.; Lippmann, P.; Ott, I.; Verbilo, C. M.; Zuraev, A. V.; Bunev, A. S.; Boyarskiy, V. P.; Kasyanenko, N. A., *New J. Chem.* **2020**, *44*, 5762; (b) Boyarskii, V. P.; Mikherdov, A. S.; Baikov, S. V.; Savko, P. Y.; Suezov, R. V.; Trifonov, R. E., *Pharm. Chem. J.* **2021**, *55*, 130.
204. (a) Montanel-Pérez, S.; Elizalde, R.; Laguna, A.; Villacampa, M. D.; Gimeno, M. C., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2019**, *2019*, 4273; (b) Bertrand, B.; Romanov, A. S.; Brooks, M.; Davis, J.; Schmidt, C.; Ott, I.; O'Connell, M.; Bochmann, M., *Dalton Trans.* **2017**, *46*, 15875; (c) Montanel-Perez, S.; Herrera, R. P.; Laguna, A.; Villacampa, M. D.; Gimeno, M. C., *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 9052.
205. Alves, G.; Morel, L.; El-Ghozzi, M.; Avignant, D.; Legeret, B.; Nauton, L.; Cisnetti, F.; Gautier, A., *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 7830.
206. Afanasenko, A. M.; Chulkova, T. G.; Boyarskaya, I. A.; Islamova, R. M.; Legin, A. A.; Keppler, B. K.; Selivanov, S. I.; Vereshchagin, A. N.; Elinson, M. N.; Haukka, M., *J. Organomet. Chem.* **2020**, *923*, 121435.
207. (a) Millán, G.; Giménez, N.; Lara, R.; Berenguer, J. R.; Moreno, M. T.; Lalinde, E.; Alfaro-Arnedo, E.; López, I. P.; Piñeiro-Hermida, S.; Pichel, J. G., *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 1657; (b) Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Lara, R.; López, I. P.; Alfaro-Arnedo, E.; Pichel, J. G.; Piñeiro-Hermida, S., *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 2440; (c) Berenguer, J. R.; Pichel, J. G.; Giménez, N.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Piñeiro-Hermida, S., *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 18839.


## • References Chapter 1:

- (a) Xu, H.; Chen, R.; Sun, Q.; Lai, W.; Su, Q.; Huang, W.; Liu, X., *Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 3259; (b) Yersin, H., *Highly Efficient OLEDs with Phosphorescent Materials*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2008**; (c) Fleetham, T.; Li, G.; Li, J., *Adv. Mater.*, **2017**, *29*, 1601861; (d) Strassner, T., *Acc. Chem. Res.*, **2016**, *49*, 2680; (e) Huo, S.; Carroll, J.; Vezzu, D. A. K., *Asian J. Org. Chem.*, **2015**, *4*, 1210; (f) Choy, W. C. H.; Chan, W. K.; Yuan, Y., *Adv. Mater.*, **2014**, *26*, 5368; (g) Zhou, G.; Wong, W.-Y.; Yang, X., *Chem. Asian J.*, **2011**, *6*, 1706; (h) Xiao, L.; Chen, Z.; Qu, B.; Luo, J.; Kong, S.; Gong, Q.; Kido, J., *Adv. Mat.*, **2011**, *23*, 926; (i) Farinola, G. M.; Ragni, R., *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, *40*, 3467; (j) Kalinowski, J.; Fattori, V.; Cocchi, M.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.*, **2011**, *255*, 2401; (k) Williams, J. A. G.; Develay, S.; Rochester, D. L.; Murphy, L., *Coord. Chem. Rev.*, **2008**, *252*, 2596; (l) Murphy, L.; Williams, J. A. G., *Top. Organomet. Chem.*, **2010**, *28*, 75; (m) Chi, Y.; Chou, P. T., *Chem. Soc. Rev.*, **2010**, *39*, 638; (n) Cebrián, C.; Mauro, M., *Beilstein J. Org. Chem.*, **2018**, *14*, 1459.
- (a) Omae, I., *J. Organomet. Chem.*, **2016**, *823*, 50; (b) Wenger, O. S., *Chem. Rev.*, **2013**, *113*, 3686; (c) Ma, D.-L.; Ma, V. P.-Y.; Chan, D. S.-H.; Leung, K.-H.; He, H.-Z.; Leung, C.-H., *Coord. Chem. Rev.*, **2012**, *256*, 3087; (d) Zhao, Q.; Li, F.; Huang, C., *Chem. Soc. Rev.*, **2010**, *39*, 3007.
- (a) Li, K.; Ming Tong, G. S.; Wan, Q.; Cheng, G.; Tong, W.-Y.; Ang, W.-H.; Kwong, W.-L.; Che, C.-M., *Chem. Sci.*, **2016**, *7*, 1653; (b) Mauro, M.; Aliprandi, A.; Septiadi, D.; Kehr, N. S.; De Cola, L., *Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 4144; (c) Lo, K. K.-W.; Tso, K. K.-S., *Inorg. Chem. Front.*, **2015**, *2*, 510; (d) Cutillas, N.; Yellol, G. S.; de Haro, C.; Vicente, C.; Rodriguez, V.; Ruiz, J., *Coord. Chem. Rev.*, **2013**, *257*, 2784; (e) Thorp-Greenwood, F. L.; Balasingham, R. G.; Coogan, M. P., *J. Organomet. Chem.*, **2012**, *714*, 12; (f) Baggaley, E.; Weinstein, J. A.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.*, **2012**, *256*, 1762; (g) Zhao, Q.; Huang, C.; Li, F., *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, *40*, 2508; (h) Lo, K. K. W.; Choi, A. W. T.; Law, W. H. T., *Dalton Trans.*, **2012**, *41*, 6021.
- (a) Yang, X.; Yao, C.; Zhou, G., *Platinum Met. Rev.*, **2013**, *57*, 2; (b) Yam, V. W.-W.; Au, V. K.-M.; Leung, S. Y.-L., *Chem. Rev.*, **2015**, *115*, 7589; (c) Chan, A. K.-W.; Ng, M.; Wong, Y.-C.; Chan, M.-Y.; Wong, W.-T.; Yam, V. W.-W., *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 10750; (d) Zhou, G.; Wang, Q.; Wang, X.; Ho, C.-L.; Wong, W.-Y.; Ma, D.; Wang, L.; Lin, Z., *J. Mater. Chem.*, **2010**, *20*, 7472.
- Connick, W. B.; Marsh, R. E.; Schaefer, W. P.; Gray, H. B., *Inorg. Chem.*, **1997**, *36*, 913.
- (a) Puttock, E. V.; Walden, M. T.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.*, **2018**, *367*, 127; (b) Yoshida, M.; Kato, M., *Coord. Chem. Rev.*, **2018**, *355*, 101; (c) Aliprandi, A.; Genovese, D.; Mauro, M.; Cola, L. D., *Chem. Lett.*, **2015**, *44*, 1152; (d) Gray, H. B.; Zálíš, S.; Vlček, A., *Coord. Chem. Rev.*, **2017**, *345*, 297; (e) Kim, D.; Brédas, J.-L., *J. Am. Chem. Soc.*, **2009**, *131*, 11371.
- (a) Birks, J. B., *Photophysic of Aromatic Molecules*, Wiley, London, **1970**; (b) Perez, M. D.; Djurovich, P. I.; Hassan, A.; Cheng, G. Y.; Stewart, T. J.; Aznavour, K.; Bau, R.; Thompson, M. E., *Chem. Commun.*, **2009**, 4215; (c) Rossi, E.; Colombo, A.; Dragonetti, C.; Roberto, D.; Ugo, R.; Valore, A.; Falcicola, L.; Brulatti, P.; Cocchi, M.; Williams, J. A. G., *J. Mater. Chem.*, **2012**, *22*, 10650.
- (a) Sathish, V.; Ramdass, A.; Thanasekaran, P.; Lu, K.-L.; Rajagopal, S., *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.*, **2015**, *23*, 25; (b) Qin, A.; Tang, B. Z., eds., *Aggregation-Induced Emission: Principles; Aggregation-Induced Emission: Applications*, John Wiley & Sons, **2013**; (c) Hu, R.; Leung, N. L. C.; Tang, B. Z.,

- Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 4494; (d) Lin, S.; Pan, H.; Li, L.; Liao, R.; Yu, S.; Zhao, Q.; Sun, H.; Huang, W., *J. Mat. Chem. C*, **2019**, *7*, 7893; (e) Zhao, J.; Feng, Z.; Zhong, D.; Yang, X.; Wu, Y.; Zhou, G.; Wu, Z., *Chem. Mater.*, **2018**, *30*, 929; (f) Pinter, P.; Mangold, H.; Stengel, I.; Münster, I.; Strassner, T., *Organometallics*, **2016**, *35*, 673; (g) Honda, H.; Ogawa, Y.; Kuwabara, J.; Kanbara, T., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2014**, *2014*, 1865; (h) Liu, S.; Sun, H.; Ma, Y.; Ye, S.; Liu, X.; Zhou, X.; Mou, X.; Wang, L.; Zhao, Q.; Huang, W., *J. Mat. Chem.*, **2012**, *22*, 22167.
9. (a) Fan, C.; Yang, C., *Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 6439; (b) Mróz, W.; Botta, C.; Giovanella, U.; Rossi, E.; Colombo, A.; Dragonetti, C.; Roberto, D.; Ugo, R.; Valore, A.; Williams, J. A. G., *J. Mat. Chem.*, **2011**, *21*, 8653; (c) C. F. Kui, S.; Chow, P. K.; Tong, G. S. M.; Lai, S.-L.; Cheng, G.; Kwok, C.-C.; Low, K.-H.; Ko, M. Y.; Che, C.-M., *Chem. Eur. J.*, **2013**, *19*, 69; (d) Fleetham, T.; Huang, L.; Li, J., *Adv. Funct. Mater.*, **2014**, *24*, 6066; (e) Tan, G.; Chen, S.; Siu, C.-H.; Langlois, A.; Qiu, Y.; Fan, H.; Ho, C.-L.; Harvey, P. D.; Lo, Y. H.; Liu, L.; Wong, W.-Y., *J. Mater. Chem. C*, **2016**, *4*, 6016; (f) Lai, S.-L.; Tong, W.-Y.; Kui, S. C. F.; Chan, M.-Y.; Kwok, C.-C.; Che, C.-M., *Adv. Funct. Mater.*, **2013**, *23*, 5168.
10. (a) Kobayashi, A.; Kato, M., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2014**, 4469; (b) Xue, P.; Ding, J.; Wang, P.; Lu, R., *J. Mat. Chem. C*, **2016**, *4*, 6688; (c) Zhang, X.; Chi, Z.; Zhang, Y.; Liu, S.; Xu, J., *J. Mat. Chem. C*, **2013**, *1*, 3376; (d) Krikorian, M.; Liu, S.; Swager, T. M., *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, *136*, 2952; (e) Han, M.; Tian, Y.; Yuan, Z.; Zhu, L.; Ma, B., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2014**, *53*, 10908; (f) Lin, C.-J.; Liu, Y.-H.; Peng, S.-M.; Shinmyozu, T.; Yang, J.-S., *Inorg. Chem.*, **2017**, *56*, 4978; (g) Lin, W.-J.; Naziruddin, A. R.; Chen, Y.-H.; Sun, B.-J.; Chang, A. H. H.; Wang, W.-J.; Hwang, W.-S., *Chem. Asian J.*, **2015**, *10*, 728; (h) Zhang, X.-P.; Mei, J.-F.; Lai, J.-C.; Li, C.-H.; You, X.-Z., *J. Mat. Chem. C*, **2015**, *3*, 2350; (i) Ohno, K.; Yamaguchi, S.; Nagasawa, A.; Fujihara, T., *Dalton Trans.*, **2016**, *45*, 5492.
11. (a) Sicilia, V.; Fuertes, S.; Martín, A.; Palacios, A., *Organometallics*, **2013**, *32*, 4092; (b) Fuertes, S.; Chueca, A. J.; Perálvarez, M.; Borja, P.; Torrell, M.; Carreras, J.; Sicilia, V., *ACS Appl. Mat. Interfaces*, **2016**, *8*, 16160; (c) Solomatina, A. I.; Aleksandrova, I. O.; Karttunen, A. J.; Tunik, S. P.; Koshevoy, I. O., *Dalton Trans.*, **2017**, *46*, 3895; (d) Kuwabara, J.; Yamaguchi, K.; Yamawaki, K.; Yasuda, T.; Nishimura, Y.; Kanbara, T., *Inorg. Chem.*, **2017**, *56*, 8726; (e) Shahsavari, H. R.; Babadi Aghakhanpour, R.; Hossein-Abadi, M.; Golbon Haghighi, M.; Notash, B.; Fereidoonzehad, M., *New J. Chem.*, **2017**, *41*, 15347; (f) Sanning, J.; Stegemann, L.; Ewen, P. R.; Schwermann, C.; Daniliuc, C. G.; Zhang, D.; Lin, N.; Duan, L.; Wegner, D.; Doltsinis, N. L.; Strassert, C. A., *J. Mat. Chem. C*, **2016**, *4*, 2560; (g) Zhang, X.-P.; Chang, V. Y.; Liu, J.; Yang, X.-L.; Huang, W.; Li, Y.; Li, C.-H.; Muller, G.; You, X.-Z., *Inorg. Chem.*, **2015**, *54*, 143; (h) Baya, M.; Belío, Ú.; Forniés, J.; Martín, A.; Perálvarez, M.; Sicilia, V., *Inorg. Chim. Acta*, **2015**, *424*, 136; (i) Chen, Y.; Lu, W.; Che, C.-M., *Organometallics*, **2013**, *32*, 350; (j) Díez, Á.; Forniés, J.; Fuertes, S.; Lalinde, E.; Larraz, C.; López, J. A.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Organometallics*, **2009**, *28*, 1705.
12. Díez, A.; Forniés, J.; Larraz, C.; Lalinde, E.; López, J. A.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.*, **2010**, *49*, 3239.
13. Forniés, J.; Sicilia, V.; Borja, P.; Casas, J. M.; Díez, A.; Lalinde, E.; Larraz, C.; Martín, A.; Moreno, M. T., *Chem. Asian J.*, **2012**, *7*, 2813.
14. Takahashi, S.; Kariya, M.; Yatake, T.; Sonogashira, K.; Hagihara, N., *Macromolecules*, **1978**, *11*, 1063.
15. (a) Vivancos, Á.; Poveda, D.; Muñoz, A.; Moreno, J.; Bautista, D.; González-Herrero, P., *Dalton Trans.*, **2019**, *48*, 14367; (b) Sivchik, V.; Sarker, R. K.; Liu, Z.-Y.; Chung, K.-Y.; Grachova, E. V.; Karttunen, A. J.; Chou, P.-T.; Koshevoy, I. O., *Chem. Eur. J.*, **2018**, *24*, 11475; (c) Zábanský, M.; Soellner, J.; Horký, F.; Císařová, I.; Štěpnička, P.; Strassner, T., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2019**, *2019*, 2284.



16. Fuertes, S.; Chueca, A. J.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.*, **2015**, *54*, 9885.
17. Chassot, L.; Muller, E.; Von Zelewsky, A., *Inorg. Chem.*, **1984**, *23*, 4249.
18. (a) Sun, Y.; Yang, X.; Liu, B.; Guo, H.; Zhou, G.; Ma, W.; Wu, Z., *J. Mat. Chem. C*, **2019**, *7*, 12552; (b) Au-Yeung, H.-L.; Tam, A. Y.-Y.; Leung, S. Y.-L.; Yam, V. W.-W., *Chem. Sci.*, **2017**, *8*, 2267; (c) Mei, J.; Leung, N. L. C.; Kwok, R. T. K.; Lam, J. W. Y.; Tang, B. Z., *Chem. Rev.*, **2015**, *115*, 11718.
19. (a) Li, G.; Zhu, D.; Wang, X.; Su, Z.; Bryce, M. R., *Chem. Soc. Rev.*, **2020**, *49*, 765; (b) Chen, Z.; Li, Z.; Hu, F.; Yu, G.-A.; Yin, J.; Liu, S. H., *Dyes Pigments*, **2016**, *125*, 169; (c) Chen, Z.; Li, Z.; Yang, L.; Liang, J.; Yin, J.; Yu, G.-A.; Liu, S. H., *Dyes Pigments*, **2015**, *121*, 170; (d) Chen, Z.; Liu, G.; Pu, S.; Liu, S. H., *Dyes Pigments*, **2018**, *152*, 54; (e) Li, G.; Ren, X.; Shan, G.; Che, W.; Zhu, D.; Yan, L.; Su, Z.; Bryce, M. R., *Chem. Commun.*, **2015**, *51*, 13036; (f) Jiang, Y.; Li, G.; Zhu, D.; Su, Z.; Bryce, M. R., *J. Mater. Chem. C*, **2017**, *5*, 12189; (g) Wang, Y.; Yang, T.; Liu, X.; Li, G.; Che, W.; Zhu, D.; Su, Z., *J. Mat. Chem. C*, **2018**, *6*, 12217.
20. Williams, A. T. R.; Winfield, S. A.; Miller, J. N., *Analyst*, **1983**, *108*, 1067.
21. Resch-Genger, U.; Rurack, K., *Pure Appl. Chem.*, **2013**, *85*, 2005.
22. (a) Mdleleni, M. M.; Bridgewater, J. S.; Watts, R. J.; Ford, P. C., *Inorg. Chem.*, **1995**, *34*, 2334; (b) Karakus, C.; Fischer, L. H.; Schmeding, S.; Hummel, J.; Risch, N.; Schaferling, M.; Holder, E., *Dalton Trans.*, **2012**, *41*, 9623.
23. Cho, J.-Y.; Suponitsky, K. Y.; Li, J.; Timofeeva, T. V.; Barlow, S.; Marder, S. R., *J. Organomet. Chem.*, **2005**, *690*, 4090.
24. Berenguer, J. R.; Díez, A.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Ruiz, S.; Sánchez, S., *Organometallics*, **2011**, *30*, 5776.
25. Otwinowski, Z.; Minor, W., in *Methods Enzymol.*, eds. C. V. Carter, Jr. and R. M. Sweet, Academic Press, New York, **1997**, vol. 276A, p. 307.
26. Blessing, R. H., *Acta Crystallogr.*, **1995**, *A51*, 33.
27. Farrugia, L. J., *Appl. Crystallogr.*, **1999**, *32*, 837.
28. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.*, **2015**, *71*, 3.
29. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr C Struct Chem*, **2015**, *71*, 3.
30. 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.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J., *Gaussian 09, Revision B.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, , **2009**.
31. J., F. M.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Li, X.; Caricato, M.; Marenich, A. V.; Bloino, J.; Janesko, B. G.; Gomperts, R.; Mennucci, B.; Hratchian, H. P.; Ortiz, J. V.; Izmaylov, A. F.; Sonnenberg, J. L.; Williams-Young, D.; Ding, F.; Lipparini, F.; Egidi, F.; Goings, J.; Peng, B.; Petrone, A.; Henderson, T.; Ranasinghe, D.; Zakrzewski, V. G.; Gao, J.; Rega, N.; Zheng, G.; Liang, W.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Throssell, K.; Montgomery, J. J. A.; Peralta, J. E.;

