



Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 538.915

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2025.27/12492>

Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры диоксида ниобия

М. Д. Манякин✉, С. И. Курганский, Ю. С. Какулия, С. С. Титова, О. А. Чувенкова,
С. Ю. Турищев

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация

Аннотация

В работе проводится исследование электронно-энергетического строения диоксида ниобия. Методом линейаризованных присоединенных плоских волн выполнено компьютерное моделирование электронного строения NbO_2 с кристаллической структурой рутила. Рассчитаны энергетическая зонная структура, полная и парциальные плотности электронных состояний.

С использованием синхротронного и лабораторного источников рентгеновского излучения проведены экспериментальные исследования электронного строения образца NbO_2 . Зарегистрированы рентгеновский фотоэлектронный спектр валентной области и субвалентных состояний NbO_2 и спектр ближней тонкой структуры К-края поглощения рентгеновского излучения атома кислорода в NbO_2 .

Проведено моделирование спектров ближней тонкой структуры К-края поглощения рентгеновского излучения атомов ниобия и кислорода. Вычисленные спектры позволяют надежно интерпретировать данные синхротронного эксперимента. Показано, что для NbO_2 спектр, рассчитанный для основного энергетического состояния без применения метода моделирования суперъячейки и остовной дырки, демонстрирует высокое согласие с экспериментом.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, диоксид ниобия, электронная структура, плотность состояний, XANES, XPS, остовная дырка, рутил

Источник финансирования: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-00145, <https://rscf.ru/project/22-72-00145/>.

Для цитирования: Манякин М. Д., Курганский С. И., Какулия Ю. С., Титова С. С., Чувенкова О. А., Турищев С. Ю. Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры диоксида ниобия. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2025;27(1): 146–153. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2025.27/12492>

For citation: Manyakin M. D., Kurganskii S. I., Kakuliia I. S., Titova S. S., Chuvenkova O. A., Turishchev S. Yu. Theoretical and experimental study of the niobium dioxide electronic structure. *Condensed Matter and Interphases*. 2025;27(1): 146–153. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2025.27/12492>

✉ Манякин Максим Дмитриевич, e-mail: manyakin@phys.vsu.ru

© Манякин М. Д., Курганский С. И., Какулия Ю. С., Титова С. С., Чувенкова О. А., Турищев С. Ю., 2025



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

1. Введение

Материалы, в которых наблюдается фазовый переход металл-полупроводник, могут использоваться для создания различных электронных, оптических и других устройств: элементов памяти, нейроморфных аппаратных устройств, «умных окон», устройств для выработки и хранения энергии и т. д. [1–4]. К подобным материалам относится диоксид ниобия NbO₂ [3, 5, 6]. Выше температуры фазового перехода (для NbO₂ T_c ≈ 808 °С) этот материал обладает кристаллической структурой типа классического рутила (пр. гр. симметрии P4₂/mnm) и является проводником электрического тока [7, 8]. Ниже указанной температуры кристаллическая структура NbO₂ изменяется на искаженную структуру рутила (пространственная группа симметрии I4₁/a), что сопровождается изменением характера проводимости на полупроводниковый [7, 8].

В настоящей работе с целью изучения особенностей электронно-энергетического строения диоксида ниобия проводится всестороннее исследование, включающее применение методов ab initio компьютерного моделирования, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (X-ray photoelectron spectroscopy – XPS) и спектроскопии ближней тонкой структуры края поглощения рентгеновского излучения (X-ray absorption near edge structure – XANES).

2. Методика расчетов

Высокотемпературная фаза диоксида ниобия имеет кристаллическую структуру рутила, относится к тетрагональной сингонии и характеризуется пространственной группой симметрии P4₂/mnm [3, 7, 9]. В расчете использовались приведенные в табл. 1 экспериментальные значения параметров кристаллической структуры NbO₂ [10], аналогично другим работам [9, 11, 12]. Внешний вид элементарной ячейки NbO₂ и соответствующая ей первая зона Бриллюэна приведены на рис. 1а, б.

Расчеты электронной структуры были выполнены методом линейаризованных присоединенных плоских волн с использованием программного пакета Wien2k [13]. Для учета обменно-корреляционной энергии использовалось обобщенное градиентное приближение (Generalized Gradient Approximation – GGA) [14]. Радиусы muffin-tin сфер атомов R_{mt}, выраженные в атомных единицах длины (численно равных Боровскому радиусу a₀), были равны 1.98 а.е.д. для атома Nb и 1.79 а.е.д. для атома O. Величина R_{mt}·K_{max}, определяющая величину базисного набора плоских волн, была равна 6.0. При интегрировании по зоне Бриллюэна использовалось 5000 k-точек при расчете элементарной ячейки и 200 k-точек при расчете суперъячейки.

