

文章编号: 1004-5929(2021)02-0149-07

DyVO₄ 高压拉曼光谱研究

王宝云^{1,2,3}, 宋茂双^{1,3}

(1. 中国科学院广州地球化学研究所同位素国家重点实验室, 广东 广州 510640;

2. 中国科学院大学, 北京 100049; 3. 中国科学院深地科学卓越创新中心)

摘要: 利用金刚石压腔和拉曼光谱研究了 DyVO₄ 的压缩行为。结果表明: DyVO₄ 在 0-35.4 GPa 发生了两次相变。第一次相变在 7.8±0.5 GPa 开始, 在 13.3 GPa 结束, DyVO₄ 从锆石相不可逆地转变成白钨矿相, 这个相变伴随着锆石相拉曼峰的消失和白钨矿相拉曼峰的出现, 光谱特征清晰。第二个相变发生在约 21.9 GPa, DyVO₄ 从白钨矿相进一步可逆地转变成褐钨铋矿相。白钨矿相模 133 cm⁻¹ (B_g) 频率随压力的演化趋势在相变点发生变化, 另外对应 VO₄ 四面体伸缩振动区域的拉曼峰在褐钨铋矿相逐渐展宽。DyVO₄ 的褐钨铋矿相一直稳定到 35.4 GPa, 卸压到常压后, DyVO₄ 是白钨矿相。

关键词: 拉曼光谱; 高压; 锆石; 白钨矿; 褐钨铋矿

中图分类号: O521.2

文献标志码: A

doi: 10.13883/j.issn1004-5929.202102006

High pressure Raman spectroscopic study of DyVO₄

WANG Baoyun^{1,2,3}, SONG Maoshuang^{1,3}

(1 State Key Laboratory of Isotope Geochemistry, Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China;

2 College of Earth and Planetary Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049, China;

3 CAS Center for Excellence in Deep Earth Science, Guangzhou, 510640, China)

Abstract: The compression behaviour of DyVO₄ has been studied using the combined diamond anvil cell and Raman spectra. The results show DyVO₄ experiences two phase transitions at pressure from ambient pressure to 35.4 GPa. The first phase transition takes place at 7.8±0.5 GPa and finishes at 13.3 GPa. DyVO₄ transforms from zircon phase to scheelite phase accompanied by distinct disappearance and appearance of Raman peaks in zircon phase and scheelite phase. The second phase transition takes place at 21.9 GPa, DyVO₄ transforms from scheelite phase to fergusonite phase. The evolution of 133 cm⁻¹ (B_g) mode of scheelite phase changes at transition point. The modes corresponding to stretching vibration of VO₄ of fergusonite phase gradually broaden. The fergusonite phase is stable up to 35.4 GPa. DyVO₄ is scheelite phase at ambient condition after decompression.

Key words: Raman spectra; High pressure; Zircon; Scheelite; Fergusonite

1 引言

稀土钒酸盐, RVO₄ (R= 稀土元素) 是一种被

广泛应用于固体激光器、光催化、锂电池等多个领域的多功能材料^[1-5]。在常温常压下, 除了 LaVO₄, 它们都呈锆石型结构, 具有相似的拉曼光谱和电

收稿日期: 2021-03-17; 修改稿日期: 2021-04-07

基金项目: 国家自然科学基金项目(41874107, 41574079)

作者简介: 王宝云(1992-), 男, 博士研究生, 主要从事高压矿物学研究. E-mail: wangbaoyun@gig.ac.cn

通讯作者: 王宝云(1992-), 男, 博士研究生, 主要从事高压矿物学研究. E-mail: wangbaoyun@gig.ac.cn

子特性^[6-11]。因为厘清它们的高压结构有助于系统理解 RVO_4 的相变规律,另外发现具有良好物性的新相也能拓展他们的潜在应用,因此 RVO_4 的高压的行为一直吸引着许多研究者的关注^[12-25]。前人的研究表明 RVO_4 的相变路径与稀土元素的离子半径有关^[26-28]。离子半径较小的稀土钒酸盐 (Eu-Lu) 会转变成白钨矿型结构,而离子半径较大的稀土钒酸盐 (Ce-Nd) 会转变成独居石型结构,两类稀土钒酸盐相变的压力均在 10 GPa 以下^[26-28]。

