

Научная статья

УДК 538.95, 538.915

DOI: 10.18384/2949-5067-2026-1-6-15

ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИЙ ЭФФЕКТ В МЕТАЛЛОФТАЛОЦИАНИНАХ КАК УПРАВЛЯЮЩИЙ ПАРАМЕТР СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ

Сунегин Д. Е.^{1*}, Беляев В. В.^{1,2}

¹ Государственный университет просвещения, г. Москва, Российская Федерация

² Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, г. Москва, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор, e-mail: Sunegen.D@mail.ru

Поступила в редакцию 27.12.2025

Принята к публикации 22.01.2026

Аннотация

Цель: систематизировать экспериментальные и теоретические данные о ян – теллеровском эффекте в металлофталочинанинах (МРС) и выявить его роль как универсального управляющего параметра структурных, электронных и магнитных свойств.

Процедура и методы. Проведён анализ результатов, полученных методами рентгеноструктурного анализа, электронной дифракции, сканирующей туннельной микроскопии, рамановской спектроскопии, электронного парамагнитного резонанса и расчётов функционала плотности. Обобщены экспериментальные и теоретические данные из международных источников.

Результаты. Показано, что образование анион-радикалов $[MPC]^-$ вызывает ян – теллеровскую деформацию макроцикла с амплитудой $R_{дист} \approx 0.03\text{--}0.07 \text{ \AA}$. Установлены прямые корреляции между амплитудой деформации и: (1) энергией активации электротранспорта, (2) подвижностью носителей заряда, (3) селективностью в электрокатализе CO_2/CO . Потенциал-индуцированная ян – теллеровская деформация центра CoN_4 изменяет механизм адсорбции CO (линейная (linear) 0.52 эВ → мостиковая (bridge) 1.80 эВ), обеспечивая управление каталитической селективностью без химического изменения молекулы.

Теоретическая и практическая значимость. Сформирована концепция ян – теллеровского эффекта как фундаментального механизма функциональности МРС. Предложены методы целенаправленного управления структурными и электронными свойствами через электрохимический потенциал, допирование или фторирование. Определены некоторые пробелы и рекомендованы методологические подходы для их разрешения.

Ключевые слова: металлофталочянины, органическая электроника, электрокатализ, электротранспорт, Ян – теллеровский эффект

Для цитирования:

Сунегин Д. Е., Беляев В. В. Эффект Яна – Теллера как управляющий параметр структурных и электронных свойств // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2026. № 1. С. 6–15. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2026-1-6-15>

Original research article

JAHN–TELLER EFFECT IN PHTALOCYANINE DERIVATIVES AS A CONTROLLING PARAMETER OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES

D. Sunegin¹, V. Belyaev²

¹ Federal State University of Education, Moscow, Russian Federation

² People's Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba, Moscow, Russian Federation

* Corresponding author, e-mail: Sunegen.D@mail.ru

Received by the editorial office 27.12.2025

Accepted for publication 22.01.2026

Abstract

Aim: to systematize experimental and theoretical data on the Jahn–Teller effect in metallophthalocyanines (MPc) and identify its role as a universal controlling parameter of structural, electronic, and magnetic properties.

Methodology. Results obtained by X-ray diffraction, electron diffraction, scanning tunneling microscopy, Raman spectroscopy, electron paramagnetic resonance, and density functional theory calculations were analyzed. Experimental and theoretical data from international sources are summarized.

Results. It is shown that the formation of [MPc][–] anion radicals causes Jahn–Teller deformation of the macrocycle with an amplitude of $R_{\text{dist}} \approx 0.03\text{--}0.07$ Å. Direct correlations are established between the deformation amplitude and: (1) the activation energy of electrotransport, (2) the mobility of charge carriers, and (3) the selectivity in CO₂/CO electrocatalysis. Potential-induced Jahn–Teller deformation of the CoN₄ center changes the CO adsorption mechanism (linear 0.52 eV → bridge 1.80 eV), providing control of catalytic selectivity without chemical modification of the molecule.