- 
- Ogliaro, F.; Bearpark, M. J.; Heyd, J. J.; Brothers, E. N.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Keith, T. A.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A. P.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Millam, J. M.; Klene, M.; Adamo, C.; Cammi, R.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Farkas, O.; Foresman, J. B.; J., F. D., *Revision A.03, Inc., Gaussian 16*, Wallingford CT, 2016, **2016**.
32. (a) Becke, A. D., *Phys. Rev. A*, **1988**, 38, 3098; (b) Becke, A. D., *J. Chem. Phys.*, **1993**, 98, 5648; (c) Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G., *Phys. Rev. B*, **1988**, 37, 785.
  33. Wadt, W. R.; Hay, P. J., *J. Chem. Phys.*, **1985**, 82, 284.
  34. Barone, V.; Cossi, M., *J. Phys. Chem. A*, **1998**, 102, 1995.
  35. O'Boyle, N. M.; Tenderholt, A. L.; Langner, K. M., *J. Comput. Chem.*, **2008**, 29, 839

## References Chapter 2:

1. (a) Haque, A.; Xu, L.; Al-Balushi, R. A.; Al-Suti, M. K.; Ilmi, R.; Guo, Z.; Khan, M. S.; Wong, W.-Y.; Raithby, P. R., *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 5547; (b) Fleetham, T.; Li, G.; Li, J., *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1601861; (c) Cebrián, C.; Mauro, M., *Beilstein J. Org. Chem.* **2018**, *14*, 1459; (d) Huo, S.; Carroll, J.; Vezzu, D. A. K., *Asian J. Org. Chem.* **2015**, *4*, 1210; (e) Choy, W. C. H.; Chan, W. K.; Yuan, Y., *Adv. Mater.* **2014**, *26*, 5368; (f) Xu, H.; Chen, R.; Sun, Q.; Lai, W.; Su, Q.; Huang, W.; Liu, X., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 3259; (g) Kalinowski, J.; Fattori, V.; Cocchi, M.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.* **2011**, *255*, 2401; (h) Farinola, G. M.; Ragni, R., *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 3467; (i) Xiao, L.; Chen, Z.; Qu, B.; Luo, J.; Kong, S.; Gong, Q.; Kido, J., *Adv. Mat.* **2011**, *23*, 926; (j) Zhou, G.; Wong, W.-Y.; Yang, X., *Chem. Asian J.* **2011**, *6*, 1706; (k) Chi, Y.; Chou, P. T., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 638; (l) Williams, J. A. G.; Develay, S.; Rochester, D. L.; Murphy, L., *Coord. Chem. Rev.* **2008**, *252*, 2596; (m) Yersin, H., *Highly Efficient OLEDs with Phosphorescent Materials*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2008**.
2. (a) Omae, I., *J. Organomet. Chem.* **2016**, *823*, 50; (b) Wenger, O. S., *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 3686; (c) Ma, D.-L.; Ma, V. P.-Y.; Chan, D. S.-H.; Leung, K.-H.; He, H.-Z.; Leung, C.-H., *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 3087; (d) Zhao, Q.; Li, F.; Huang, C., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 3007.
3. (a) Li, K.; Ming Tong, G. S.; Wan, Q.; Cheng, G.; Tong, W.-Y.; Ang, W.-H.; Kwong, W.-L.; Che, C.-M., *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 1653; (b) Lo, K. K.-W.; Tso, K. K.-S., *Inorg. Chem. Front.* **2015**, *2*, 510; (c) Mauro, M.; Aliprandi, A.; Septiadi, D.; Kehr, N. S.; De Cola, L., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 4144; (d) Lin, S.; Pan, H.; Li, L.; Liao, R.; Yu, S.; Zhao, Q.; Sun, H.; Huang, W., *J. Mat. Chem. C* **2019**, *7*, 7893; (e) Baggaley, E.; Weinstein, J. A.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 1762; (f) Thorp-Greenwood, F. L.; Balasingham, R. G.; Coogan, M. P., *J. Organomet. Chem.* **2012**, *714*, 12; (g) Zhao, Q.; Huang, C.; Li, F., *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 2508; (h) Lo, K. K. W.; Choi, A. W. T.; Law, W. H. T., *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 6021.
4. (a) Yoshida, M.; Kato, M., *Coord. Chem. Rev.* **2020**, *408*, 213194; (b) Herberger, J.; Winter, R. F., *Coord. Chem. Rev.* **2019**, *400*, 213048; (c) Yam, V. W.-W.; Au, V. K.-M.; Leung, S. Y.-L., *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 7589; (d) Chan, A. K.-W.; Ng, M.; Wong, Y.-C.; Chan, M.-Y.; Wong, W.-T.; Yam, V. W.-W., *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 10750; (e) Zhou, G.; Wang, Q.; Wang, X.; Ho, C.-L.; Wong, W.-Y.; Ma, D.; Wang, L.; Lin, Z., *J. Mater. Chem.* **2010**, *20*, 7472.
5. (a) Strassner, T., *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 2680; (b) Pinter, P.; Soellner, J.; Strassner, T., *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 14495; (c) Soellner, J.; Strassner, T., *Organometallics* **2018**, *37*, 1821; (d) Fuertes, S.; Chueca, A. J.; Arnal, L.; Martín, A.; Giovanella, U.; Botta, C.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 4829; (e) Tronnier, A.; Poethig, A.; Herdtweck, E.; Strassner, T., *Organometallics* **2014**, *33*, 898; (f) Lee, C.-S.; Sabiah, S.; Wang, J.-C.; Hwang, W.-S.; Lin, I. J. B., *Organometallics* **2010**, *29*, 286.
6. (a) Sicilia, V.; Fuertes, S.; Chueca, A. J.; Arnal, L.; Martín, A.; Perálvarez, M.; Botta, C.; Giovanella, U., *J. Mater. Chem. C* **2019**, *7*, 4509; (b) Sicilia, V.; Arnal, L.; Chueca, A. J.; Fuertes, S.; Babaei, A.; Igual Muñoz, A. M.; Sessolo, M.; Bolink, H. J., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 1145; (c) Tronnier, A.; Metz, S.; Wagenblast, G.; Muenster, I.; Strassner, T., *Dalton Trans.* **2014**, *43*, 3297.
7. (a) Eremina, A. A.; Kinzhalov, M. A.; Katlenok, E. A.; Smirnov, A. S.; Andrusenko, E. V.; Pidko, E. A.; Suslonov, V. V.; Luzyanin, K. V., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 2209; (b) Na, H.; Teets, T. S., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 6353–6360; (c) Ng, C.-O.; Cheng, S.-C.; Chu, W.-K.; Tang, K.-M.; Yiu, S.-M.; Ko, C.-C., *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 7969; (d) Na, H.; Maity, A.; Morshed, R.; Teets, T. S., *Organometallics* **2017**, *36*, 2965; (e) Wu, Y.; Wen, Z.; Wu, J. I.-C.; Teets, T. S., *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 16028.