$DyVO_4$ 属于小离子半径稀土钒酸盐中的一种。过去一些研究者对其姜泰勒效应和巨磁阻效应开展了工作^[29-31]。另外最近的研究表明它能作为光电水分解反应中的催化剂,促进某些有机物的降解^[32]。与其它小离子半径稀土钒酸盐不同,目前关于 $DyVO_4$ 的高压研究仍然有限。上世纪 80 年代, Duclos 等^[33] 人开展了 0~10 GPa 的拉曼光谱实验,观察到 $DyVO_4$ 在 6.5 ± 0.3 GPa 会从锆石相不可逆转变成白钨矿相。随后 Patel 等^[34] 拓展拉曼光谱研究的压力到 22 GPa,他们提出锆石相在 8 GPa 开始相变,在 13 GPa 完全转变变成褐钇铌矿相,褐钇铌矿相稳定到 22 GPa,然后再卸压到 17.6 GPa 转变成白钨矿相,并且白钨矿相保存至常压。Paszkowicz 等^[35] 通过高温高压实验,合成了白钨矿型 $DyVO_4$,并用能量 X 射线色散衍射法确定了锆石相和白钨矿相 $DyVO_4$ 的状态方程,但 Paszkowicz 等实验压力仅达到 8.44 GPa,并没有原位观测到锆石相到白钨矿的相变。鉴于前人关于 $DyVO_4$ 的高压研究结论并不一致,因此有必要进一步开展实验厘清 $DyVO_4$ 的相变行为。

另外 Bastide 等^[36] 根据 ABX_4 型化合物中离子半径比值 (r_A/r_X 和 r_B/r_X) 作出二维图,提出 ABX_4 型化合物的高压相会沿着同时增加 r_A/r_X 和 r_B/r_X 比值的方向演变。这个规律被许多钨酸盐和钽酸盐验证^[27-28]。根据 Bastide 图, $DyVO_4$ 的白钨矿相可能会在更高压力转变成褐钇铌矿相。而且最近关于几个小半径的稀土钒酸盐的高压研究表明褐钇铌矿相的确会在约 20 GPa 以后出现^[26],那么 $DyVO_4$ 是否也经历这个相变是一个值得进一步探究的问题。

原位高压 XRD 测试和拉曼光谱测试是目前研究高压相变最主要的两种实验方法。虽然 XRD 测试允许我们直接获得无机晶体结构,但若在充分了解可能的高压多型的基础上,通过高压拉曼也能指认发生的相变。由于一些其他同结构钒酸盐,如 $TbVO_4$, $LuVO_4$ 和 YVO_4 的高压相的拉曼光谱已有报道^[37-39],因此通过对比这些物质,高压拉曼光谱也允许我们获得 $DyVO_4$ 的相变序列。图 1 展示了前人提出的与 $DyVO_4$ 同结构化合物中出现的几种高压相的结构,包括锆石相,白钨矿相,褐钇铌矿相^[27-28]。本研究收集了 $DyVO_4$ 在 0~35.4 GPa 的拉曼光谱,旨在确定 $DyVO_4$ 的高压相。

2 实验方法

$DyVO_4$ 的粉末样品由等比例的 Dy_2O_3 和 V_2O_5 在高温下烧结合成。合成条件为 800℃ 保温 12 小时,然后 1100℃ 保温 12 小时。合成样品经充分研磨后进行粉末 XRD 测试 (Cu 靶, $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$),得

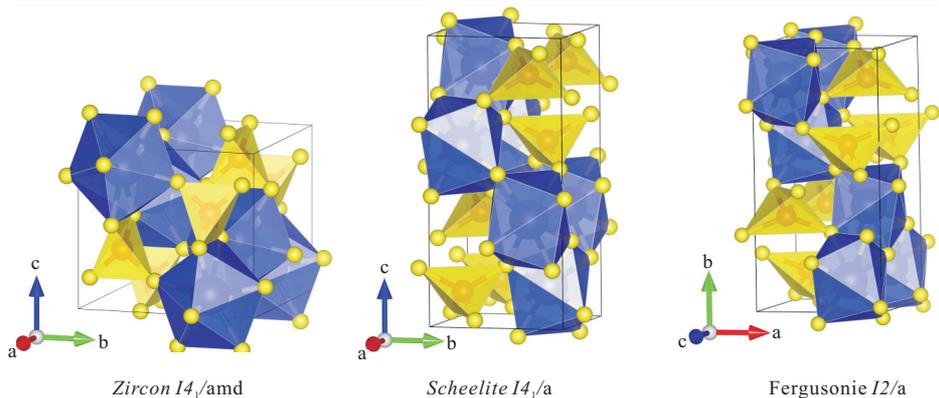


图 1 小半径稀土钒酸盐 RVO_4 ($R=Eu-Lu$) 的高压相,包括锆石结构、白钨矿结构和褐钇铌矿结构。蓝色、红色和黄色分别标记稀土元素、钒和氧原子

Fig. 1 The different high-pressure polymorphs of rare-earth orthovanadates with small ionic radii (RVO_4 ; $R=Eu-Lu$), which include zircon phase, scheelite phase and fergusonite phase. The blue, red, and yellow spheres stand for the R, V, and O atoms

到的图谱见图 2, 数据分析表明合成的样品为锆石型 DyVO₄, 指标化得其晶胞参数 $a = 7.1540(3)$ Å, $c = 6.3136(4)$ Å, $V = 323.13(2)$ Å³, 与前人的结果一致^[35]。