Research implications. The concept of the Jahn–Teller effect as a fundamental mechanism of MPc functionality is formulated. Methods for targeted control of the structural and electronic properties through electrochemical potential, doping, or fluorination are proposed. Several gaps are identified, and methodological approaches to address them are recommended.

Keywords: metal phthalocyanines, organic electronics, electrocatalysis, electrotransport, Jahn–Teller effect

For citation:

Sunegin, D. E. & Belyaev, V. V. (2026). Jahn–Teller effect as a controlling parameter of structural and electronic properties. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 1, pp. 6–15. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2026-1-6-15>

Введение

Металлофталочианины (MPc) представляют собой молекулярные комплексы переходного металла с макроциклическим лигандом фталочианина (рис. 1а), обладающие сопряжённой π -электронной системой и демонстрирующие уникальные электрические и магнитные свойства. Применение этих соединений охватывает органические полевые транзисторы (подвижность до $2.6 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$) [1], электрокатализ (восстановление CO_2) [2] и магнитные материалы [3].

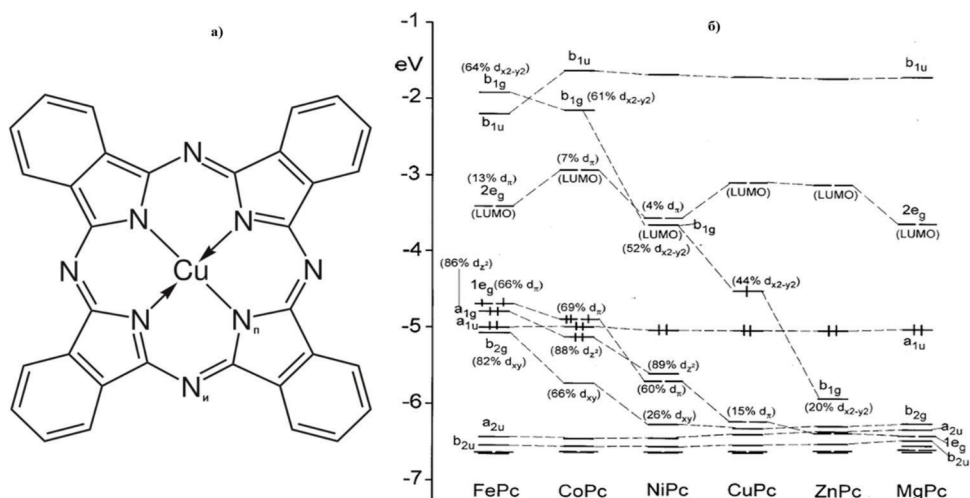


Рис. 1 / Fig. 1. Характерная структура MPc (M=Cu) (а); Диаграмма уровней МО для различных MPc (б) / Characteristic structure of MPc (M=Cu) (а); Diagram of MO levels for different MPc (б)

Источник: Arčon D., Blinc R. The Jahn–Teller Effect and Fullerene Ferromagnets // Fullerene-Based Materials / ed. K. Prassides. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004. P. 231–276 (Series: Structure and Bonding. Vol. 109). DOI: 10.1007/b94384

Ян–Теллеровский эффект описывает спонтанное понижение молекулярной симметрии в системах с орбитально вырожденными электронными состояниями (рис. 1б). В нейтральных MPc эффект слабо выражен благодаря отсутствию вырожденного заполненного уровня. Однако при допировании электронами молекулы возникает вырождение в LUMO-уровне (e_a в D_{4h} симметрии), инициирующее ЯТ-деформацию. Расщепление вырожденного уровня описывается соотношением $\Delta E = \alpha Q + O(Q^2)$, где Q – амплитуда деформации, α – константа взаимодействия Яна – Теллера [4].