8. (a) Lai, S.-W.; Chan, M. C.-W.; Cheung, K.-K.; Che, C.-M., *Organometallics* **1999**, *18*, 3327; (b) Lai, S.-W.; Chan, M. C. W.; Wang, Y.; Lam, H.-W.; Peng, S.-M.; Che, C.-M., *J. Organomet. Chem.* **2001**, *617-618*, 133.
9. (a) Kinzhalov, M. A.; Luzyanin, K. V., *Coord. Chem. Rev.* **2019**, *399*, 213014; (b) Boyarskiy, V. P.; Bokach, N. A.; Luzyanin, K. V.; Kukushkin, V. Y., *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 2698; (c) Boyarskiy, V. P.; Luzyanin, K. V.; Kukushkin, V. Y., *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 2029; (d) Slaughter, L. M., *ACS Catal.* **2012**, *2*, 1802; (e) Vignolle, J.; Cattoën, X.; Bourissou, D., *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 3333; (f) Herrmann, W. A.; Öfele, K.; v. Preysing, D.; Herdtweck, E., *J. Organomet. Chem.* **2003**, *684*, 235; (g) Michelin, R. A.; Pombeiro, A. J. L.; Guedes da Silva, M. F. C., *Coord. Chem. Rev.* **2001**, *218*, 75.
10. (a) Cutillas, N.; Yellol, G. S.; de Haro, C.; Vicente, C.; Rodríguez, V.; Ruiz, J., *Coord. Chem. Rev.* **2013**, *257*, 2784; (b) Omae, I., *Coord. Chem. Rev.* **2014**, *280*, 84; (c) Zamora, A.; Pérez, S. A.; Rodríguez, V.; Janiak, C.; Yellol, G. S.; Ruiz, J., *J. Med. Chem.* **2015**, *58*, 1320; (d) Ma, D.-L.; He, H.-Z.; Leung, K.-H.; Chan, D. S.-H.; Leung, C.-H., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 7666; (e) Jürgens, S.; Kühn, F. E.; Casini, A., *Curr. Med. Chem.* **2018**, *25*, 437; (f) Vaquero, M.; Busto, N.; Fernández-Pampín, N.; Espino, G.; García, B., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 4961; (g) Garbe, S.; Krause, M.; Klimpel, A.; Neundorf, I.; Lippmann, P.; Ott, I.; Brünink, D.; Strassert, C. A.; Doltsinis, N. L.; Klein, A., *Organometallics* **2020**, *39*, 746.
11. (a) Liu, W.; Gust, R., *Coord. Chem. Rev.* **2016**, *329*, 191; (b) Visbal, R.; Gimeno, M. C., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 3551; (c) Liu, W.; Gust, R., *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 755; (d) Gautier, A.; Cisnetti, F., *Metallomics* **2012**, *4*, 23; (e) Oehninger, L.; Rubbiani, R.; Ott, I., *Dalton Trans.* **2013**, *42*, 3269; (f) Merces, L.; Albrecht, M., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 1903; (g) Skander, M.; Retailleau, P.; Bourrié, B.; Schio, L.; Mailliet, P.; Marinetti, A., *J. Med. Chem.* **2010**, *53*, 2146; (h) Choo, K. B.; Lee, S. M.; Lee, W. L.; Cheow, Y. L., *J. Organomet. Chem.* **2019**, *898*, 120868; (i) Hu, D.; Yang, C.; Lok, C.-N.; Xing, F.; Lee, P.-Y.; Fung, Y. M. E.; Jiang, H.; Che, C.-M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 10914; (j) Karaca, E. Ö.; Çiftçi, O.; Özdemir, İ.; Yakali, G.; Aygün, M.; Gürbüz, N.; Özdemir, İ., *Appl. Organomet. Chem.* **2019**, *33*, e4851; (k) Ott, I., *Inorganic and Organometallic Transition Metal Complexes with Biological Molecules and Living Cells*, ed. K. K.-W. Lo, Academic Press, **2017**, 147.
12. (a) Zou, T.; Lok, C.-N.; Fung, Y. M. E.; Che, C.-M., *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 5423; (b) Sun, R. W.-Y.; Chow, A. L.-F.; Li, X.-H.; Yan, J. J.; Sin-Yin Chui, S.; Che, C.-M., *Chem. Sci.* **2011**, *2*, 728; (c) Li, K.; Zou, T.; Chen, Y.; Guan, X.; Che, C.-M., *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 7441.
13. (a) Williams, M.; Green, A. I.; Fernandez-Cestau, J.; Hughes, D. L.; O'Connell, M. A.; Searcey, M.; Bertrand, B.; Bochmann, M., *Dalton Trans.* **2017**, *46*, 13397; (b) Bertrand, B.; Romanov, A. S.; Brooks, M.; Davis, J.; Schmidt, C.; Ott, I.; O'Connell, M.; Bochmann, M., *Dalton Trans.* **2017**, *46*, 15875; (c) Montanel-Pérez, S.; Elizalde, R.; Laguna, A.; Villacampa, M. D.; Gimeno, M. C., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2019**, *2019*, 4273; (d) Montanel-Pérez, S.; Herrera, R. P.; Laguna, A.; Villacampa, M. D.; Gimeno, M. C., *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 9052.
14. (a) Alves, G.; Morel, L.; El-Ghozzi, M.; Avignant, D.; Legeret, B.; Nauton, L.; Cisnetti, F.; Gautier, A., *Chem. Commun.* **2011**, *47*, 7830; (b) Serebryanskaya, T. V.; Kinzhalov, M. A.; Bakulev, V.; Alekseev, G.; Andreeva, A.; Gushchin, P. V.; Protas, A. V.; Smirnov, A. S.; Panikorovskii, T. L.; Lippmann, P.; Ott, I.; Verbilo, C. M.; Zuraev, A. V.; Bunev, A. S.; Boyarskiy, V. P.; Kasyanenko, N. A., *New J. Chem.* **2020**, *44*, 5762.
15. Martínez-Junquera, M.; Lara, R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*, 7221.
16. Busetto, L.; Palazzi, A.; Crociani, B.; Belluco, U.; Badley, E. M.; Kilby, B. J. L.; Richards, R. L., *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1972**, 1800.
17. Cardin, D. J.; Cetinkaya, B.; Cetinkaya, E.; Lappert, M. F.; Randall, E. W.; Rosenberg, E., *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1973**, 1982.