Моделирование спектров XANES проводилось как для элементарной ячейки в основном энергетическом состоянии, так и для суперъячейки 2×2×3 с применением метода остовой дырки. Формализм этого метода подробно описан в нашей предыдущей работе [15]. Ранее метод был успешно апробирован при расчете спектров XANES различных оксидных материалов [16, 17].

Моделирование спектров XANES проводилось как для элементарной ячейки в основном энергетическом состоянии, так и для суперъячейки 2×2×3 с применением метода остовой дырки. Формализм этого метода подробно описан в нашей предыдущей работе [15]. Ранее метод был успешно апробирован при расчете спектров XANES различных оксидных материалов [16, 17].

3. Методика эксперимента

Экспериментальная часть работы состояла в проведении исследований образца коммерческого порошка NbO₂ производства Sigma-Aldrich [18] методами рентгеновской спектроскопии XPS и XANES. Проведение рентгенофазового анализа образца показало, что он обладает кристаллической структурой искаженного рутила (пр. гр. симметрии I4₁/a).

Эксперименты проводили в НИЦ «Курчатовский институт» на станции синхротронного излучения НАНОФЭС [19], включая модуль ЭСХА. Давление в аналитических камерах спектрометров рабочей станции НАНОФЭС составляло ~10⁻¹⁰ Торр, использовали анализаторы энергий электронов Specs Phoibos 250 и Phoibos 150. При использовании лабораторного монохроматизированного источника энергия возбуждения составила 1486.6 эВ.

Использовали стандартный подход к калибровке данных, основанный на регистрации сигнала C 1s-линии углеводородных загрязнений [20]. Для анализа основных особенностей XPS спектров использовали известные базы данных, из которых были выбраны наиболее актуальные данные [20, 21].

Таблица 1. Кристаллические параметры NbO₂

| Группа симметрии | P4 ₂ /mnm | | |
|-------------------|----------------------|--------|-----|
| параметр a, b, Å | 4.8464 | | |
| параметр c, Å | 3.0316 | | |
| координаты атомов | x/a | y/b | z/c |
| Nb ₁ | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| Nb ₂ | 0.5 | 0.5 | 0.5 |
| O ₁ | 0.2925 | 0.2925 | 0.0 |
| O ₂ | 0.7075 | 0.7075 | 0.0 |
| O ₃ | 0.2075 | 0.7925 | 0.5 |
| O ₄ | 0.7925 | 0.2075 | 0.5 |