1. Структурные деформации и электронная структура

1.1. Нейтральное состояние

Нейтральные MPc характеризуются плоской квадратной геометрией с D_{4h} симметрией. Расстояния M–N (расстояния между центральным атомом металла

и азотом) варьируются в диапазоне 1.91–2.06 Å в зависимости от центрального металла (минимум для NiPc: 1.913 Å; максимум для MgPc: 2.058 Å), коррелируя с ионным радиусом, например для степени окисления +2: Fe < Co < Ni < Cu < Zn < Mg [3]. Расхождения между OT-RSH расчётами DFT и экспериментом составляют 0.01–0.05 Å, подтверждая надёжность теоретического подхода. НОМО имеет симметрию a_{1u} с энергией 6.06–6.23 эВ (OT-RSH), согласующейся с экспериментальными ионизационными потенциалами (6.35–6.41 эВ). LUMO (e_a , дважды вырожденный) имеет сродство к электрону 1.91–2.07 эВ. НОМО–LUMO зазор составляет 2.0–2.5 эВ. Нейтральные МРс практически не демонстрируют ЯТ-деформации благодаря жёсткости макроцикла и отсутствию вырожденного заполненного уровня [5].

1.2. Анион–радикалы [МРс][–]

Одноэлектронное восстановление нарушает ароматичность 18π-электронной системы, переводя её в 19π-электронное состояние. Это приводит к качественному скачку в структурных параметрах. Разность между короткими и длинными С–N (иминные) связями скачкообразно возрастает с ~0.005–0.01 Å (нейтральный) до 0.020–0.045 Å (монанион), что в 3–5 раз больше. Амплитуда орторомбического гофрирования (ruffling) $R_{\text{дист}}$ составляет 0.030–0.032 Å (табл. 1), понижая симметрию $D_{4h} \rightarrow D_{2h}$ [6].

Таблица 1 / Table 1

Длина связей между С и N, величина искажения $R_{\text{дист}}$ / The length of the bonds between C and N, and the amount of distortion R_{dist}

Комплекс	Состояние	$\Delta \text{C–N}$, Å	$R_{\text{дист}}$, Å
TiIVOPc	нейтральный	~0.005	–
[TiIVOPc] [–]	монанион	0.022–0.039	0.030
[TiIVOPc] ^{2–}	дианион	0.065–0.083	0.074
VIVOPc	нейтральный	~0.004	–
[VIVOPc] [–]	монанион	0.020–0.036	0.03

Источник: [6]

Спектроскопические маркеры ЯТ-деформации включают сдвиги Рамановских полос (мода B_1' сдвигается на +6–7 см^{–1}) и появление полос поглощения в ближней инфракрасной области ($\lambda = 836$ –1022 нм) [7], характеризующих переходы делокализованного электрона по деформированному Pc^{3-} макроциклу. Энергетический выигрыш ЯТ-эффекта (1–10 мэВ) превосходит энергетическую цену конформационной деформации (5–50 мэВ), делая ЯТ-деформацию термодинамически выгодной при комнатной температуре.

2. Электротранспорт и управление свойствами

Транспорт носителей заряда в МРс может быть описан тремя режимами, коррелирующими с величиной ЯТ-деформации и энергией активации переноса заряда [8].

Режим 1 – Недопированные кристаллы: энергия активации $E_a = 1.60\text{--}1.71$ эВ, подвижность $\mu \approx 10^{-10}$ см²/(В·с) указывает на сильную локализацию заряда [9]. Различие между металлами ≤ 0.07 эВ демонстрирует определяющую роль π -системы макроцикла. Механизм транспорта интерпретируется как образование и диссоциация экситонов на дефектах кристалла [10]. ЯТ-расщепление LUMO ($\Delta E \approx 0.1\text{--}0.2$ эВ) локализует спиновую плотность на определённых фрагментах, создавая глубокие потенциальные ямы для захвата заряда [9; 11].

Режим 2 – TCNQ (тетрацианохинодиметан) – допирование: молекулярное допирование электронным акцептором TCNQ снижает энергию активации в 3.6–4.6 раза. При низких напряжениях проводимость омическая; при высоких доминирует ТОПЗ (space-charge limited current). Подвижность остаётся низкой ($10^{-8}\text{--}10^{-7}$ см²/(В·с)) [12], поскольку TCNQ действует как источник ловушек, упорядочивающих молекулярную структуру, но не увеличивающих внутреннюю подвижность.