18. Mikherdov, A. S.; Novikov, A. S.; Kinzhalov, M. A.; Boyarskiy, V. P.; Starova, G. L.; Ivanov, A. Y.; Kukushkin, V. Y., *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 3420.
19. Allen, F. H.; Kennard, O.; Watson, D. G.; Brammer, L.; Orpen, A. G.; Taylor, R., *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1987**, S1.
20. (a) Kinzhalov, M. A.; Eremina, A. A.; Smirnov, A. S.; Suslonov, V. V.; Kukushkin, V. Y.; Luzyanin, K. V., *Dalton Trans.* **2019**, *48*, 7571; (b) Kinzhalov, M. A.; Timofeeva, S. A.; Luzyanin, K. V.; Boyarskiy, V. P.; Yakimanskiy, A. A.; Haukka, M.; Kukushkin, V. Y., *Organometallics* **2016**, *35*, 218; (c) Katkova, S. A.; Kinzhalov, M. A.; Tolstoy, P. M.; Novikov, A. S.; Boyarskiy, V. P.; Ananyan, A. Y.; Gushchin, P. V.; Haukka, M.; Zolotarev, A. A.; Ivanov, A. Y.; Zlotsky, S. S.; Kukushkin, V. Y., *Organometallics* **2017**, *36*, 4145; (d) Kinzhalov, M. A.; Boyarskiy, V. P.; Luzyanin, K. V.; Dolgushin, F. M.; Kukushkin, V. Y., *Dalton Trans.* **2013**, *42*, 10394.
21. (a) Veljković, D. Ž.; Đunović, A. B.; Zarić, S. D., *ChemistrySelect* **2019**, *4*, 12909; (b) Giménez, N.; Lara, R.; Moreno, M. T.; Lalinde, E., *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 5758.
22. Bartolomé, C.; Carrasco-Rando, M.; Coco, S.; Cordovilla, C.; Martín-Alvarez, J. M.; Espinet, P., *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 1616.
23. (a) Spackman, M. A.; McKinnon, J. J., *CrystEngComm* **2002**, *4*, 378; (b) Spackman, M. A.; Jayatilaka, D., *CrystEngComm* **2009**, *11*, 19.
24. Contreras-García, J.; Johnson, E. R.; Keinan, S.; Chaudret, R.; Piquemal, J. P.; Beratan, D. N.; Yang, W., *J. Chem. Theory Comput.* **2011**, *7*, 625.
25. Feuerstein, W.; Holzer, C.; Gui, X.; Neumeier, L.; Klopfer, W.; Breher, F., *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 17156.
26. (a) Sun, Y.; Yang, X.; Liu, B.; Guo, H.; Zhou, G.; Ma, W.; Wu, Z., *J. Mat. Chem. C* **2019**, *7*, 12552; (b) Au-Yeung, H.-L.; Tam, A. Y.-Y.; Leung, S. Y.-L.; Yam, V. W.-W., *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 2267; (c) Mei, J.; Leung, N. L. C.; Kwok, R. T. K.; Lam, J. W. Y.; Tang, B. Z., *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 11718.
27. (a) Berenguer, J. R.; Pichel, J. G.; Giménez, N.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Piñeiro-Hermida, S., *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 18839; (b) Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Lara, R.; López, I. P.; Alfaro-Arnedo, E.; Pichel, J. G.; Piñeiro-Hermida, S., *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 2440; (c) Millán, G.; Giménez, N.; Lara, R.; Berenguer, J. R.; Moreno, M. T.; Lalinde, E.; Alfaro-Arnedo, E.; López, I. P.; Piñeiro-Hermida, S.; Pichel, J. G., *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 1657.
28. (a) Cutillas, N.; Martínez, A.; Yellol, G. S.; Rodríguez, V.; Zamora, A.; Pedreño, M.; Donaire, A.; Janiak, C.; Ruiz, J., *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 13529; (b) Escolà, A.; Crespo, M.; López, C.; Quirante, J.; Jayaraman, A.; Polat, I. H.; Badía, J.; Baldomà, L.; Cascante, M., *Bioorg. Med. Chem.* **2016**, *24*, 5804; (c) Müller, K.; Faeh, C.; Diederich, F., *Science* **2007**, *317*, 1881; (d) Liang, T.; Neumann, C. N.; Ritter, T., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 8214.
29. (a) Di Veroli, G. Y.; Fornari, C.; Goldlust, I.; Mills, G.; Koh, S. B.; Bramhall, J. L.; Richards, F. M.; Jodrell, D. I., *Sci. Rep.* **2015**, *5*, 14701; (b) Levasseur, L. M.; Slocum, H. K.; Rustum, Y. M.; Greco, W. R., *Cancer Res.* **1998**, *58*, 5749; (c) Hassan, S. B.; Jonsson, E.; Larsson, R.; Karlsson, M. O., *J. Pharmacol. Exp. Ther.* **2001**, *299*, 1140.
30. (a) Cohen, G.; Bauer, W.; Barton, J.; Lippard, S., *Science* **1979**, *203*, 1014; (b) Frik, M.; Jimenez, J.; Vasilevski, V.; Carreira, M.; de Almeida, A.; Gascon, E.; Benoit, F.; Sanau, M.; Casini, A.; Contel, M., *Inorg. Chem. Front.* **2014**, *1*, 231.
31. (a) Icsel, C.; Yilmaz, V. T.; Kaya, Y.; Samli, H.; Harrison, W. T. A.; Buyukgungor, O., *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 6880; (b) Zamora, A.; Wachter, E.; Vera, M.; Heidary, D. K.; Rodríguez, V.; Ortega, E.; Fernández-Espín, V.; Janiak, C.; Glazer, E. C.; Barone, G.; Ruiz, J., *Inorg. Chem.* **2021**, *in press*, doi 10.1021/acs.inorgchem.0c02648.
32. (a) Dabrowiak, J. C., *Metals in medicine*, John Wiley and Sons Ltd., Chichester, UK, **2009**, **ch 4**, **p. 109**; (b) Liu, H.-K.; Sadler, P. J., *Acc. Chem. Res.* **2011**, *44*, 349; (c) Suryadi, J.; Bierbach, U., *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 12926; (d) Zou, T.; Liu, J.; Lum, C. T.;

- Ma, C.; Chan, R. C.-T.; Lok, C.-N.; Kwok, W.-M.; Che, C.-M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 10119; (e) Ruiz, J.; Vicente, C.; de Haro, C.; Espinosa, A., *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 2151; (f) Muenzner, J. K.; Rehm, T.; Biersack, B.; Casini, A.; de Graaf, I. A. M.; Worawutputtpong, P.; Noor, A.; Kempe, R.; Brabec, V.; Kasparkova, J.; Schobert, R., *J. Med. Chem.* **2015**, *58*, 6283; (g) Zhang, Y.; Luo, Q.; Zheng, W.; Wang, Z.; Lin, Y.; Zhang, E.; Lü, S.; Xiang, J.; Zhao, Y.; Wang, F., *Inorg. Chem. Front.* **2018**, *5*, 413.
33. (a) Snyder, R. D.; McNulty, J.; Zairov, G.; Ewing, D. E.; Hendry, L. B., *Mutat. Res.* **2005**, *578*, 88; (b) Escolà, A.; Crespo, M.; Quirante, J.; Cortés, R.; Jayaraman, A.; Badía, J.; Baldomà, L.; Calvet, T.; Font-Bardía, M.; Cascante, M., *Organometallics* **2014**, *33*, 1740.
34. Khrapitchev, A. A.; Callaghan, P. T., *J. Magn. Res.* **2001**, *152*, 259.
35. Zuccaccia, D.; Macchioni, A., *Organometallics* **2005**, *24*, 3476.
36. Williams, A. T. R.; Winfield, S. A.; Miller, J. N., *Analyst* **1983**, *108*, 1067.
37. Resch-Genger, U.; Rurack, K., *Pure Appl. Chem.* **2013**, *85*, 2005.
38. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.* **2015**, *71*, 3.
39. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr C Struct Chem* **2015**, *71*, 3.
40. Farrugia, L. J., *Appl. Crystallogr.* **1999**, *32*, 837.
41. Turner, M. J., McKinnon, J. J., Wolff, S. K., Grimwood, D. J., Spackman, P. R., Jayatilaka, D. & Spackman, M. A., University of Western, Australia **2017**.
42. Lu, T.; Chen, F., *J. Comput. Chem.* **2012**, *33*, 580.
43. Humphrey, W.; Dalke, A.; Schulten, K., *J. Mol. Graph.* **1996**, *14*, 33.
44. M. J. Frisch, G. W. T., H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. V. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J. J. Heyd, E. N. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. P. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian 16, Revision A.03, Inc., Wallingford CT, 2016.
45. (a) Becke, A. D., *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648; (b) Becke, A. D., *Phys. Rev. A* **1988**, *38*, 3098.
46. Wadt, W. R.; Hay, P. J., *J. Chem. Phys.* **1985**, *82*, 284.
47. Barone, V.; Cossi, M., *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 1995.
48. O'Boyle, N. M.; Tenderholt, A. L.; Langner, K. M., *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 839.