高压拉曼光谱实验中使用对称型金刚石压腔提供高压, 金刚石对顶砧台面直径为 400 μm。采用初始厚度为 250 μm 的不锈钢片作为垫片, 垫片经过金刚石对顶砧预压后的厚度约为 40 μm, 用电火花打孔器在中心钻直径约为 120 μm 的孔作为样品腔。DyVO₄ 粉末用金刚石对顶砧轻轻压成约 10 μm 厚的薄片, 挑选一小片放入样品腔内, 并在样品的附近放一颗红宝石用于标定压力^[40]。通过液化法充入氩气作为传压介质。拉曼光谱测试在 Renishaw 2000 型显微共聚焦拉曼光谱仪上进行。激光波长为 532 nm, 波数范围 100~1200 cm⁻¹。

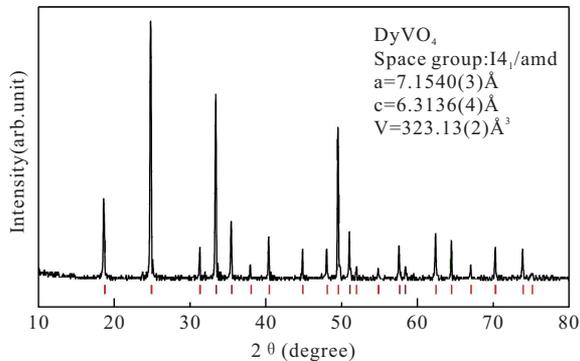


图 2 DyVO₄ 常压常压下的 X 射线衍射谱

Fig. 2 The X-ray diffraction pattern of DyVO₄ at ambient conditions

3 结果与分析

锆石型稀土钒酸盐具有 12 个拉曼活性模式 ($\Gamma = 2A_{1g} + 4B_{1g} + B_{2g} + 5E_g$)^[38, 39]。图 3 展示了代表性的锆石型 DdVO₄ 在不同压力下的拉曼光谱。在常压下, 我们能观察到 9 个拉曼峰, 根据对比 TbVO₄ 等同结构化合物, 我们对各个峰进行了模式分配。与其他同结构的稀土钒酸盐一样, DdVO₄ 的拉曼光谱在 500~800 cm⁻¹ 之间存在较大的频率间隙, 因此光谱可分为低频率和高频率两个区域。其中高频区域中的拉曼峰可以近似地认为是 VO₄ 四面体的内部振动^[38]。位于 889 cm⁻¹ (A_{1g}) 的拉曼峰强度最高, 对应于 V-O 伸缩振动。另外两个非对称伸缩振动分别位于 829 cm⁻¹ (E_g) 和 812 cm⁻¹ (B_{1g})。低频区域主要与 VO₄ 四面体弯曲振动模和外模有关。当压力增加到 8.3 GPa 时, 拉曼光谱出现了一些新峰, 符合锆石相到白钨

矿相转变^[33, 38]。随着压力逐渐增加, 锆石相拉曼峰慢慢减弱, 当压力增加到 13.3 GPa 时候, 原锆石相最强峰已经全部消失了, 光谱可以全部归属于白钨矿相。锆石相的各个拉曼模在高压下的演化情况如图 4 所示。大多数模的频率随压力线性增加, 只有两个低频模 154 cm⁻¹ (B_{2g}) 和 260 cm⁻¹ (E_g) 表现出软模行为。各个拉曼模随压力变化的斜率 ($d\omega/dP$) 列于表 1, 可以看到对应于 VO₄ 伸缩振动三个高频率模 889 cm⁻¹ (A_{1g}), 829 cm⁻¹ (E_g), 812 cm⁻¹ (B_{1g}) 和低频率模 247 cm⁻¹ (E_g) 表现出对压力较强的依赖性。由于 247 cm⁻¹ (E_g) 具