Режим 3 – Фторирование: периферийное фторирование (F_{16} МРс) смещает LUMO на 0.7–0.8 эВ к более низким энергиям, преобразуя р-тип проводимости в n-тип. F_{16} ZnPc достигает электронной подвижности $\mu_e = 1.1$ см²/(В·с), возрастание на 4–5 порядков по сравнению с недопированным ZnPc. Оптимальный баланс достигается за счёт промежуточной электронной связи ($t_e = 33.3$ мэВ) и минимального электронно-фононного взаимодействия (параметр Хуана – Риса $S = 0.779$) [13]. В этом режиме ЯТ-эффект становится несущественным благодаря полосному (band-like) характеру переноса.

Переход между тремя режимами показывает, что ЯТ-деформация является ключевым параметром, определяющим локализацию и подвижность зарядов в недопированных системах, но может быть нивелирована химическим управлением электронной структурой (допирование, фторирование).

3. Электрокатализ и потенциал-индуцированное управление

Электрокаталитические свойства МРс демонстрируют крайне сильную зависимость от ЯТ-деформации, особенно в электрокатализе CO_2 и CO [2]. На примере CoPc/CNT показано, что приложенный электрохимический потенциал вызывает потенциал-индуцированную ЯТ-деформацию центра CoN_4 , трансформирующую геометрию адсорбции оксида углерода. При потенциале -0.8 В линейная конфигурация (linear) CO ($E_{\text{ads}} = 0.52$ эВ) переходит в мостиковую (bridged) ($E_{\text{ads}} = 1.80$ эВ) [14]. Механизм включает ослабление $\text{C}\text{--}\text{O}$ связи ($1.15 \rightarrow 1.21$ Å) вследствие ЯТ-индуцированного смещения d-орбиталей Co , облегчающего гидрирование промежуточных продуктов. Результирующая селективность восстановления CO достигает 47–53%, в то время как для CO_2 остаётся низкой (10–13%) [15]. Этот результат демонстрирует возможность управления ката-

литической селективностью электрохимическим потенциалом без химического изменения молекулы, что указывает на практическую ценность ЯТ-эффекта [16].

4. Магнитные свойства и перспективные приложения

Магнитные свойства МРс систематически варьируются вдоль d-ряда, следуя правилу Хунда: максимум магнитного момента ($4.80 \mu_B$) достигается при d^5 конфигурации ($MnPc$), минимум ($0 \mu_B$) при полной заполненности ($NiPc - d^8$, $ZnPc - d^{10}$). Несмотря на прямую корреляцию с d-конфигурацией, ЯТ-деформация оказывает косвенное влияние на магнитные свойства, модулируя параметры кристаллического поля (Dq) и создавая условия для переходов между высокоспиновым (HS) и низкоспиновым (LS) состояниями для комплексов с d^6 – d^7 конфигурациями. Периферийное фторирование практически не влияет на магнитные моменты, подтверждая, что воздействие фторирования локализуется в π -системе макроцикла [3].

В квантовых приложениях $FePc^-$ и $NiPc^-$ рассматриваются как перспективные молекулярные спиновые кубиты благодаря сильному сверхтонкому взаимодействию (95–110 МГц). ЯТ-стабилизация спинового состояния в восстановленных состояниях критична для повышения времени когерентности (T_2) и снижения спин-решёточной релаксации (T_1), что необходимо для масштабирования квантовых систем [17; 18].

5. Открытые вопросы

Несмотря на значительный прогресс, следующие вопросы остаются открытыми: (1) магнитные моменты дианионов $[MPc]^{2-}$ недостаточно исследованы; (2) механизмы и энергетические барьеры потенциал-индуцированных ЯТ-переходов неизвестны; (3) контроль молекулярной ориентации в конденсированном состоянии требует систематического изучения; (4) влияние ЯТ-деформации на интерфейсные явления в гибридных системах требует развития операндо методов спектроскопии [11; 19; 20].