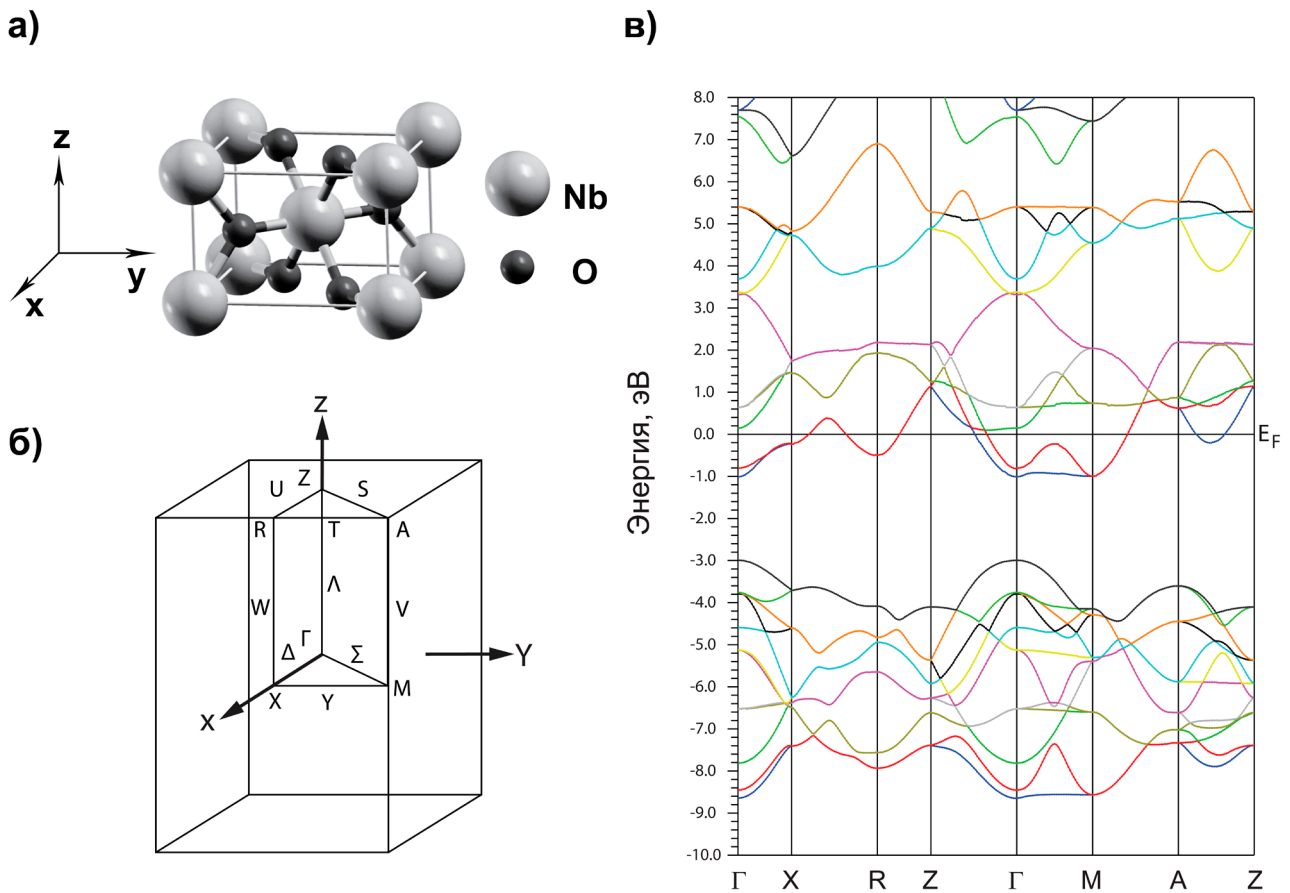


Рис. 1. Элементарная ячейка NbO_2 с кристаллической структурой рутила (а). Первая зона Бриллюэна NbO_2 (б). Зонная структура NbO_2 (в)

4. Результаты и обсуждение

Зонная структура NbO_2 приведена на рис. 1в. За начало отсчета энергий выбрано положение уровня Ферми (E_F). Нижняя часть валентной полосы состоит из 12 зон, происходящих преимущественно из $2p$ -состояний кислорода с небольшой примесью $4d$ -состояний ниобия (см. рис. 2в, г), имеет ширину 5.65 эВ и располагается в энергетическом интервале $-8.65 \dots -3.0$ эВ. Выше потолка этой группы зон присутствует щель запрещенных энергий шириной 1.98 эВ. Еще выше по энергии расположена группа из 10 зон, происходящих в основном из $4d$ -состояний атомов ниобия с некоторой долей $2p$ -состояний атомов кислорода. Согласно теории кристаллического поля, в силу октаэдрического окружения атома ниобия атомами кислорода в NbO_2 $4d$ -состояния Nb расщепляются на 6 низкоэнергетических зон с симметрией t_{2g} и 4 высокоэнергетические зоны с симметрией e_g [9]. Эти две группы $4d$ зон хорошо разделены на зонной структуре, за исключением окрестности точки Γ , в которой они немного перекрываются [22].

Сравнение результатов выполненных расчетов с данными [8, 9, 11, 22] показывает достаточно высокое согласие, что свидетельствует в пользу их достоверности. В то же время наблюдается ряд отличий. По сравнению с результатами [11] заметна разница в поведении самой верхней t_{2g} -зоны в направлениях Z-A и Z-R, соединяющих соответственно центр верхней грани зоны Бриллюэна Z с ее вершиной A и серединой ее ребра R. В обоих случаях зоны имеют практически плоский характер, но в нашем расчете эта зона в указанных направлениях лежит на ~ 1 эВ ниже (при энергии ~ 2.2 эВ выше E_F), чем в [11]. При этом полученная нами картина зонной дисперсии самой верхней t_{2g} -зоны наиболее близка к результатам [9]. Однако в расчете [9], как и в [8], но в отличие от [11, 22], присутствует щель запрещенных энергий, отделяющая верхнюю t_{2g} -зону от низшей e_g зоны. В нашем же расчете эти две группы зон смыкаются в окрестности точки Γ , аналогично результатам [11, 22].