## References Chapter 3:

1. Soto, M. A.; Kandel, R.; MacLachlan, M. J., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, 894.
2. (a) Zheng, Q.; Borsley, S.; Tu, T.; Cockroft, S. L., *Chem. Commun.* **2020**, 56, 14705; (b) Soto, M. A.; Carta, V.; Andrews, R. J.; Chaudhry, M. T.; MacLachlan, M. J., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 10348; (c) Chen, J.; Ao, L.; Wei, C.; Wang, C.; Wang, F., *Chem. Commun.* **2019**, 55, 229; (d) Liao, K.-Y.; Hsu, C.-W.; Chi, Y.; Hsu, M.-K.; Wu, S.-W.; Chang, C.-H.; Liu, S.-H.; Lee, G.-H.; Chou, P.-T.; Hu, Y.; Robertson, N., *Inorg. Chem.* **2015**, 54, 4029.
3. (a) Cuerva, C.; Campo, J. A.; Cano, M.; Lodeiro, C., *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 12046; (b) Kobayashi, A.; Imada, S.-I.; Shigeta, Y.; Nagao, Y.; Yoshida, M.; Kato, M., *J. Mat. Chem. C* **2019**, 7, 14923; (c) Kobayashi, A.; Yamamoto, N.; Shigeta, Y.; Yoshida, M.; Kato, M., *Dalton Trans.* **2018**, 47, 1548; (d) Ohno, K.; Kusano, Y.; Kaizaki, S.; Nagasawa, A.; Fujihara, T., *Inorg. Chem.* **2018**, 57, 14159.
4. (a) Ma, Y.; Chen, K.; Lu, J.; Shen, J.; Ma, C.; Liu, S.; Zhao, Q.; Wong, W.-Y., *Inorg. Chem.* **2021**, 60, 7510; (b) Liu, L.; Wang, X.; Wang, N.; Peng, T.; Wang, S., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 9160.
5. (a) Zhang, H.-H.; Wu, S.-X.; Wang, Y.-Q.; Xie, T.-G.; Sun, S.-S.; Liu, Y.-L.; Han, L.-Z.; Zhang, X.-P.; Shi, Z.-F., *Dyes Pigments* **2022**, 197, 109857; (b) Yang, Q.-Y.; Zhang, H.-H.; Qi, X.-W.; Sun, S.-S.; Zhang, D.-S.; Han, L.-Z.; Zhang, X.-P.; Shi, Z.-F., *Dalton Trans.* **2021**, 50, 8938; (c) Ai, Y.; Li, Y.; Chan, M. H.-Y.; Xiao, G.; Zou, B.; Yam, V. W.-W., *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143, 10659; (d) Norton, A. E.; Abdolmaleki, M. K.; Liang, J.; Sharma, M.; Golsby, R.; Zoller, A.; Krause, J. A.; Connick, W. B.; Chatterjee, S., *Chem. Commun.* **2020**, 56, 10175.
6. (a) Chung, C. Y.-S.; Li, S. P.-Y.; Louie, M.-W.; Lo, K. K.-W.; Yam, V. W.-W., *Chem. Sci.* **2013**, 4, 2453; (b) Leung, S. Y.-L.; Yam, V. W.-W., *Chem. Sci.* **2013**, 4, 4228; (c) Chung, C. Y.-S.; Chan, K. H.-Y.; Yam, V. W.-W., *Chem. Commun.* **2011**, 47, 2000.
7. (a) Yoshida, M.; Kato, M., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, 355, 101; (b) Kobayashi, A.; Kato, M., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, 4469; (c) Wenger, O. S., *Chem. Rev.* **2013**, 113, 3686; (d) Zhang, X.; Chi, Z.; Zhang, Y.; Liu, S.; Xu, J., *J. Mat. Chem. C* **2013**, 1, 3376; (e) Zhang, X.; Li, B.; Chen, Z. H.; Chen, Z. N., *J. Mater. Chem.* **2012**, 22, 11427; (f) Xue, P.; Ding, J.; Wang, P.; Lu, R., *J. Mat. Chem. C* **2016**, 4, 6688; (g) Yam, V. W.-W.; Au, V. K.-M.; Leung, S. Y.-L., *Chem. Rev.* **2015**, 115, 7589; (h) Li, B.; Fan, H.-T.; Zang, S.-Q.; Li, H.-Y.; Wang, L.-Y., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, 377, 307; (i) Yoshida, M.; Kato, M., *Coord. Chem. Rev.* **2020**, 408, 213194.
8. (a) Zhang, X.; Wang, J.-Y.; Ni, J.; Zhang, L.-Y.; Chen, Z.-N., *Inorg. Chem.* **2012**, 51, 5569; (b) Ku, H.-Y.; Tong, B.; Chi, Y.; Kao, H.-C.; Yeh, C.-C.; Chang, C.-H.; Lee, G.-H., *Dalton Trans.* **2015**, 44, 8552; (c) Su, M.; Liu, S.; Zhang, J.; Meng, C.; Ni, J., *Dyes and Pigments* **2022**, 200, 110139.
9. (a) Puttock, E. V.; Walden, M. T.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, 367, 127; (b) Aliprandi, A.; Genovese, D.; Mauro, M.; Cola, L. D., *Chem. Lett.* **2015**, 44, 1152; (c) Gray, H. B.; Zálíš, S.; Vlček, A., *Coord. Chem. Rev.* **2017**, 345, 297; (d) Kim, D.; Brédas, J.-L., *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 11371.
10. (a) Nakagaki, M.; Aono, S.; Kato, M.; Sakaki, S., *J. Phys. Chem. C* **2020**, 124, 10453; (b) Park, G.; Kim, H.; Yang, H.; Park, K. R.; Song, I.; Oh, J. H.; Kim, C.; You, Y., *Chem. Sci.* **2019**, 10, 1294.
11. (a) Genovese, D.; Aliprandi, A.; Prasetyanto, E. A.; Mauro, M.; Hirtz, M.; Fuchs, H.; Fujita, Y.; Uji-I, H.; Lebedkin, S.; Kappes, M.; De Cola, L., *Adv. Funct. Mater.*, **2016**, 26, 5271; (b) Tan, G.; Chen, S.; Siu, C.-H.; Langlois, A.; Qiu, Y.; Fan, H.; Ho, C.-L.; Harvey, P. D.; Lo, Y. H.; Liu, L.; Wong, W.-Y., *J. Mater. Chem. C* **2016**, 4, 6016; (c)

- Huang, L.-M.; Tu, G.-M.; Chi, Y.; Hung, W.-Y.; Song, Y.-C.; Tseng, M.-R.; Chou, P.-T.; Lee, G.-H.; Wong, K.-T.; Cheng, S.-H.; Tsai, W.-S., *J. Mater. Chem. C* **2013**, *1*, 7582; (d) Rossi, E.; Murphy, L.; Brothwood, P. L.; Colombo, A.; Dragonetti, C.; Roberto, D.; Ugo, R.; Cocchi, M.; Williams, J. A. G., *J. Mat. Chem.* **2011**, *21*, 15501; (e) Chen, W.-C.; Sukpattanacharoen, C.; Chan, W.-H.; Huang, C.-C.; Hsu, H.-F.; Shen, D.; Hung, W.-Y.; Kungwan, N.; Escudero, D.; Lee, C.-S.; Chi, Y., *Adv. Funct. Mater.* **2020**, *30*, 2002494.
12. (a) Inoue, R.; Naota, T.; Ehara, M., *Chem. Asian J.* **2021**, *16*, 3129; (b) Rossi, E.; Colombo, A.; Dragonetti, C.; Roberto, D.; Ugo, R.; Valore, A.; Falciola, L.; Brulatti, P.; Cocchi, M.; Williams, J. A. G., *J. Mater. Chem.* **2012**, *22*, 10650; (c) Perez, M. D.; Djurovich, P. I.; Hassan, A.; Cheng, G. Y.; Stewart, T. J.; Aznavour, K.; Bau, R.; Thompson, M. E., *Chem. Commun.* **2009**, 4215.
13. Pyykkö, P., *Chem. Rev.* **1997**, *97*, 597.
14. (a) Díez, A.; Forniés, J.; Larraz, C.; Lalinde, E.; López, J. A.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 3239; (b) Sluch, I. M.; Miranda, A. J.; Elbjeirami, O.; Omary, M. A.; Slaughter, L. M., *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 10728; (c) Cho, Y.-J.; Kim, S.-Y.; Son, H.-J.; Cho, D. W.; Kang, S. O., *Phys.Chem.Chem.Phys.* **2017**, *19*, 5486.
15. Koshevoy, I. O.; Krause, M.; Klein, A., *Coord. Chem. Rev.* **2020**, *405*, 213094.
16. (a) Bryant, M. J.; Skelton, J. M.; Hatcher, L. E.; Stubbs, C.; Madrid, E.; Pallipurath, A. R.; Thomas, L. H.; Woodall, C. H.; Christensen, J.; Fuertes, S.; Robinson, T. P.; Beavers, C. M.; Teat, S. J.; Warren, M. R.; Pradaux-Caggiano, F.; Walsh, A.; Marken, F.; Carbery, D. R.; Parker, S. C.; McKeown, N. B.; Malpass-Evans, R.; Carta, M.; Raithby, P. R., *Nature Commun.* **2017**, *8*, 1800; (b) Forniés, J.; Fuertes, S.; López, J. A.; Martín, A.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 7166; (c) Chan, M. H.-Y.; Wong, H.-L.; Yam, V. W.-W., *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 5570; (d) Lien, C.-Y.; Hsu, Y.-F.; Liu, Y.-H.; Peng, S.-M.; Shinmyozu, T.; Yang, J.-S., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 11584; (e) Belviso, B. D.; Marin, F.; Fuertes, S.; Sicilia, V.; Rizzi, R.; Ciriaco, F.; Cappuccino, C.; Dooryhee, E.; Falcicchio, A.; Maini, L.; Altomare, A.; Caliendo, R., *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 6349.
17. (a) Sun, Y.; Ye, K.; Zhang, H.; Zhang, J.; Zhao, L.; Li, B.; Yang, G.; Yang, B.; Wang, Y.; Lai, S.-W.; Che, C.-M., *Angew. Chem. Int. Edit.* **2006**, *45*, 5610; (b) Zhang, Y.; Zhang, H.; Mu, X.; Lai, S.-W.; Xu, B.; Tian, W.; Wang, Y.; Che, C.-M., *Chem. Commun.* **2010**, *46*, 7727; (c) Janzen, D. E.; Mann, K. R., *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 4223; (d) Kuwabara, J.; Yamaguchi, K.; Yamawaki, K.; Yasuda, T.; Nishimura, Y.; Kanbara, T., *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 8726.
18. Katkova, S. A.; Luzyanin, K. V.; Novikov, A. S.; Kinzhalov, M. A., *New J. Chem.* **2021**, *45*, 2948.
19. (a) Martínez-Junquera, M.; Lara, R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*, 7221; (b) Chen, Y.; Lu, W.; Che, C.-M., *Organometallics* **2013**, *32*, 350; (c) Forniés, J.; Sicilia, V.; Larraz, C.; Camerano, J. A.; Martín, A.; Casas, J. M.; Tsipis, A. C., *Organometallics* **2010**, *29*, 1396; (d) Lu, W.; Chan, M. C. W.; Cheung, K.-K.; Che, C.-M., *Organometallics* **2001**, *20*, 2477; (e) Paziresh, S.; Babadi Aghakhanpour, R.; Fuertes, S.; Sicilia, V.; Niroomand Hosseini, F.; Nabavizadeh, S. M., *Dalton Trans.* **2019**, *48*, 5713; (f) Lai, S.-W.; Lam, H.-W.; Lu, W.; Cheung, K.-K.; Che, C.-M., *Organometallics* **2002**, *21*, 226.
20. Cho, J.-Y.; Suponitsky, K. Y.; Li, J.; Timofeeva, T. V.; Barlow, S.; Marder, S. R., *J. Organomet. Chem.* **2005**, *690*, 4090.
21. Katkova, S. A.; Eliseev, I. I.; Mikherdov, A. S.; Sokolova, E. V.; Starova, G. L.; Kinzhalov, M. A., *Russ. J. Gen. Chem.* **2021**, *91*, 393.
22. Forniés, J.; Fuertes, S.; Larraz, C.; Martín, A.; Sicilia, V.; Tsipis, A. C., *Organometallics* **2012**, *31*, 2729.