Заключение

На основании приведённых в обзоре данных можно сделать вывод, что эффект Яна – Теллера в металлофталоцианинах является фундаментальным механизмом, детерминирующим функциональные свойства класса молекул. Амплитуда орторомбического гофрирования (ruffling) макроцикла ($R_{\text{дист}} \approx 0.03\text{--}0.07 \text{ \AA}$) напрямую коррелирует с модуляцией энергии активации электротранспорта (от 1.60–1.71 эВ до 0.37–0.46 эВ), подвижности зарядовых носителей (от 10^{-10} до $1.1 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$) и каталитической селективности (47–53% восстановление CO). Интеграция структурных, спектроскопических и электротранспортных данных выявляет прямую причинно-следственную связь между ЯТ-деформацией и физическими свойствами. Практическое значение состоит в возможности целенаправленного проектирования МРс-систем через управление ЯТ-деформацией посредством электрохимического потенциала, допирования или фторирования. Однако полная реализация потенциала требует дополнительных

исследований динамики ЯТ-переходов и применения интегрированного подхода (СТМ + PCA + ЭПР + операндо спектроскопия), который остаётся редкой практикой. Развитие многоэлектронных расчётов (CASSCF) наряду с экспериментальными исследованиями важно для прогресса в этой области.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gottfried J. M. Surface chemistry of porphyrins and phthalocyanines // *Progress in Surface Science*. 2015. Vol. 90. Iss. 3. P. 286–388. DOI: 10.1016/j.surfrep.2015.04.001.
2. A mechanism review of metal phthalocyanines as single-atomic catalysts in electrochemical energy conversion / Z. Li, Z. Zhou, M. Sun, T. Wu, Q. Lu, L. Lu, B. Chen, C. H. Chan, H. H. Wong, B. Huang // *Chemical Science*. 2025. Vol. 16. Iss. 31. P. 14019–14037. DOI: 10.1039/D5SC03210E.
3. Magnetic, electronic, and vibrational properties of metal phthalocyanines / O. I. Arillo-Flores, Z. Hu, U. Crisostomo, T. Yildirim, G. Kirczenow // *Physical Review B*. 2013. Vol. 87. Iss. 16. Article no. 165115. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.165115.
4. Jahn H. A., Teller E. Stability of polyatomic molecules in degenerate electronic states. I. Orbital degeneracy // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A – Mathematical and Physical Sciences*. 1937. Vol. 161. No. 905. P. 220–235. DOI: 10.1098/rspa.1937.0142.
5. Electronic structure of copper phthalocyanine from calculations and photoemission spectroscopy / N. Marom, L. Kronik, X. Koh, A. Kin, A. Aspuru-Guzik // *Physical Review B*. 2011. Vol. 84. Article no. 195143. DOI: 10.1063/1.1766295.
6. Ян-теллеровские деформации в анионах металлофталочианинов $[M^{IV}OPc]^{n-}$ ($M = Ti, V$) / А. В. Кузьмин, С. С. Хасанов, К. П. Мелетов, Р. П. Шибаева // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2019. Т. 155. № 6. С. 1037–1044. DOI: 10.1134/S0044451019060087.
7. Tackley D. R., Dent G., Smith E. Phthalocyanines: structure and vibrations // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2001. Vol. 3 (8). P. 1419–1426. DOI: 10.1039/b007763l.
8. Transition-Metal Phthalocyanines as Versatile Building Blocks for Molecular Qubits on Surfaces / C. Urdaniz, S. Taherpour, J. Yu, J. Reina-Gálvez, C. Wolf // *Journal of Physical Chemistry A*. 2025. Vol. 129. Iss. 9. P. 2173–2181. DOI: 10.1021/acs.jpca.4c07627.
9. Fielding P. E., Gutman F. Electrical properties of phthalocyanines // *Journal of Chemical Physics*. 1957. Vol. 26. Iss. 2. P. 411–419. DOI: 10.1063/1.1743311.
10. Mahapatro A. K., Ghosh S. Charge carrier transport in metal phthalocyanine based disordered thin films // *Journal of Applied Physics*. 2006. Vol. 101. Iss. 3. DOI: 10.1063/1.2434946.
11. Large Orbital Moment and Dynamical Jahn–Teller Effect of AlCl–Phthalocyanine on Cu(100) / C. Li, M.-L. Bocquet, Y. Lu, N. Lorente, M. Gruber, R. Berndt, A. Weismann // *Physical Review Letters*. 2024. Vol. 133. Article no. 126201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.126201.
12. Optical absorption and electrical properties of MPc ($M = Fe, Cu, Zn$)–TCNQ interfaces for optoelectronic applications / M. E. Sánchez-Vergara, D. Medrano-Gallardo,