В нашем расчете щель запрещенных энергий, разделяющая валентную полосу на две ча-

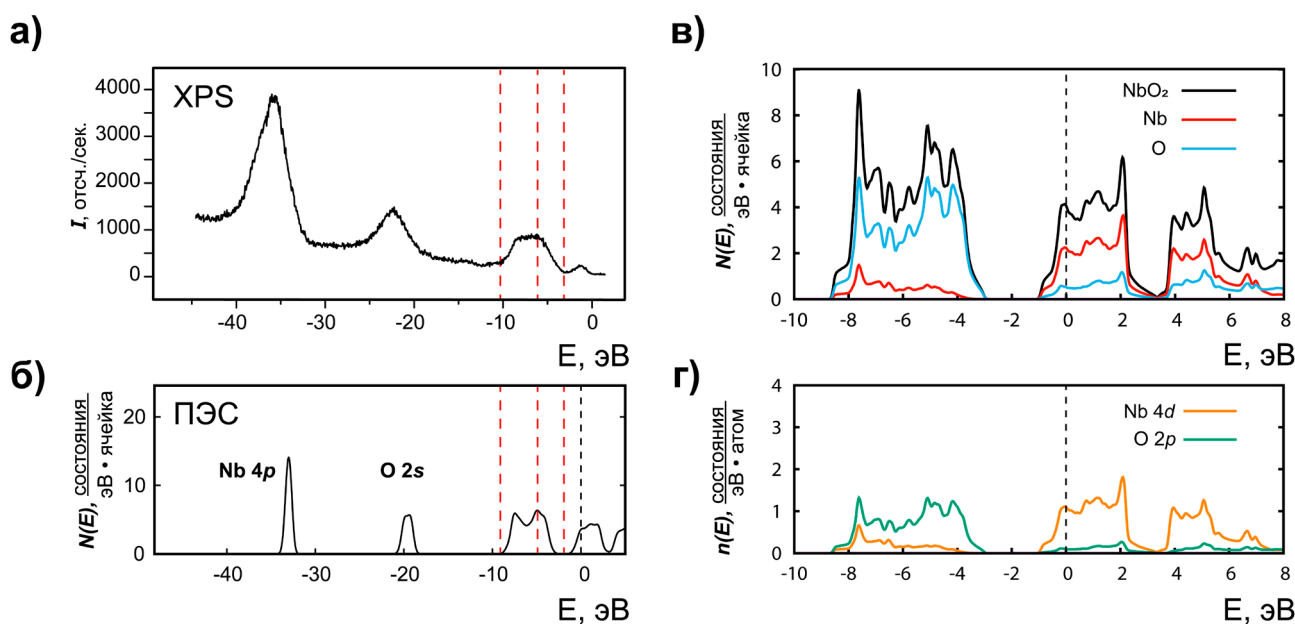


Рис. 2. XPS спектр образца NbO₂ (а). Спектр полной ПЭС NbO₂ (б). Спектр полной ПЭС кристалла и атомов Nb и O в валентной области и вблизи дна зоны проводимости (в). Парциальные ПЭС атомов Nb и O (г)

сти, имеет ширину 1.98 эВ. Это меньше значений, полученных в других работах: 6.1 эВ [8], 4.1 эВ [22], ~ 3 эВ [9].

В целом NbO₂ обладает зонной структурой, типичной для рутилоподобных оксидов переходных металлов. Важнейшей характеристикой, определяющей необычные свойства NbO₂ является положение уровня Ферми, которое объясняется следующими соображениями. У свободного атома ниобия на валентной оболочке имеются пять электронов, занимающие $4d^45s^1$ -состояния. При кристаллизации в структуру рутила электроны из валентной оболочки ниобия переходят к более электроотрицательным атомам кислорода. Формально атом ниобия в рутилоподобном NbO₂ имеет степень окисления Nb⁺⁴, заполнение d -подоболочки составляет $4d^1$ [23]. В результате энергетические зоны, образованные из d -состояний атомов ниобия, оказываются занятыми электронами частично. Уровень Ферми пересекает группу зон, образованную Nb $4d$ -состояниями, которая выступает в роли зоны проводимости, а NbO₂ проявляет металлический тип электропроводности.

Важную информацию об особенностях занятых электронных состояний дают результаты XPS спектроскопии NbO₂. На рис. 2а приведен рентгеновский фотоэлектронный спектр образца NbO₂, зарегистрированный в интервале энергий связи от -45 до 0 эВ. В рассматриваемом

энергетическом диапазоне наблюдаются 4 области занятых состояний, аналогично результатам [24], и экспериментальный спектр в целом согласуется с результатами [11, 24–28]. Спектр XPS был сопоставлен с результатами расчета полной плотности состояний в том же энергетическом интервале путем совмещения по положению валентной области на энергетической шкале (рис. 2б). При этом начало отсчета экспериментальной и расчетной шкал не совпадают. Из рис. 2а, б видно хорошее согласие результатов, что позволяет объяснить наблюдаемые в XPS спектре особенности. Интенсивному пику при -35.8 эВ в экспериментальном спектре соответствует пик плотности Nb $4p$ -состояний при энергии -33.0 эВ расчетной шкалы, где за начало отсчета взято положение уровня Ферми. Экспериментальному пику при -22.25 эВ соответствует пик плотности O $2s$ -состояний при энергии -19.5 эВ расчетной шкалы. Положение пиков Nb $4p$ - и O $2s$ -состояний в расчете оказывается сдвинутым по сравнению с экспериментом ближе к уровню Ферми. При этом расстояние между пиками в расчете составляет 13.5 эВ, что отлично согласуется с экспериментальным значением 13.55 эВ.