23. Macrae, C. F.; Sovago, I.; Cottrell, S. J.; Galek, P. T. A.; McCabe, P.; Pidcock, E.; Platings, M.; Shields, G. P.; Stevens, J. S.; Towler, M.; Wood, P. A., *J Appl Crystallogr* **2020**, *53*, 226.
24. Connick, W. B.; Marsh, R. E.; Schaefer, W. P.; Gray, H. B., *Inorg. Chem.* **1997**, *36*, 913.
25. Baldo, M. A.; Adachi, C.; Forrest, S. R., *Phys. Rev. B* **2000**, *62*, 10967.
26. Sutton, G. D.; Olumba, M. E.; Nguyen, Y. H.; Teets, T. S., *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 17851.
27. Cuerva, C.; Campo, J. A.; Cano, M.; Caño-García, M.; Otón, J. M.; Lodeiro, C., *Dyes and Pigments* **2020**, *175*, 108098.


### References Supporting Chapter 3:

1. Cho, J.-Y.; Suponitsky, K. Y.; Li, J.; Timofeeva, T. V.; Barlow, S.; Marder, S. R., *J. Organomet. Chem.* **2005**, *690*, 4090.
2. Karakus, C.; Fischer, L. H.; Schmeding, S.; Hummel, J.; Risch, N.; Schaferling, M.; Holder, E., *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 9623.
3. Micutz, M.; Iliş, M.; Staicu, T.; Dumitraşcu, F.; Pasuk, I.; Molard, Y.; Roisnel, T.; Cîrcu, V., *Dalton Trans.* **2014**, *43*, 1151.
4. Kvam, P.-I.; Songstad, J., *Acta Chem. Scan.* **1995**, *49*, 313.
5. Farrugia, L. J., *Appl. Crystallogr.* **1999**, *32*, 837.
6. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.* **2015**, *71*, 3.
7. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr C Struct Chem* **2015**, *71*, 3.
8. M. J. Frisch, G. W. T., H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. V. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J. J. Heyd, E. N. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. P. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian 16, Revision A.03, Inc., Wallingford CT, 2016.
9. (a) Becke, A. D., *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648; (b) Becke, A. D., *Phys. Rev. A* **1988**, *38*, 3098.
10. Wadt, W. R.; Hay, P. J., *J. Chem. Phys.* **1985**, *82*, 284.
11. Barone, V.; Cossi, M., *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 1995.
12. (a) Grimme, S.; Antony, J.; Ehrlich, S.; Krieg, H., *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 154104; (b) Grimme, S.; Ehrlich, S.; Goerigk, L., *J. Comput. Chem.* **2011**, *32*, 1456.
13. O'Boyle, N. M.; Tenderholt, A. L.; Langner, K. M., *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 839.

## References Chapter 4:

- (a) Choy, W. C. H.; Chan, W. K.; Yuan, Y., *Adv. Mater.* **2014**, *26*, 5368; (b) Xu, H.; Chen, R.; Sun, Q.; Lai, W.; Su, Q.; Huang, W.; Liu, X., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 3259; (c) Xiao, L.; Chen, Z.; Qu, B.; Luo, J.; Kong, S.; Gong, Q.; Kido, J., *Adv. Mat.* **2011**, *23*, 926; (d) Williams, J. A. G.; Develay, S.; Rochester, D. L.; Murphy, L., *Coord. Chem. Rev.* **2008**, *252*, 2596; (e) Fleetham, T.; Li, G.; Li, J., *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1601861; (f) Kalinowski, J.; Fattori, V.; Cocchi, M.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.* **2011**, *255*, 2401; (g) Huo, S.; Carroll, J.; Vezzu, D. A. K., *Asian J. Org. Chem.* **2015**, *4*, 1210; (h) Strassner, T., *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 2680; (i) Haque, A.; Xu, L.; Al-Balushi, R. A.; Al-Suti, M. K.; Ilmi, R.; Guo, Z.; Khan, M. S.; Wong, W.-Y.; Raithby, P. R., *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 5547; (j) Chi, Y.; Chou, P. T., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 638; (k) Li, K.; Ming Tong, G. S.; Wan, Q.; Cheng, G.; Tong, W.-Y.; Ang, W.-H.; Kwong, W.-L.; Che, C.-M., *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 1653.
- (a) Mauro, M.; Aliprandi, A.; Septiadi, D.; Kehr, N. S.; De Cola, L., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, *43*, 4144; (b) Cutillas, N.; Yellol, G. S.; de Haro, C.; Vicente, C.; Rodríguez, V.; Ruiz, J., *Coord. Chem. Rev.* **2013**, *257*, 2784; (c) Thorp-Greenwood, F. L.; Balasingham, R. G.; Coogan, M. P., *J. Organomet. Chem.* **2012**, *714*, 12; (d) Baggaley, E.; Weinstein, J. A.; Williams, J. A. G., *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 1762; (e) Lo, K. K. W.; Choi, A. W. T.; Law, W. H. T., *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 6021; (f) Zhao, Q.; Huang, C.; Li, F., *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 2508.
- (a) Zhao, Q.; Li, F.; Huang, C., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 3007; (b) Omae, I., *J. Organomet. Chem.* **2016**, *823*, 50; (c) Ma, D.-L.; Ma, V. P.-Y.; Chan, D. S.-H.; Leung, K.-H.; He, H.-Z.; Leung, C.-H., *Coord. Chem. Rev.* **2012**, *256*, 3087; (d) Yeung, M. C.-L.; Yam, V. W.-W., *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 4192.
- (a) Liu, Y.-N.; Wang, S.-F.; Tao, Y.-T.; Huang, W., *Chin. Chem. Lett.* **2016**, *27*, 1250; (b) Goswami, S.; Hernandez, J. L.; Gish, M. K.; Wang, J.; Kim, B.; Laudari, A. P.; Guha, S.; Papanikolas, J. M.; Reynolds, J. R.; Schanze, K. S., *Chem. Mater.* **2017**, *29*, 8449; (c) Gao, X.; Liang, Y.; Wang, H.; Yang, T.; Huettner, S.; Wang, J.; Zhu, F.; Tao, Y., *Organic Electronics* **2019**, *70*, 93.
- (a) Yuan, Y.-J.; Yu, Z.-T.; Chen, D.-Q.; Zou, Z.-G., *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 603; (b) Zhao, J.; Wu, W.; Sun, J.; Guo, S., *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 5323.
- Connick, W. B.; Marsh, R. E.; Schaefer, W. P.; Gray, H. B., *Inorg. Chem.* **1997**, *36*, 913.
- (a) Yoshida, M.; Kato, M., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, *355*, 101; (b) Yam, V. W.-W.; Au, V. K.-M.; Leung, S. Y.-L., *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 7589; (c) Aliprandi, A.; Genovese, D.; Mauro, M.; Cola, L. D., *Chem. Lett.* **2015**, *44*, 1152; (d) Gray, H. B.; Zális, S.; Vlček, A., *Coord. Chem. Rev.* **2017**, *345*, 297.
- (a) Wenger, O. S., *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 3686; (b) Masako, K., *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2007**, *80*, 287; (c) Zhang, X.; Li, B.; Chen, Z. H.; Chen, Z. N., *J. Mater. Chem.* **2012**, *22*, 11427; (d) Kobayashi, A.; Kato, M., *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, 4469.
- (a) Sagara, Y.; Yamane, S.; Mitani, M.; Weder, C.; Kato, T., *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 1073; (b) Xue, P.; Ding, J.; Wang, P.; Lu, R., *J. Mat. Chem. C* **2016**, *4*, 6688.
- (a) Berenguer, J. R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Coord. Chem. Rev.* **2018**, *366*, 69; (b) Ogawa, T.; Sameera, W. M. C.; Yoshida, M.; Kobayashi, A.; Kato, M., *Dalton Trans.* **2018**, *47*, 5589; (c) Sivchik, V. V.; Grachova, E. V.; Melnikov, A. S.; Smirnov, S. N.; Ivanov, A. Y.; Hirva, P.; Tunik, S. P.; Koshevoy, I. O., *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 3351; (d) Berenguer, J. R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T.; Sánchez, S.; Torroba, J., *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 11665.
- (a) Fuertes, S.; Chueca, A. J.; Perálvarez, M.; Borja, P.; Torrell, M.; Carreras, J.; Sicilia, V., *ACS Appl. Mat. Interfaces* **2016**, *8*, 16160; (b) Solomatina, A. I.; Aleksandrova, I. O.; Karttunen, A. J.; Tunik, S. P.; Koshevoy, I. O., *Dalton Trans.* **2017**, *46*, 3895; (c)