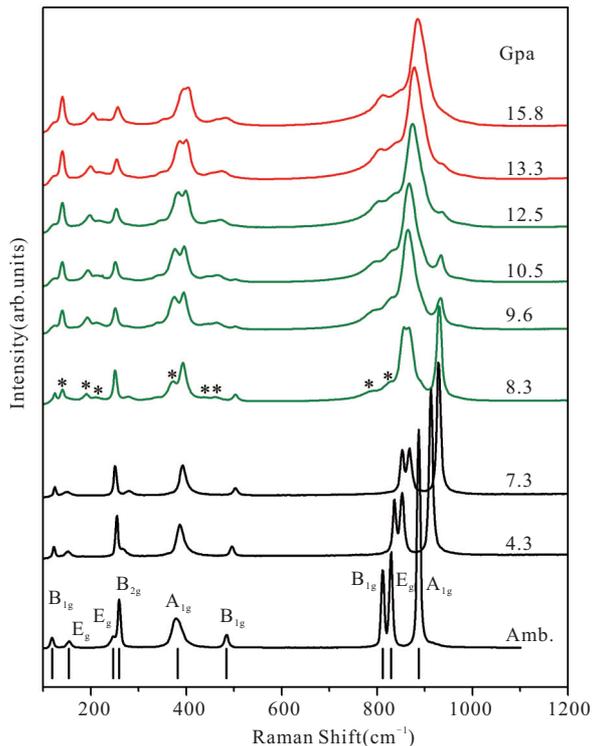


图 3 DyVO₄ 从常压至 15.8 GPa 的代表性拉曼光谱, 展示了 DyVO₄ 从锆石相转变成白钨矿相的光谱变化。底部是 DyVO₄ 常压光谱, 每个峰旁边标识了对应的振动模式, 竖线标识拉曼模的频率。锆石相, 白钨矿相和两相共存的光谱分别用黑色, 红色和橄榄色区分。星号标记了 8.3 GPa 属于白钨矿相的拉曼峰

Fig. 3 Representative Raman spectra of DyVO₄ at pressure from ambient pressure to 15.8 GPa, which show the structural transition from zircon phase to scheelite phase. The assignment and measured frequency of each mode in the ambient spectra are shown at bottom. The spectra of zircon, scheelite and the coexisting phases are marked in black, red and olive, respectively. The asterisks (*) denote the peaks for the scheelite phase at 8.3 GPa

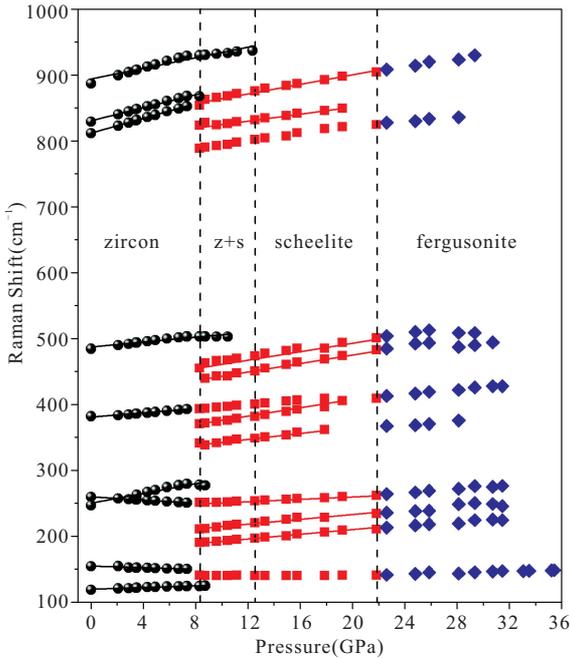


图 4 升压过程中 DyVO_4 的拉曼模频率随压力的变化关系

Fig. 4 Evolution of the Raman frequency of the modes in DdVO_4 upon compression

有较大的正的斜率和 260 cm^{-1} (E_g) 的软化行为, 两个模在约 2.2 GPa 交叉。这种模演化交叉行为也在其它同结构的稀土钒酸盐中被观察到^[38-39]。

根据群论, 白钨矿型稀土钒酸盐具有 13 个拉曼活性模式 ($R=3A_g+5B_g+5E_g$)^[38-39]。在我们的实验中, 我们能看到白钨矿相的 12 个峰。我们对每个峰进行了模式分配, 标注在 17.9 GPa 的光谱上, 见图 5。与锆石相一样, 白钨矿相显示出频隙 ($550 \sim 750 \text{ cm}^{-1}$), 可将它们分为低频和高温区域。图 4 和图 6 展示了白钨矿相拉曼峰随压力的变化关系。除了 739 cm^{-1} (E_g), 367 cm^{-1} (B_g) 和 133 cm^{-1} (B_g) 三个模随压力表现出非线性行为, 其他所有模频率随压力均是线性增加的, 斜率 ($d\omega/dP$) 列于表 1。

图 7 展示了白钨矿相 B_g 模的频率随压力的演变情况。可以看到在约 21.9 GPa 后, 拉曼模开始明显地向高频移动。前人关于类似稀土钒酸盐的高压拉曼研究表明^[27-28, 38-39], 白钨矿相 B_g 模会连续过渡到褐钨矿相 A_g 模, 但是 B_g 模和 A_g 模对压力的敏感程度 (斜率) 不同, 这被认为是白钨矿相到褐钨矿相的相变的典型特征, 而拐点是相变的压力。在本研究中, 我们通过白钨矿相 B_g 模和褐钨矿相 A_g 模演化趋势线, 确定该相变的转变