Структурные особенности в области энергий -10...0 эВ описывают строение валентной зоны. Эта область, а также дно зоны проводимости, в увеличенном масштабе приведены на рис. 2в, г. Показаны полная плотность электронных состо-

яний (ПЭС) кристалла NbO_2 , полные атомные ПЭС для атомов Nb и O, а также парциальные ПЭС Nb $4d$ - и O $2p$ -состояний, доминирующих в рассматриваемой области энергий. Как говорилось выше, валентная полоса состоит из двух областей. Ее нижняя часть от -8.65 до -3.0 эВ образована преимущественно $2p$ -состояниями кислорода. В верхней части валентной зоны и у дна зоны проводимости в области от -1 до $+6$ эВ доминируют Nb $4d$ -состояния. При этом видно, что присутствует вклад O $2p$ -состояний в две верхние группы зон и Nb $4d$ -состояний в нижнюю группу, соответственно, что указывает на ковалентную составляющую химической связи [9]. В низкоэнергетической группе состояний имеются локальные максимумы у дна и потолка рассматриваемой области, а в ее центре наблюдается локальный минимум. Уровень Ферми располагается вблизи локального максимума ПЭС, что может свидетельствовать о нестабильности такой электронной структуры и способствовать фазовому переходу металл–полупроводник, наблюдаемому в NbO_2 . Рассчитанные спектры ПЭС находятся в хорошем согласии с результатами работ [11, 22].

На рис. 3 показано сравнение экспериментально зарегистрированного спектра XANES O

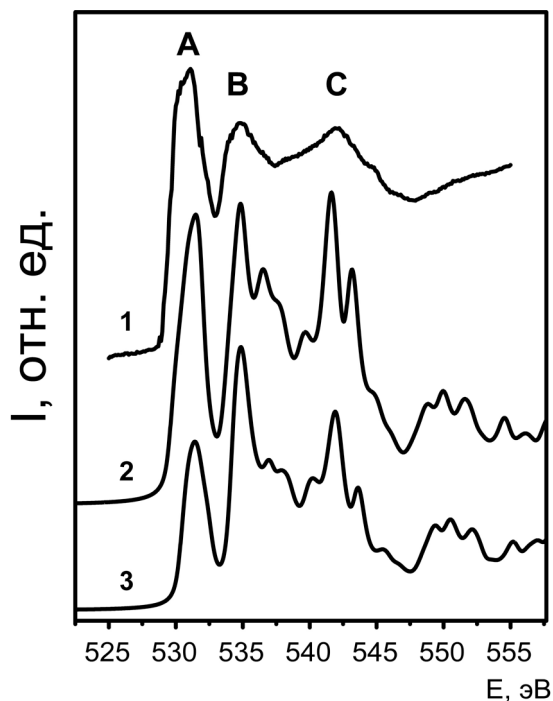


Рис. 3. XANES спектр O К-края. 1 – эксперимент, 2 – расчет для элементарной ячейки без остовой дырки, 3 – расчет для суперъячейки с остовой дыркой

К-края со спектрами, рассчитанными для элементарной ячейки в основном энергетическом состоянии (без моделирования остовой дырки) и для суперъячейки размера $2 \times 2 \times 3$ методом остовой дырки. Экспериментальный спектр содержит три максимума, обозначенные A, B, C при энергиях 531.1, 534.8, 542.0 эВ соответственно. Максимум A обладает наибольшей интенсивностью. Интенсивности максимумов B и C приблизительно равны. Экспериментальные спектры O К-края с таким же соотношением интенсивностей между максимумами были получены в [27] методом XANES для тонких пленок NbO_2 и в [12] методом спектроскопии характеристических потерь энергии электронами (EELS) для коммерческого образца производства Alfa Aesar. В [29] для коммерческих образцов производства Aldrich и в [30] для образцов Alfa Aesar методом EELS были получены спектры, в которых относительная интенсивность пика A меньше интенсивности пика B, но больше интенсивности пика C. Можно заключить, что представленные в литературе данные являются неоднозначными и, вероятно, зависят от условий проведения эксперимента, а также последующей математической обработки результата.