- I. L. Vera-Estrada, O. Jiménez-Sandoval // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2018. Vol. 115. P. 373–380. DOI: 10.1016/j.jpcs.2018.01.005.
13. Fluorination of metal phthalocyanines: Single-crystal growth, efficient n-channel organic field-effect transistors, and structure-property relationships / H. Jiang, J. Ye, P. Hu, F. Wei, K. Du, N. Wang, T. Ba, S. Feng, C. Kloc // *Scientific Reports*. 2014. Vol. 4. Article no. 7573. DOI: 10.1038/srep07573.
 14. Stabilizing *CO₂ intermediates at the acidic interface using molecularly dispersed cobalt phthalocyanine as catalysts for CO₂ reduction / S. Feng, X. Wang, D. Cheng, Y. Luo, M. Shen et al. // *Angewandte Chemie*. 2024. Vol. 63. Iss. 8. Article no. e202317942. DOI: 10.1002/ange.202317942.
 15. Highly selective and active CO₂ reduction electrocatalysts based on cobalt phthalocyanine/carbon nanotube hybrid structures / Xing Zhang, Zishan Wu, Xiao Zhang, Liewu Li, Yanyan Li, et al. // *Nature Communications*. 2017. Vol. 8. Article no. 14675. DOI: 10.1038/ncomms14675.
 16. Potential-driven structural distortion in cobalt phthalocyanine for electrocatalytic CO₂/CO reduction towards methanol / H. Yang, N. Guo, S. Xi, Y. Wu, B. Yao et al. // *Nature Communications*. 2024. Vol. 15. Iss. 1. Article no. 7703. DOI: 10.1038/s41467-024-52168-x.
 17. Spin-communication channels between Ln(III) bis-phthalocyaninato single-ion magnets and ferromagnetic surfaces / A. Candini, S. Klyatskaya, M. Ruben, W. Wernsdorfer, M. Affronte // *Scientific Reports*. 2016. Vol. 6. Article no. 21740. DOI: 10.1038/srep21740.
 18. Dynamical Screening of Local Spin Moments at Metal-Molecule Interfaces / S. Bhandary, E. Poli, G. Teobaldi, D. O'Regan // *ACS Nano*. 2023. Vol. 17. Iss. 6. P. 5974–5983. DOI: 10.1021/acsnano.3c00247.
 19. Scanning Tunneling Microscopy Reveals Surface Diffusion of Single Double-Decker Phthalocyanine Molecules at the Solution/Solid Interface / S. Rana, K. N. Johnson, K. Gurdumov, U. Mazur, K. W. Hipps // *Journal of Physical Chemistry C*. 2022. Vol. 126. Iss. 8. P. 4140–4149. DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c08103.
 20. Geometric Structure, Electronic, and Spectral Properties of Metal-free Phthalocyanine under the External Electric Fields / Y.-J. Yang, S.-X. Li, D.-L. Chen, Z.-W. Long // *ACS Omega*. 2022. Vol. 7. Iss. 45. P. 41266–41274. DOI: 10.1021/acsomega.2c04941.

