

6.5 References

- (1) Nam, W. *Acc. Chem. Res.* **2007**, *40*, 465-634.
- (2) de Montellano, P. R. O. *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 932-948.
- (3) Krest, C. M.; Onderko, E. L.; Yosca, T. H.; Calixto, J. C.; Karp, R. F.; Livada, J.; Rittle, J.; Green, M. T. *J. Biol. Chem.* **2013**, *288*, 17074-17081.
- (4) Nocera, D. G. *Acc. Chem. Res.* **2012**, *45*, 767-776.
- (5) Blakemore, J. D.; Crabtree, R. H.; Brudvig, G. W. *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 12974-13005.
- (6) Comba, P.; Rajaraman, G. *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 78-93.
- (7) Bautz, J.; Comba, P.; Laorden, C. L.; Menzel, M.; Rajaraman, G. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2007**, *46*, 8067-8070.
- (8) Comba, P.; Rajaraman, G.; Rohwer, H. *Inorg. Chem.* **2007**, *46*, 3826-3838.
- (9) de Montellano, P. R. O. *Cytochrome P450: Structure, Mechanism and Biochemistry*; Kluwer Academic/Plenum Publishers, 3rd Ed. New York, **2004**.
- (10) Rittle, J.; Green, M. T. *Science* **2010**, *330*, 933-937.
- (11) Meunier, B. Ed. *Metal-Oxo and Metal-Peroxo Species in Catalytic Oxidations* Springer-Verlag; Berlin, Germany, 2000.
- (12) de Montellano, P. R. O. *Cytochrome P450: Structure, Mechanism, and Biochemistry*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 3rd Ed. New York, **2005**.
- (13) Sono, M.; Roach, M. P.; Coulter, E. D.; Dawson, J. H. *Chem. Rev.* **1996**, *96*, 2841-2887.
- (14) Groves, J. T. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2003**, *100*, 3569-3574.
- (15) Denisov, I. G.; Makris, T.M.; Sligar, S. G.; Schlichting, I. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 2253-2277.

- (16) Makris, T. M.; Koenig, K. V.; Schlichting, I.; Sligar, S. G. *J. Inorg. Biochem.* **2006**, *100*, 507-518.
- (17) Meunier, B.; de Visser, S. P.; Shaik, S. *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 3947-3980.
- (18) Betley, T. A.; Wu, Q.; Voorhis, T. V.; Nocera, D. G. *Inorg. Chem.* **2008**, *47*, 1849-1861.
- (19) Mullins, C. S.; Pecoraro, V. L. *Coord. Chem. Rev.* **2008**, *252*, 416-443.
- (20) Cady, C. W.; Crabtree, R. H.; Brudvig, G. W. *Coord. Chem. Rev.* **2008**, *252*, 444-455.
- (21) McEvoy, J. P.; Brudvig, G. W. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 4455-4483.
- (22) Nocera, D. G. *Inorg. Chem.* **2009**, *48*, 10001-10017.
- (23) McEvoy, J.P.; Brudvig, G. W. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 4455-4483.
- (24) Lewis, N. S.; Nocera, D. G. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2006**, *103*, 15729-15735.
- (25) Winkler, J. R.; Gray, H. B. *Struct. Bond.* **2012**, *142*, 17-28.
- (26) Ballhausen, C. J.; Gray, H. B. *Inorg. Chem.* **1962**, *1*, 111-122.
- (27) Ray, K.; Heims, F.; Pfaff, F. F. *Inorg. Chem.* **2013**, *22*, 3784-3807.
- (28) Cho, J.; Woo, J.; Han, J. E.; Kubo, M.; Ogurab, T.; Nam, W. *Chem. Sci.* **2011**, *2*, 2057-2062.
- (29) Chen, Z.; Yin, G. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 1083-1100.
- (30) Liu, L. V.; Hong, S.; Cho, J.; Nam, W.; Solomon, E. I. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 3286-3299.
- (31) Chen, Z.; Yin, G. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 1083-1100.
- (32) Neu, H. M.; Baglia, R. A.; Goldberg, D. P. *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 2754-2764.
- (33) Swart, M.; Costas, M. *Spin States in Biochemistry and Inorganic Chemistry: Influence on Structure and Reactivity*, Wiley, 2015.
- (34) Pattanayak, S.; Jasiewski, A. J.; Rana, A.; Draksharapu, A.; Kundan, K. S.; Wietz, A.; Hendrich, M.; Que, L., Jr.; Dey, A.; Gupta, S. S. *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 6352-6361.