Расчетные спектры, приведенные на рис. 3, сопоставлялись с экспериментальным по положению максимума B при энергии 534.8 эВ. В нашем расчете, выполненном для элементарной ячейки в основном энергетическом состоянии, все три максимума имеют близкую интенсивность, но у максимума A ее значение наименьшее, а у максимума C наибольшее. Известны работы [12, 27], в которых также были проведены расчеты O К-края поглощения с использованием программного пакета Wien2k. В [27] получено такое же соотношение интенсивностей максимумов A и B, как у нас, но, в отличие от нашего результата в [27] максимум C имеет наименьшую интенсивность. В [12] максимум A наиболее интенсивный, затем следует максимум B и C – наименее интенсивный. Таким образом, во всех трех расчетах, включая настоящий, полученные результаты немного отличаются по соотношению интенсивностей основных особенностей спектра. При этом наблюдается хорошее согласие расчетных спектров с экспериментальным по количеству максимумов и их положению на энергетической шкале, что позволяет однозначно интерпретировать данные эксперимента.

Применение метода остовой дырки при расчете не приводит к изменению числа особен-

ностей в спектре или их положения на энергетической шкале. Однако заметно снижается относительная интенсивность максимумов А и С. Понижение интенсивности первого пика в расчетном спектре XANES O K-края в оксидах переходных металлов при использовании метода остовой дырки является известным эффектом [31]. Согласно нашему и [23, 31] расчетам в оксидах переходных металлов наблюдается гибридизация незанятых O 2p-электронных состояний и незанятых состояний атомов переходного металла. Согласно такому подходу тонкая структура спектра O K объясняется следующим образом. Пик А в спектре отражает плотность 2p-состояний кислорода, гибридизованных с t_{2g} состояниями ниобия, пик В – с e_g состояниями ниобия. Пик С отражает гибридизацию O 2p-состояний и 5s-, 5p-состояний металла. Таким образом, проведение моделирования остовой дырки приводит к систематической недооценке интенсивности первого пика, связанного с состояниями t_{2g} -симметрии [31].

На примере XANES O K спектра мы приходим к выводу, что расчет для элементарной ячейки NbO₂ без учета остовой дырки дает результаты, лучше согласующиеся с экспериментом. Поэтому для Nb K-края поглощения был выполнен расчет только для элементарной ячейки. Результат в сравнении с экспериментальным спектром [32] представлен на рис. 4. Расчетный спектр воспроизводит все основные особенности тонкой структуры края поглощения, присутствующие в экспериментальном спектре, что свидетельствует о правильности выбранного метода моделирования и достоверности полученного результата.

5. Выводы

Методом линеаризованных присоединенных плоских волн исследована электронная структура диоксида ниобия. Рассчитаны зонная структура, полные и парциальные плотности электронных состояний. Спектр ПЭС позволяет надежно интерпретировать результаты XPS спектроскопии.

Представлены результаты расчетов XANES спектров Nb K-, O K-края поглощения. Для спектра O K-края поглощения показано, что расчет для основного энергетического состояния, без применения метода моделирования суперъячейки и остовой дырки, демонстрирует высокое согласие с синхротронным экспериментом.

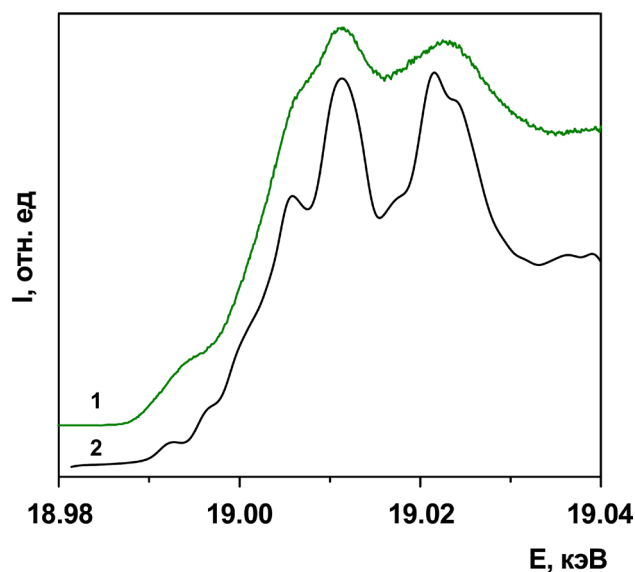


Рис. 4. XANES спектр Nb K-края. 1 – эксперимент [32], 2 – наш расчет

Полученные результаты могут быть использованы при анализе экспериментально исследуемых образцов системы Nb – O.

Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Zhou Y., Ramanathan S. Mott memory and neuromorphic devices. *Proceedings of the IEEE*. 2015;103(8): 1289–1310. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2015.2431914>
2. Joshi T., Cirino E., Morley S. A., Lederman D. Thermally induced metal-to-insulator transition in NbO₂ thin films: modulation of the transition temperature by epitaxial strain. *Physical Review Materials*. 2019;3: 124602. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.124602>
3. Music D., Krause A. M., Olsson P. A. T. Theoretical and experimental aspects of current and future research on NbO₂ thin film devices. *Crystals*. 2021;11: 217. <https://doi.org/10.3390/cryst11020217>
4. Manning T. D., Parkin I. P., Pemble M. E., Sheel D., Vernardou D. Intelligent window coatings: atmospheric pressure chemical vapor deposition of tungsten-doped vanadium dioxide. *Chemistry of Materials*. 2004;16(4): 744–749. <https://doi.org/10.1021/cm034905y>
5. Fajardo G. J. P., Howard S. A., Evlyukhin E., ... Piper L. F. J. Structural phase transitions of NbO₂: bulk versus surface. *Chemistry of Materials*. 2021;33: 1416–1425. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c04566>

6. Park J., Hadamek T., Posadas A. B., Cha E., Demkov A. A., Hwang H. Multi-layered $\text{NiO}_y/\text{NbO}_x/\text{NiO}_y$ fast drift-free threshold switch with high $I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ ratio for selector application. *Scientific Reports*. 2017;7: 4068. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-04529-4>
7. Shapiro S. M., Axe J. D., Shirane G., Raccach P. M. Neutron scattering study of the structural phase transition in NbO_2 . *Solid State Communications*. 1974;15: 377–381. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(74\)90780-7](https://doi.org/10.1016/0038-1098(74)90780-7)
8. Posternak M., Freeman A. J., Ellis D. E. Electronic band structure, optical properties, and generalized susceptibility of NbO_2 . *Physical Review B*. 1979;19: 6555–6563. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.19.6555>
9. Eyert V. The metal-insulator transition of NbO_2 : an embedded Peierls instability. *Europhysics Letters*. 2002;58: 851–856. <https://doi.org/10.1209/epl/i2002-00452-6>
10. Bolzan A. A., Fong C., Kennedy B. J., Howard C. J. Structural studies of rutile-type metal dioxides. *Acta Crystallographica*. 1997;B53: 373–380. <https://doi.org/10.1107/S0108768197001468>
11. O'Hara A., Nunley T. N., Posadas A. B., Zollner S., Demkov A. A. Electronic and optical properties of NbO_2 . *Journal of Applied Physics*. 2014;116: 213705. <https://doi.org/10.1063/1.4903067>
12. Jiang N., Spence J. C. H. Electron energy-loss spectroscopy of the O K edge of NbO_2 , MoO_3 , and WO_3 . *Physical Review B*. 2004;70: 245117. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.245117>
13. Blaha P., Schwarz K., Tran F., Laskowski R., Madsen G. K. H., Marks L. D. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids. *The Journal of Chemical Physics*. 2020;152: 074101. <https://doi.org/10.1063/1.5143061>
14. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*. 1996;77: 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
15. Манякин М. Д., Курганский С. И. Электронное строение диоксида германия со структурой рутила по данным ab initio компьютерного моделирования. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2023;25(4): 587–593. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11478>
16. Manyakin M. D., Kurganskii S. I. Electronic structure of stishovite SiO_2 . *Journal of Physics: Conference Series*. 2019;1352: 012032. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1352/1/012032>
17. Turishchev S., Schleusener A., Chuvankova O., ... Sivakov V. Spectromicroscopy studies of silicon nanowires array covered by tin oxide layers. *Small*. 2023;19(10): 2206322. <https://doi.org/10.1002/sml.202206322>
18. <https://www.sigmaldrich.com/RU/en>
19. Лебедев А. М., Меньшиков К. А., Назин В. Г., Станкевич В. Г., Цетлин М. Б., Чумаков Р. Г. Фотоэлектронный канал "НАНОФЭС" Курчатковского источника синхротронного излучения. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2021;10: 44–49. <https://doi.org/10.31857/S1028096021100125>
20. Moulder J. F., Stickle W. F., Sobol P. E., Bomben K. D. *Handbook of X-ray photoelectron spectroscopy. Physical Electronics Division*. Eden Prairie, Minnesota: Perkin-Elmer Corporation; 1992. 261 p.
21. Crist B. V. *Handbook of Monochromatic XPS Spectra: the elements of native oxides*. Mountain View: Wiley; 2000. 500 p.
22. Xu J. H., Jarlborg T., Freeman A. J. Self-consistent band structure of the rutile dioxides NbO_2 , RuO_2 , and IrO_2 . *Physical Review B*. 1989;40: 7939–7949. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.7939>
23. Frati F., Hunault M. O. J. Y., de Groot F. M. F. Oxygen K-edge X-ray absorption spectra. *Chemical Reviews*. 2020;120(9): 4056–4110. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00439>
24. Кузнецов М. В., Разинкин А. С., Шалаева Е. В. Фотоэлектронная спектроскопия и дифракция поверхностных наноразмерных структур $\text{NbO}/\text{Nb}(110)$. *Журнал структурной химии*. 2009;50(3): 536–543. Режим доступа: <https://elibrary.ru/mbzuxn>
25. Beatham N., Orchard A. F. X-ray and UV photoelectron spectra of the oxides NbO_2 , MoO_2 and RuO_2 . *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 1979;16: 77–86. [https://doi.org/10.1016/0368-2048\(79\)85006-9](https://doi.org/10.1016/0368-2048(79)85006-9)
26. Fujiwara K., Tsukazaki A. Formation of distorted rutile-type NbO_2 , MoO_3 , and WO_3 films by reactive sputtering. *Journal of Applied Physics*. 2019;125: 085301. <https://doi.org/10.1063/1.5079719>
27. Wahila M. J., Paez G., Singh C. N., ... Piper L. F. J. Evidence of a second-order Peierls-driven metal-insulator transition in crystalline NbO_2 . *Physical Review Materials*. 2019;3: 074602. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.074602>
28. Berman S., Zhussupbekova A., Boschker J. E., ... Zhussupbekov K. Reconciling the theoretical and experimental electronic structure of NbO_2 . *Physical Review B*. 2023;108: 155141. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.155141>
29. Arnold A., Tao R., Klie R. F. Comparison of FEFF9 results of metallic niobium and niobium oxides to EELS. *Journal of Undergraduate Research*. 2012;5(1): 38–41. <https://doi.org/10.5210/JUR.V5I1.7508>
30. Bach D., Schneider R., Gerthsen D., Verbeeck J., Sigle W. EELS of niobium and stoichiometric niobium-oxide phases – part I: plasmon and near-edges fine structure. *Microscopy and Microanalysis*. 2009;15(6): 505–523. <https://doi.org/10.1017/S143192760999105X>
31. Liang Y., Vinson J., Pemmaraju S., Drisdell W. S., Shirley E. L., Prendergast D. Accurate X-ray spectral predictions: an advanced self-consistent-field approach inspired by many-body perturbation theory. *Physical Review Letters*. 2017;118: 096402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.096402>
32. Sahiner M. A., Nabizadeh A., Rivella D., Cerqueira L., Hachlica J., Morea R., Gonzalo J., Woicik J. C. Subtle local structural variations in oxygen deficient niobium germanate thin film glasses as revealed by x-ray absorption spectroscopy. *Journal of Physics: Conference Series*. 2016;712: 012103. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/712/1/012103>