压力约为 21.9 GPa。

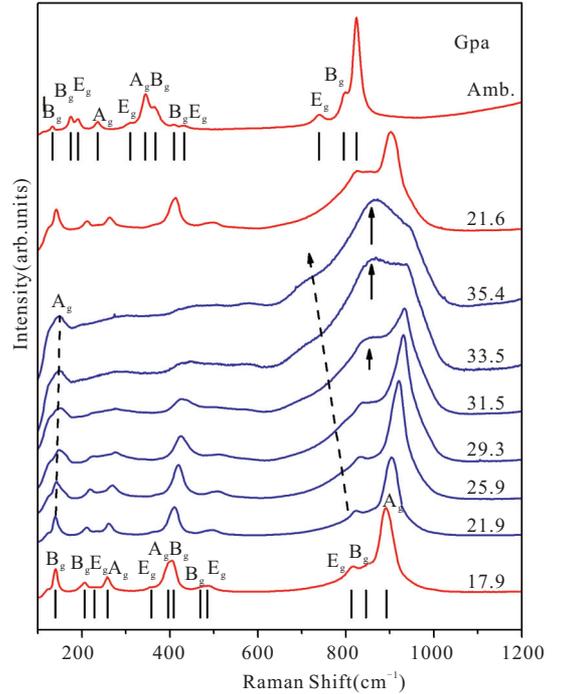


图 5 DyVO_4 从 17.9 GPa 至 35.4 GPa 和降压至常压的代表性拉曼光谱。白钨矿相和褐钨矿相的光谱分别用红色和蓝色区分

Fig. 5 Representative Raman spectra of DyVO_4 during compression from 17.9 GPa to 35.4 GPa and during decompression to ambient conditions. The spectra of scheelite phase and fergusonite phase are marked in red and blue, respectively

表 1 锆石型和白钨矿型 DyVO_4 的常压拉曼频率、模式归属及压力系数

Table 1 Zero-pressure frequencies and pressure coefficients of the Raman modes in zircon-type and scheelite-type DdVO_4

Zircon			Scheelite		
Mode	ω	$d\omega/dP$ ($\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$)	Mode	ω	$d\omega/dP$ ($\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$)
B_{1g}	119	0.7	B_g	133	Nonlinear
E_g	154	-0.6	B_g	175	1.6
E_g	247	3.7	E_g	191	2.0
B_{2g}	260	-1.2	A_g	236	1.0
A_{1g}	382	1.6	E_g	310	2.6
B_{1g}	484	1.8	A_g	344	3.0
B_{1g}	812	5.6	B_g	367	Nonlinear
E_g	829	4.9	B_g	409	3.4
A_1	889	4.0	E_g	432	3.1
			E_g	739	Nonlinear
			B_g	795	2.6
			A_g	825	3.6

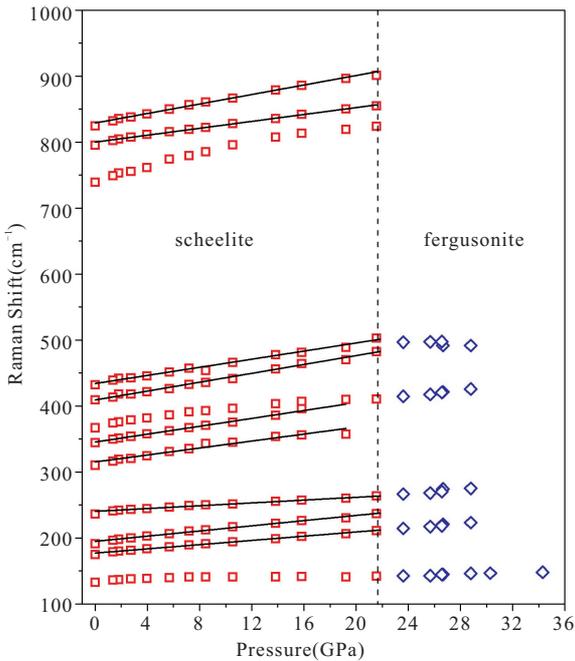


图 6 降压过程中 DyVO₄ 的拉曼模频率随压力的变化关系

Fig. 6 Evolution of the Raman frequency of the modes in DyVO₄ during decompression

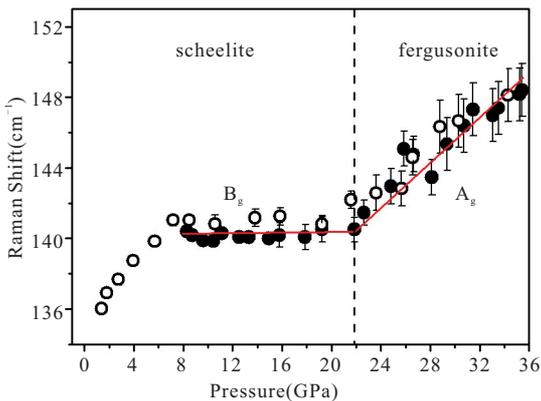


图 7 白钨矿相 B_g 振动模与褐钨钒矿相 A_g 振动模的演化关系。虚线标识 DyVO₄ 从白钨矿相转变成褐钨钒矿相的转变压力 (21.9 GPa)