- Kuwabara, J.; Yamaguchi, K.; Yamawaki, K.; Yasuda, T.; Nishimura, Y.; Kanbara, T., *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 8726; (d) Shahsavari, H. R.; Babadi Aghakhanpour, R.; Hossein-Abadi, M.; Golbon Haghighi, M.; Notash, B.; Fereidoonzhad, M., *New J. Chem.* **2017**, *41*, 15347; (e) Zhang, X.-P.; Chang, V. Y.; Liu, J.; Yang, X.-L.; Huang, W.; Li, Y.; Li, C.-H.; Muller, G.; You, X.-Z., *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 143; (f) Baya, M.; Belío, Ú.; Forniés, J.; Martín, A.; Perálvarez, M.; Sicilia, V., *Inorg. Chim. Acta* **2015**, *424*, 136; (g) Sicilia, V.; Fuertes, S.; Martín, A.; Palacios, A., *Organometallics* **2013**, *32*, 4092; (h) Díez, Á.; Forniés, J.; Fuertes, S.; Lalinde, E.; Larraz, C.; López, J. A.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Organometallics* **2009**, *28*, 1705; (i) Chen, Y.; Lu, W.; Che, C.-M., *Organometallics* **2013**, *32*, 350.
12. (a) Díez, A.; Forniés, J.; Larraz, C.; Lalinde, E.; López, J. A.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 3239; (b) Katkova, S. A.; Leshchev, A. A.; Mikherdov, A. S.; Kinzhalov, M. A., *Russ. J. Gen. Chem.* **2020**, *90*, 648; (c) Forniés, J.; Sicilia, V.; Larraz, C.; Camerano, J. A.; Martín, A.; Casas, J. M.; Tsipis, A. C., *Organometallics* **2010**, *29*, 1396; (d) Forniés, J.; Sicilia, V.; Borja, P.; Casas, J. M.; Díez, A.; Lalinde, E.; Larraz, C.; Martín, A.; Moreno, M. T., *Chem. Asian J.* **2012**, *7*, 2813.
  13. Martínez-Junquera, M.; Lara, R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*, 7221.
  14. Martínez-Junquera, M.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 10898.
  15. Takahashi, S.; Kariya, M.; Yatake, T.; Sonogashira, K.; Hagihara, N., *Macromolecules* **1978**, *11*, 1063.
  16. Morikubo, J.; Tsubomura, T., *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 17154.
  17. Díez, A.; Forniés, J.; Fuertes, S.; Larraz, C.; López, J. A.; Lalinde, E.; Martín, A.; Moreno, M. T.; Sicilia, V., *Organometallics* **2009**, *28*, 1705.
  18. Macrae, C. F.; Sovago, I.; Cottrell, S. J.; Galek, P. T. A.; McCabe, P.; Pidcock, E.; Platings, M.; Shields, G. P.; Stevens, J. S.; Towler, M.; Wood, P. A., *J. Appl. Cryst.* **2020**, *53*, 226.
  19. Ma, D.-L.; He, H.-Z.; Leung, K.-H.; Chan, D. S.-H.; Leung, C.-H., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 7666.
  20. Mei, Q.; Hua, Q.; Tong, B.; Shi, Y.; Chen, C.; Huang, W., *Tetrahedron* **2015**, *71*, 9366.
  21. Sicilia, V.; Borja, P.; Baya, M.; Casas, J. M., *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 6936.
  22. Zhang, J. F.; Lim, C. S.; Cho, B. R.; Kim, J. S., *Talanta* **2010**, *83*, 658.
  23. Chung, S. K.; Tseng, Y. R.; Chen, C. Y.; Sun, S. S., *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 2711.
  24. (a) Jeon, H.; Ryu, H.; Nam, I.; Noh, D. Y., *Materials* **2020**, *13*; (b) Jeon, S.; Suh, W.; Noh, D.-Y., *Inorg. Chem. Commun.* **2017**, *81*, 43; (c) Son, H.; Jang, S.; Lim, G.; Kim, T.; Nam, I.; Noh, D.-Y., *Sustainability* **2021**, *13*.
  25. (a) Mei, Q.-b.; Guo, Y.-h.; Tong, B.-h.; Weng, J.-N.; Zhang, B.; Huang, W., *Analyst* **2012**, *137*, 5398; (b) Wu, Y.; Jing, H.; Dong, Z.; Zhao, Q.; Wu, H.; Li, F., *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 7412; (c) Guerchais, V.; Fillaut, J.-L., *Coord. Chem. Rev.* **2011**, *255*, 2448.
  26. Lo, K. K.-W.; Li, S. P.-Y., *RSC Adv.* **2014**, *4*, 10560.
  27. (a) Berenguer, J. R.; Fernández, J.; Gil, B.; Lalinde, E.; Sánchez, S., *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 2574; (b) Berenguer, J. R.; Lalinde, E.; Moreno, M. T., *Coord. Chem. Rev.* **2010**, *254*, 832.
  28. Wong, Y. S.; Ng, M.; Yeung, M. C.; Yam, V. W., *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 973.
  29. (a) Teo, B. K.; Xu, Y. H.; Zhong, B. Y.; He, Y. K.; Chen, H. Y.; Qian, W.; Deng, Y. J.; Zou, Y. H., *Inorg. Chem.* **2001**, *40*, 6794; (b) Koshevoy, I. O.; Karttunen, A. J.; Lin, Y.-C.; Lin, C.-C.; Chou, P.-T.; Tunik, S. P.; Haukka, M.; Pakkanen, T. A., *Dalton Trans.* **2010**, *39*, 2395.
  30. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.* **2015**, *71*, 3.
  31. Farrugia, L. J., *Appl. Crystallogr.* **1999**, *32*, 837.

- 
32. Sheldrick, G. M., *Acta Crystallogr C Struct Chem* **2015**, *71*, 3.
  33. M. J. Frisch, G. W. T., H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. V. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J. J. Heyd, E. N. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. P. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian 16, Revision A.03, Inc., Wallingford CT, 2016.
  34. (a) Becke, A. D., *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648; (b) Becke, A. D., *Phys. Rev. A* **1988**, *38*, 3098.
  35. Wadt, W. R.; Hay, P. J., *J. Chem. Phys.* **1985**, *82*, 284.
  36. Barone, V.; Cossi, M., *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 1995.
  37. O'Boyle, N. M.; Tenderholt, A. L.; Langner, K. M., *J. Comput. Chem.* **2008**, *29*, 839.