

Table S1 The spin densities on the Mn(III) centers and ligand atoms of model A'

Bridging angles	Mn1	Mn2	O1	O2	O3	O4	O5	O6	N1	N2	N3	N4
91	3.849	3.848	0.012	0.011	0.009	0.101	0.004	0.101	0.015	0.053	0.052	0.014
95	3.838	3.839	0.019	0.019	0.009	0.096	0.009	0.096	0.017	0.052	0.052	0.017
99	3.816	3.816	0.047	0.047	-0.016	0.091	0.016	0.091	0.021	0.046	0.046	0.021
103	3.793	3.784	0.044	0.044	-0.028	0.091	0.014	0.087	0.022	0.044	0.046	0.021
107	3.770	3.760	0.041	0.041	-0.032	0.087	0.017	0.083	0.024	0.041	0.044	0.023
111	3.746	3.746	0.037	0.036	-0.027	0.079	0.027	0.080	0.026	0.037	0.037	0.026
115	3.719	3.719	0.033	0.033	-0.030	0.077	0.030	0.077	0.026	0.034	0.034	0.026
119	3.695	3.695	0.030	0.030	-0.033	0.075	0.033	0.075	0.026	0.031	0.031	0.026

Table S2 The spin densities on the Mn(III) centers and ligand atoms of model B'

Bridging angles	Mn1'	Mn2'	O1'	O2'	O3'	O4'	N1'	N2'	N3'	N4'	N5'	N6'
91	3.923	3.853	0.048	0.140	0.042	0.056	0.043	0.032	0.025	0.034	0.031	0.007
95	3.887	3.843	0.012	0.149	0.040	0.060	0.042	0.031	0.029	0.037	0.031	0.012
99	3.820	3.802	0.005	0.092	0.034	0.108	0.042	0.029	0.032	0.039	0.030	0.021
103	3.801	3.768	0.011	0.098	0.033	0.102	0.038	0.028	0.036	0.036	0.029	0.025
107	3.777	3.733	0.014	0.103	0.031	0.097	0.034	0.026	0.040	0.033	0.027	0.030
111	3.746	3.692	0.017	0.109	0.028	0.092	0.029	0.025	0.045	0.029	0.026	0.034
115	3.718	3.658	0.018	0.112	0.026	0.087	0.025	0.023	0.048	0.025	0.024	0.037
119	3.684	3.620	0.018	0.114	0.024	0.081	0.020	0.020	0.052	0.020	0.022	0.040