Fig. 7 The evolution of B_g mode in the scheelite phase and the corresponding A_g mode in the fergusonite phase. The vertical dash line indicates phase transition at 21.9 GPa from scheelite phase to fergusonite phase

褐钨钒矿相是单斜晶系的, 它的空间群 ($I2/a$) 是白钨矿相结构 ($I4_1/a$) 的最大子群。根据群论, 褐钨钒矿型稀土钒酸盐有 18 个拉曼活性模式 ($\Gamma = 8A_g + 10B_g$)^[38-39]。白钨矿相中的 3 个 A_g 模和 5 个 B_g 模会转化成褐钨钒矿相的 8 个 A_g 模, 而白钨矿相的 5 个二重 E_g 简并模由于对称性下降会劈裂成褐钨钒矿相的 10 个 B_g 模。在本实验中, 我

们没有直接观察到拉曼峰的劈裂, 但是我们注意到褐钨钒矿相中对应于 VO₄ 振动的高频率区域的峰逐渐往低频率方向扩展, 且峰的强度也出现变化 (见图 5)。这些特征暗示着白钨矿相到褐钨钒矿相的转变。由于褐钨钒矿相拉曼峰重叠严重, 为了避免错误, 我们仅读取了褐钨钒矿相中信噪比高的拉曼峰的峰位, 忽略了重叠峰的读取。拉曼模频率与压力的关系如图 4 和图 6 所示, 可以看到所有模随压力均向高频率移动。

前人在对 TbVO₄ 和 GdVO₄ 的高压拉曼研究中发现^[38,41], 约 30 GPa 后, 在这两种钒酸盐的拉曼图谱中观察不到明显的拉曼峰, 仅能看到几个比较宽的大鼓包。结合理论计算, 他们发现 *Cmca* 正交结构相具有比褐钨钒矿相更低的能量, 因此他们建议在约 30 GPa 发生了新的相变。有趣的是, 理论计算结果表明 *Cmca* 结构相具有比白钨矿相和褐钨钒矿相更低的体弹模量, 这似乎与 *Cmca* 结构相高的密度矛盾。为了解释这个矛盾, 一种被建议的可能机制是稀土元素离子在高压下的去局域化, 但是目前这种假设仍然需要进一步的实验证据支持。在 DyVO₄ 体系中, 与前人关于 TbVO₄ 和 GdVO₄ 的高压拉曼光谱不同, 我们在最高压力 35.4 GPa 仍然观察到比较明显的拉曼峰, 因此我们倾向于认为到本实验的最高压力 DyVO₄ 仍然是褐钨钒矿相。我们注意到褐钨钒矿相重叠峰较多, 且峰宽化比较严重, 我们建议将来对褐钨钒矿相进行激光加温, 提高拉曼峰的信噪比, 探索 DyVO₄ 的褐钨钒矿相是否在更高压力下转变成 *Cmca* 结构或者其他结构。当压力逐渐卸载, 白钨矿相在低压出现, 并且一直保留到常压。

我们的高压拉曼光谱表明 DyVO₄ 在高压下会经历锆石相-白钨矿相-褐钨钒矿相, 其中锆石相到白钨矿相的相变是不可逆的, 而白钨矿相到褐钨钒矿相的相变是可逆的。我们的第一个相变特征和相变压力与 Duclos 等^[33] 的研究结果比较一致。另外通过仔细对比本研究 and Patel 等^[34] 的拉曼光谱, 我们发现 Patel 等^[34] 在 8 GPa-13 GPa 的光谱符合锆石相和白钨矿相共存的特征, 而 13 GPa 以上的某些压力的光谱和卸压到常压后的光谱是白钨矿相。由于 22 GPa 左右的光谱信噪比较低, 我们很难判断 Patel 等^[34] 的实验是否出现褐钨钒矿相。因此总的来说, Patel 等^[34] 的实验现象支持我们得出的相变序列, DyVO₄ 表现出典型小离子半径的高压行为。

4 结论

我们用拉曼光谱研究了锆石型 DyVO_4 在 0~35.4 GPa 的结构稳定性。通过对比同结构的其他稀土钒酸盐的高压拉曼光谱,我们发现 DyVO_4 在 7.8 ± 0.5 GPa 不可逆地转变成白钨矿相,两相共存到 13.3 GPa;在 21.9 GPa, DyVO_4 进一步可逆地转变成褐钇铋矿相。当压力卸载后,白钨矿相保存至常压。我们详细报道了两次相变的光谱特征以及锆石相和白钨矿相常压拉曼模频率以及其随压力线性变化的系数。