REFERENCES

1. Gottfried, J. M. (2015). Surface chemistry of porphyrins and phthalocyanines. In: *Progress in Surface Science*, 90 (3), 286–388. DOI: 10.1016/j.surfrep.2015.04.001.
2. Li, Z., Zhou, Z., Sun, M., Wu, T., Lu, Q., Lu, L., Chen, B., Chan, C. H., Wong, H. H. & Huang, B. (2025). A mechanism review of metal phthalocyanines as single-atomic catalysts in electrochemical energy conversion. In: *Chemical Science*, 16 (31), 14019–14037. DOI: 10.1039/D5SC03210E.
3. Arillo-Flores, O. I., Hu, Z., Crisostomo, U., Yildirim, T. & Kirczenow, G. (2013). Magnetic, electronic, and vibrational properties of metal phthalocyanines. In: *Physical Review B*, 87 (16), 165115. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.165115.

4. Jahn, H. A. & Teller, E. (1937). Stability of polyatomic molecules in degenerate electronic states. I. Orbital degeneracy. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A – Mathematical and Physical Sciences*, 161 (905), 220–235. DOI: 10.1098/rspa.1937.0142.
5. Marom, N., Kronik, L., Koh, X., Kin, A. & Aspuru-Guzik A. (2011). Electronic structure of copper phthalocyanine from calculations and photoemission spectroscopy. In: *Physical Review B*, 84, 195143. DOI: 10.1063/1.1766295.
6. Khasanov, S. S., Kuzmin, A. V., Meletov, K. P. & Shibaeva, R. P. (2019). Jahn–Teller distortions of metal phthalocyanine anions $[M^{IV}OPc]^{n-}$ ($M = Ti, V$). In: *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 128 (6), 878–884. DOI: 10.1134/S1063776119050133.
7. Tackley, D. R., Dent, G. & Smith, E. (2001). Phthalocyanines: structure and vibrations. In: *Physical Chemistry Chemical Physics*, 3 (8), 1419–1426. DOI: 10.1039/b007763l.
8. Urdaniz, C., Taherpour, S., Yu, J., Reina-Gálvez, J. & Wolf, C. (2025). Transition-Metal Phthalocyanines as Versatile Building Blocks for Molecular Qubits on Surfaces. In: *Journal of Physical Chemistry A*, 129 (9), 2173–2181. DOI: 10.1021/acs.jpca.4c07627.
9. Fielding, P. E. & Gutman, F. (1957). Electrical properties of phthalocyanines. In: *Journal of Chemical Physics*, 26 (2), 411–419. DOI: 10.1063/1.1743311.
10. Mahapatro, A. K. & Ghosh, S. (2006). Charge carrier transport in metal phthalocyanine based disordered thin films. In: *Journal of Applied Physics*, 101 (3). DOI: 10.1063/1.2434946.
11. Li, C., Bocquet, M.-L., Lu, Y., Lorente, N., Gruber, M., Berndt, R. & Weismann, A. (2024). Large Orbital Moment and Dynamical Jahn–Teller Effect of AlCl–Phthalocyanine on Cu(100). In: *Physical Review Letters*, 133, no. 126201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.126201.
12. Sánchez-Vergara, M. E., Medrano-Gallardo, D. Vera-Estrada, I. L. & Jiménez-Sandoval, O. (2018). Optical absorption and electrical properties of MPc ($M = Fe, Cu, Zn$)–TCNQ interfaces for optoelectronic applications. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 115, 373–380. DOI: 10.1016/j.jpcs.2018.01.005.
13. Jiang, H., Ye, J., Hu, P., Wei, F., Du, K., Wang, N., Ba, T., Feng, S. & Kloc, C. (2014). Fluorination of metal phthalocyanines: Single-crystal growth, efficient n-channel organic field-effect transistors, and structure–property relationships. In: *Scientific Reports*, 4, 7573. DOI: 10.1038/srep07573.
14. Feng, S., Wang, X., Cheng, D., Luo, Y. & Shen, M. et al. (2024). Stabilizing *CO_2 intermediates at the acidic interface using molecularly dispersed cobalt phthalocyanine as catalysts for CO_2 reduction. In: *Angewandte Chemie*, 63 (8), e202317942. DOI: 10.1002/ange.202317942.
15. Zhang, Xing, Wu, Zishan, Zhang, Xiao, Li, Liewu & Li, Yanyan et al. (2017). Highly selective and active CO_2 reduction electrocatalysts based on cobalt phthalocyanine/carbon nanotube hybrid structures. In: *Nature Communications*, 8, 14675. DOI: 10.1038/ncomms14675.
16. Yang, H., Guo, N., Xi, S., Wu, Y. & Yao, B. et al. (2024). Potential-driven structural distortion in cobalt phthalocyanine for electrocatalytic CO_2/CO reduction towards methanol. In: *Nature Communications*, 15 (1), 7703. DOI: 10.1038/s41467-024-52168-x.