Информация об авторах

Манякин Максим Дмитриевич, к. ф.-м. н., н. с. в области физики совместной научно-образовательной лаборатории «Атомное и электронное строение функциональных материалов» Воронежского государственного университета и Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», *Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация)*.

<https://orcid.org/0000-0003-2260-6233>
manyakin@phys.vsu.ru

Курганский Сергей Иванович, д. ф.-м. н., профессор кафедры физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет (*Воронеж, Российская Федерация*).

<https://orcid.org/0000-0002-4202-0953>
kurganskii@phys.vsu.ru

Какулия Юлия Сергеевна, преподаватель кафедры общей физики, Воронежский государственный университет (*Воронеж, Российская Федерация*).

<https://orcid.org/0000-0002-0953-9024>
kakuliia@phys.vsu.ru

Титова София Сергеевна, преподаватель кафедры общей физики, Воронежский государственный университет (*Воронеж, Российская Федерация*).

<https://orcid.org/0000-0001-6860-401X>
titova@phys.vsu.ru

Чувенкова Ольга Александровна, к. ф.-м. н., с. н. с., совместная научно-образовательная лаборатория «Атомное и электронное строение функциональных материалов» Воронежского государственного университета и Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Воронежский государственный университет (*Воронеж, Российская Федерация*).

<https://orcid.org/0000-0001-5701-6909>
chuvenkova@phys.vsu.ru

Турищев Сергей Юрьевич, д. ф.-м. н., доцент, заведующий кафедрой общей физики, Воронежский государственный университет (*Воронеж, Российская Федерация*).

<https://orcid.org/0000-0003-3320-1979>
tsu@phys.vsu.ru

Поступила в редакцию 02.04.2024; одобрена после рецензирования 23.04.2024; принята к публикации 08.05.2024; опубликована онлайн 25.03.2025.