致谢 非常感谢中国科学院广州地球化学研究所周薇博士在样品合成中提供的帮助。

参考文献

- [1] M. Oshikiri, J. Ye, M. Boero, Inhomogeneous RVO₄ Photocatalyst Systems (R= Y, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu), *The Journal of Physical Chemistry C*, 118 (2014) 8331-8341.
- [2] J. Liu, H. Zhang, Z. Wang, *et al.* Continuous-wave and pulsed laser performance of Nd: LuVO₄ crystal, *Opt. Lett.*, 29 (2004) 168-170.
- [3] S. Sun, H. Yu, Y. Wang, *et al.* Thermal, spectroscopic and laser characterization of monoclinic vanadate Nd: LaVO₄ crystal, *Opt. Express*, 21 (2013) 31119-31129.
- [4] C.-J. Jia, L.-D. Sun, F. Luo, *et al.* Structural transformation induced improved luminescent properties for LaVO₄: Eu nanocrystals, *Appl. Phys. Lett.*, 84 (2004) 5305-5307.
- [5] A. Kalinichev, M. Kurochkin, E. Golyeva, *et al.* Near-infrared emitting YVO₄: Nd³⁺ nanoparticles for high sensitive fluorescence thermometry, *J. Lumin.*, 195 (2018) 61-66.
- [6] R. Jindal, M. Sinha, H. Gupta, Lattice vibrations of AVO₄ crystals (A = Lu, Yb, Dy, Tb, Ce), *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 113 (2013) 286-290.
- [7] M. Liu, Z.-L. Lv, Y. Cheng, *et al.* Structural, elastic and electronic properties of CeVO₄ via first-principles calculations, *Computational materials science*, 79 (2013) 811-816.
- [8] Z. Huang, L. Zhang, W. Pan, Physical properties of zircon and scheelite lutetium orthovanadate: Experiment and first-principles calculation, *J. Solid State Chem.*, 205 (2013) 97-103.
- [9] T. Marqueño, V. Monteseuro, F. Cova, *et al.* High-pressure phase transformations in NdVO₄ under hydrostatic conditions: a structural powder x-ray diffraction study, *J. Phys. : Condens. Matter*, 31 (2019) 235401.
- [10] M. Moussa, M. Djermouni, S. Kacimi, *et al.* First-principles calculations of structural, magnetic phase stability and electronic properties of RVO₄ compounds, *Computational materials science*, 68 (2013) 361-366.
- [11] B. C. Chakoumakos, M. M. Abraham, L. A. Boatner, Crystal structure refinements of zircon-type MVO₄ (M= Sc, Y, Ce, Pr, Nd, Tb, Ho, Er, Tm, Yb, Lu), *J. Solid State Chem.*, 109 (1994) 197-202.
- [12] D. Errandonea, R. Kumar, S. Achary, *et al.* In situ high-pressure synchrotron x-ray diffraction study of CeVO₄ and TbVO₄ up to 50 GPa, *PhRvB*, 84 (2011) 224121.
- [13] A. B. Garg, D. Errandonea, P. Rodríguez-Hernández, *et al.* High-pressure structural behaviour of HoVO₄: combined XRD experiments and ab initio calculations, *J. Phys. : Condens. Matter*, 26 (2014) 265402.
- [14] D. Errandonea, C. Popescu, S. Achary, *et al.* In situ high-pressure synchrotron X-ray diffraction study of the structural stability in NdVO₄ and LaVO₄, *Mater. Res. Bull.*, 50 (2014) 279-284.
- [15] D. Errandonea, S. N. Achary, J. Pellicer-Porres, *et al.* Pressure-induced transformations in PrVO₄ and SmVO₄ and isolation of high-pressure metastable phases, *Inorg. Chem.*, 52 (2013) 5464-5469.
- [16] A. B. Garg, D. Errandonea, High-pressure powder x-ray diffraction study of EuVO₄, *J. Solid State Chem.*, 226 (2015) 147-153.
- [17] A. B. Garg, K. Shanavas, B. Wani, *et al.* Phase transition and possible metallization in CeVO₄ under pressure, *J. Solid State Chem.*, 203 (2013) 273-280.
- [18] B. Yue, F. Hong, S. Merkel, *et al.* Deformation behavior across the zircon-scheelite phase transition, *Phys. Rev. Lett.*, 117 (2016) 135701.
- [19] C. Popescu, A. B. Garg, D. Errandonea, *et al.* Pressure-induced phase transformation in zircon-type orthovanadate SmVO₄ from experiment and theory, *J. Phys. : Condens. Matter*, 28 (2016) 035402.
- [20] W. Paszkowicz, J. Lopez-Solano, P. Piszora, *et*