17. Candini, A., Klyatskaya, S., Ruben, M., Wernsdorfer, W. & Affronte, M. (2016). Spin-communication channels between Ln(III) bis-phthalocyaninato single-ion magnets and ferromagnetic surfaces. In: *Scientific Reports*, 6, 21740. DOI: 10.1038/srep21740.
18. Bhandary, S., Poli, E., Teobaldi, G. & O'Regan, D. (2023). Dynamical Screening of Local Spin Moments at Metal-Molecule Interfaces. In: *ACS Nano*, 17 (6), 5974–5983. DOI: 10.1021/acsnano.3c00247.
19. Rana, S. Johnson, K. N., Gurdumov, K., Mazur, U. & Hipps, K. W. (2022). Scanning Tunneling Microscopy Reveals Surface Diffusion of Single Double-Decker Phthalocyanine Molecules at the Solution/Solid Interface. In: *Journal of Physical Chemistry C*, 126 (8), 4140–4149. DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c08103.
20. Yang, Y.-J., Li, S.-X., Chen, D.-L. & Long, Z.-W. (2022). Geometric Structure, Electronic, and Spectral Properties of Metal-free Phthalocyanine under the External Electric Fields. In: *ACS Omega*, 7 (45), 41266–41274. DOI: 10.1021/acsomega.2c04941.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Сунегин Дмитрий Евгеньевич (г. Москва) – аспирант физико-математического факультета Государственного университета просвещения;
<https://orcid.org/0000-0002-2323-9706>; e-mail: Sunegen.D@mail.ru

Беляев Виктор Васильевич (г. Москва) – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник отдела организации научных исследований и международных связей управления развития науки; профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; профессор нанотехнологий и микросистемной техники Российского университета дружбы народов имени Патриса Лумумбы;
<https://orcid.org/0000-0003-0553-9358>; e-mail: vv.belyaev@guppros.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Dmitry E. Sunegin (Moscow) – Postgraduate Student, Faculty of Physics and Mathematics, Federal State University of Education;
<https://orcid.org/0000-0002-2323-9706>; e-mail: Sunegen.D@mail.ru

Victor V. Belyaev (Moscow) – Dr. Sci. (Engineering), Prof., Principal Scientist, Science Development Department; Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; Prof., Department of Nanotechnologies and Microsystem Technology, Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba;
<https://orcid.org/0000-0003-0553-9358>; e-mail: vv.belyaev@guppros.ru

Благодарность

Работа выполнена по совместному российско-индийскому проекту: грант РНФ № 25-49-01022 «Новые нанокompозитные материалы с дискотическими жидкими кристаллами и наночастицами для высокоэффективных оптоэлектронных и электрооптических устройств», <https://rscf.ru/project/25-49-01022>.

Acknowledgement

This research was fully supported by a joint Russia-India grant: the Russian Science Foundation, project No. RSF No. 25-49-01022. <https://rscf.ru/project/25-49-01022>.