- (35) Mukherjee, G.; Calvin, W. Z.; Lee, S. S.; Nag, A. A.; Cantu F. G.; Reinhard, D. K.; Sastri, C. V.; de Visser, S. P. *Dalton Trans.* **2018**, *47*, 14945-14957.
- (36) Kleespies, S. T.; Oloo, W. N.; Mukherjee, A.; Que, L., Jr. *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 5053-5064.
- (37) Hohenberger, J.; Ray, K.; Meyer, K. *Nat. Commun.* **2012**, *3*, 720-732.
- (38) Nam, W.; Lee, Y.-M.; Fukuzumi, S. *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, 1146-1154.
- (39) Ray, K.; Pfaff, F. F.; Wang, B.; Nam, W. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 13942-13958.
- (40) Gunay, A.; Theopold, K. H. *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 1060-1081.
- (41) Janardanan, D.; Wang, Y.; Schyman, P.; Que, L., Jr.; Shaik, S. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2010**, *49*, 3342-3345.
- (42) Mayer, J. M. *Inorg. Chem.* **1988**, *8*, 125-135.
- (43) Holm, R. H. *Chem. Rev.* **1987**, *87*, 1401-1449.
- (44) Gray, H. B.; Winkler, J. R.; *Acc. Chem. Res.* **2018**, *51*, 1850-1857.
- (45) Mukerjee, S.; Skogerson, K.; DeGala, S.; Caradonna, J. P. *Inorg. Chim. Acta.* **2000**, *297*, 313-329.
- (46) Gray, H. B.; Hare, C. R. *Inorg. Chem.* **1962**, *1*, 363-368.
- (47) OHalloran, K. P.; Zhao, C.; Ando, N. S.; Schultz, A. J.; Koetzle T. F.; Piccoli, P. M. B.; Hedman, B.; Hodgson, K. O.; Bobyr, E.; kirk, M. L.; Knottenbelt, S.; Depperman, E. C.; Stein, B.; Anderson, T. M.; Cao, R.; Geletii, Y. V.; Hardcastle, K. I.; Musaev, D. G.; Neiwert, W. A.; Fang, X.; MoroKuma, K. *Inorg. Chem.* **2012**, *51*, 7025-7031.
- (48) Hong, S.; Pfaff, F. F.; Kwon, E.; Wang, Y.; Seo, M.-S.; Bill, E.; Ray, K.; Nam, W. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2014**, *53*, 10403-10407.
- (49) Grapperhaus, C. A.; Mienert, B.; Bill, E.; Weyhermüller, T.; Wieghardt, K. *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 5306-5317.
- (50) Parsell, T. H.; Yang, M. Y.; Borovik, A. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 2762-2763.

- (51) Gupta, R.; Borovik, A. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 13234-13242.
- (52) Gupta, R.; MacBeth, C. E.; Young, V. G.; Borovik, A. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 1136-1137.
- (53) Shirin, Z.; Hammes, B. S.; Young, V. G.; Borovik, A. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 1836-1837.
- (54) Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Li, X.; Caricato, M.; Marenich, A. V.; Bloino, J.; Janesko, B. G.; Gomperts, R.; Mennucci, B.; Hratchian, H. P.; Ortiz, J. V.; Izmaylov, A. F.; Sonnenberg, J. L.; Williams-Young, D.; Ding, F.; Lipparini, F.; Egidi, F.; Goings, J.; Peng, B.; Petrone, A.; Henderson, T.; Ranasinghe, D.; Zakrzewski, V. G.; Gao, J.; Rega, N.; Zheng, G.; Liang, W.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Throssell, K.; Montgomery, J. A., Jr.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M. J.; Heyd, J. J.; Brothers, E. N.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Keith, T. A.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K. A.; Rendell, P.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Martin, C. M.; Millam, J. M.; Klene, M.; Adamo, C.; Cammi, R.; Ochterski, J. W.; Morokuma, R. L. K. O.; Farkas, F. J. B.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
- (55) Becke, A. D. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648-5652.
- (56) Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **1988**, *37*, 785-789.
- (57) Grimme, S. *J. Comput. Chem.* **2006**, *27*, 1787-1799.
- (58) Chai, J. D.; Head-Gordon, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 6615-6620.
- (59) Ansari, A.; Kaushik, A.; Rajaraman, G. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 4235-4249.
- (60) Ansari, A.; Jayapal, P.; Rajaraman, G. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2015**, *127*, 564-568.

- (61) Engelmann, X.; Monte-Pérez, I.; Ray, K. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2016**, *55*, 7632-7649.
- (62) Monika; Ansari, A. *New J. Chem.* **2020**, *44*, 19103-19112.
- (63) Ansari, A.; Ansari, M.; Singha A.; Rajaraman, G. *Chem. -Eur. J.* **2017**, *23*, 10110-10125.
- (64) Ansari, A.; Jayapal, P.; Rajaraman, G. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2015**, *127*, 564-568.
- (65) Kumar, R.; Ansari, A.; Rajaraman, G. *Chem. -Eur. J.* **2018**, *24*, 6660-6860.
- (66) Dunning, T. H. Jr.; Hay, P. J. *In Modern Theoretical Chemistry* (Ed: Schaefer, H. F.), Plenum, New York, 1976; Vol. 3.
- (67) Hay, P. J.; Wadt, W. R. *J. Chem. Phys.* **1985**, *82*, 270-283.
- (68) Neisen, B. D.; Gagnon N. L.; Dhar D.; Spaeth A. D.; Tolman B. W. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 10220-10223.
- (69) Schaefer, A.; Horn, H.; Ahlrichs, R. *J. Chem. Phys.* **1992**, *97*, 2571-2577.
- (70) Schaefer, C.; Huber, C.; Ahlrichs, R. *Chem. Phys.* **1994**, *100*, 5829-5835.
- (71) Pfaff, F. F.; Kundu, S.; Risch, M.; Pandian, S.; Heims, S.; Ray, P.; Haack, P.; Metzinger, R.; Bill, E.; Dau, H.; Comba, P. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, *50*, 1711-1715.
- (72) Shaik, S.; Chen, H.; Janardanan, D. *Nat. Chem.* **2011**, *3*, 19-27.
- (73) Swart, M. A. *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 6650-6652.
- (74) Prakash, J.; Rohde T. G.; Meier, K. K.; Jasniewski, A. J.; Heuvelen, K. M. V.; Munck, E.; Que, L., Jr. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 3478-3481.
- (75) Lacy, D. C.; Park, Y. J.; Ziller, J. W.; Yano, J.; Borovik, A. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 17526-17535.
- (76) Shimoyama, Y.; Kojima, T. *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 9517-9542.