- al.* Equation of state and electronic properties of EuVO₄: A high-pressure experimental and computational study, *J. Alloys Compd.*, 648 (2015) 1005-1016.
- [21] R. Rao, A. B. Garg, B. Wani, Raman spectroscopic studies on CeVO₄ at high pressures, in: *Journal of Physics: Conference Series*, IOP Publishing, 2012, pp. 012010.
- [22] J. Gong, X. Fan, R. Dai, *et al.* High-Pressure Phase Transition of Micro-and Nanoscale HoVO₄ and High-Pressure Phase Diagram of REVO₄ with RE Ionic Radius, *ACS omega*, 3 (2018) 18227-18233.
- [23] E. Bandiello, D. Errandonea, F. Piccinelli, *et al.* Characterization of Flux-Grown Sm_xNd_{1-x}VO₄ Compounds and High-Pressure Behavior for x = 0.5, *The Journal of Physical Chemistry C*, 123 (2019) 30732-30745.
- [24] E. Bandiello, D. Errandonea, J. González-Platas, *et al.* Phase Behavior of TmVO₄ under Hydrostatic Compression: An Experimental and Theoretical Study, *Inorg. Chem.*, 59 (2020) 4882-4894.
- [25] E. Bandiello, C. Popescu, E. L. da Silva, *et al.* PrVO₄ under High Pressure: Effects on Structural, Optical, and Electrical Properties, *Inorg. Chem.*, (2020).
- [26] D. Errandonea, High pressure crystal structures of orthovanadates and their properties, *J. Appl. Phys.*, 128 (2020) 040903.
- [27] D. Errandonea, Exploring the properties of MTO₄ compounds using high - pressure powder x-ray diffraction, *Cryst. Res. Technol.*, 50 (2015) 729-736.
- [28] D. Errandonea, A. B. Garg, Recent progress on the characterization of the high-pressure behaviour of AVO₄ orthovanadates, *Prog. Mater. Sci.*, 97 (2018) 123-169.
- [29] K. Kishimoto, T. Ishikura, H. Nakamura, *et al.* Antiferroelectric lattice distortion induced by ferroquadrupolar order in DyVO₄, *PhRvB*, 82 (2010) 012103.
- [30] A. Midya, N. Khan, D. Bhoi, *et al.* Giant magnetocaloric effect in antiferromagnetic DyVO₄ compound, *Physica B: Condensed Matter*, 448 (2014) 43-45.
- [31] R. Elliott, G. Gehring, A. Malozemoff, *et al.* Theory of co-operative Jahn-Teller distortions in DyVO₄ and TbVO₄ (Phase transitions), *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 4 (1971) L179.
- [32] H. Li, Y. Liu, Y. Cui, *et al.* Facile synthesis and enhanced visible-light photoactivity of DyVO₄/g-C₃N₄I composite semiconductors, *Applied Catalysis B: Environmental*, 183 (2016) 426-432.
- [33] S. J. Duclos, A. Jayaraman, G. Espinosa, *et al.* Raman and optical absorption studies of the pressure-induced zircon to scheelite structure transformation in TbVO₄ and DyVO₄, *J. Phys. Chem. Solids*, 50 (1989) 769-775.
- [34] N. N. Patel, A. B. Garg, S. Meenakshi, *et al.* High Pressure Raman Scattering Study on the Phase Stability of DyVO₄, in: *AIP Conf. Proc.*, American Institute of Physics, 2011, pp. 99-100.
- [35] W. Paszkowicz, O. Ermakova, J. López-Solano, *et al.* Equation of state of zircon-and scheelite-type dysprosium orthovanadates; a combined experimental and theoretical study, *J. Phys.: Condens. Matter*, 26 (2013) 025401.
- [36] J. Bastide, Simplified systematics of the compounds ABX₄ (X = O²⁻, F⁻) and possible evolution of their crystal-structures under pressure, *J. Solid State Chem.*, 71 (1987) 115-120.
- [37] F. Manjón, P. Rodríguez-Hernández, A. Muñoz, *et al.* Lattice dynamics of YVO₄ at high pressures, *PhRvB*, 81 (2010) 075202.
- [38] D. Errandonea, F. Manjón, A. Muñoz, *et al.* High-pressure polymorphs of TbVO₄: A Raman and ab initio study, *J. Alloys Compd.*, 577 (2013) 327-335.
- [39] R. Rao, A. B. Garg, T. Sakuntala, *et al.* High pressure Raman scattering study on the phase stability of LuVO₄, *J. Solid State Chem.*, 182 (2009) 1879-1883.
- [40] H. Mao, J.-A. Xu, P. Bell, Calibration of the ruby pressure gauge to 800 kbar under quasi - hydrostatic conditions, *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 91 (1986) 4673-4676.
- [41] T. Marqueno, D. Errandonea, J. Pellicer-Porres, *et al.* High-pressure polymorphs of gadolinium orthovanadate: X-ray diffraction, Raman spectroscopy, and ab initio calculations, *PhRvB*, 100 (2019) 064106.