PEROVSKİTƏBƏNZƏR LAYLI Nd2Ti2O7 BİRLƏŞMƏSİNDƏ YÜKSƏK TƏZYİQLƏRDƏ VİBRASİYA MODALARININ TƏTQİQİ

A.G. ASADOV^{1,2}, A.İ. MAMMADOV¹, D.P. KOZLENKO², S.E. KİÇANOV², R.Z. MEHDİYEVA¹, E.V. LUKİN², O.N. LİS², R.E. HÜSEYNOV¹, E.R. HÜSEYNOVA¹, X.İ. ƏHMƏDOV¹

¹ Institute of Physics, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan,

 131, H. Javid ave., Baku, AZ 1073
² Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, 141980 Dubna, Russia. asifasadov@jinr.ru (99412)5372292

Perovskitəbənzər laylı Nd₂Ti₂O₇ birləşməsinin vibrasiya spektrlərinə yüksək təzyiqin təsiri Raman spektroskopiyasından istifadə etməklə 30.0 GPa-a qədər təzyiqlərdə tədqiq edilmişdir. P~19.0 GPada əsas monoklinik P2₁(C₂²) fazadan monoklinik P2(C₁²) struktur faza keçidi müşahidə edilmişdir. TiO₆ oktaedrinin əhəmiyyətli firlanması üçün təzyiq tətbiqinin rolu, atomlararası məsafələrin dəyişməsi və Nd atomlarının yerdəyişməsi müzakirə edilmişdir.

Açar sözlər: faza keçidləri, kiçik bucaq altında səpilmə, Nd₂Ti₂O₇ birləşməsinin kristal strukturu, Raman səpilməsi. **DOI:**10.70784/azip.3.2024C53

Giriş

Ümumi formulu $A_2B_2O_7$ olan laylı perovskitəbənzər (PL) materiallar piezoelektrik xassələri [1] və müasir texnologiyalarda müxtəlif tətbiqləri sayəsində [2] böyük marağa səbəb olur. Yüksək Küri (T_c) temperaturları və dielektrik nüfuzluğu (ε) onları digər ferroelektriklərdən fərqli edir. Bununla yanaşı, PL birləşmələrində müqavimət ölçmələri aşağı temperaturlarda yüksək anizotrop keçiricilik göstərir [3], bu da bu materialları temperaturla idarə olunan metal-yarımkeçirici keçidləri ilə müşahidə olunan kvazi-bir-ölçülü metallara çevirir [4]. Əlavə olaraq, ətraf mühitin çirkləndiricilərinin parçalanmasında və sudan hidrogenin ayrılmasında fotokatalizator olaraq, fotokatalitik fəaliyyəti artırmaq üçün istifadə edilir. [5-7].



Şəkil 1. Nd₂Ti₂O₇ birləşməsinin *a* və *c* oxu istiqamətləri üzrə kristalloqrafik təsvir sxemi.

B₂O₇ ferroelektriklərinin kristal quruluşu oksigenlə zəngin boşluqlarla ayrılmış struktur təbəqələri əmələ gətirən eyni bucaqlı künclərdə göstərilən BO₆ oktaedrləri və 12 koordinasiyalı A kationları ilə göstərilir (şəkil 1). Məlumdur ki, PL materiallarında spontan polarizasiya nadir torpaq ionlarının a oxuna perpendikulyar yerdəyişmələri, həmçinin TiO₆ oktaedrlərinin b kristalloqrafik oxu ətrafında fırlanmaları ilə müəyyən edilir [10]. Nd₂Ti₂O₇-nin yüksək temperatur tədqiqatlarında ilkin $P2_1(C_2^2)$ -dən ortorombik $Cma2_1(C^{12}_{2\nu})$ fazasına struktur faza keçidinin müşaidə edilməsi göstərilir ki, yeni faza, nadir torpaq ionlarının mövqelərinin bir qədər dəyişməsi, həmçinin TiO₆ oktaedrinin təhrif edilməsi və əyilməsi ilə fərqlənir [11]. Qeyd olunur ki, PL birləşmələrinin kristal strukturunda nadir torpaq ionlarının oktaedral əhatəsi və struktur düzülüşü onların elektrik və dielektrik xassələrində mühüm rol oynayır [12]. Demək olar ki, yüksək təzyiqlərin birbaşa üsul olaraq atomlararası məsafələrin və bucaqların tənzimlənməsi PL birləşmələrinin fiziki xassələrinə təsiri ətraflı öyrənilmişdir. Beləliklə, La2Ti2O7- də ~16.8 GPa təzyiqdə baş verən faza keçidinin izahı verilmiş və monoklinik P2 (C_2^1) fazasına izostruktur faza keçidinin baş verməsi göstərilmişdir [11,13]. Yüksək təzyiq fazası TiO₆ oktaedrinin əyilməsi və nadir torpaq ionlarının struktur təbəqələrinin yenidən nizalanması hesabına ilkin ferroelektrik fazanın pozulması ilə müəyyən edilir. PL ferroelektrikləri arasında Nd2Ti2O7 birləsməsində nadir torpaq ionlarının La₂Ti₂O₇ ilə müqayisədə daha kiçik ion radiusuna malik olması və bu səbəbdən daha yüksək struktur pozğunluğu ilə xarakterizə olunduğundan, onun ferroelektrik xassələrinində daha xüsusi azalmasını gözləmək olar [14]. Nd2Ti2O7 PL birləşməsinin struktur və vibrasiya xassələrinə yüksək təzyiqin təsirini başa düşmək üçün biz 0-30,0 GPa təzyiq diapazonunda Raman spektroskopiya üsulundan da istifadə edərək ətraflı tədqiqatlar apardıq.

Experiment

 $Nd_2Ti_2O_7$ birləşməsinin nümunələrinin sintezi üçün minerallaşma - polimerləşmə kompleks üsulundan istifadə edilmişdir. İlkin komponentlər kimi tetrabutil titanat (C₁₆H₃₆O₄Ti), etilen qlikol (C₂H₆O₂), limon turşusu (C₆H₈O₇) və niodim nitrat (Nd(NO₃)₃ × 6H₂O) istifadə edilmişdir. Qarışıq prekursor məhlulu, artıq sərbəst su buxarlanana və öz-özünə alovlanana qədər qızdırılaraq konsentrə edilmişdir. Kristallığı artırmaq üçün hazırlanmış nümunələri mufel sobasında 3 saat ərzində 1000°C-də qızdırılmışdır. İlkin rentgen analizi Nd₂Ti₂O₇-nin saf monoklinik PL fazasını göstərir. Bundan əlavə, Nd₂Ti₂O₇ birləşməsinin kristal quruluşu neytron difraksiya üsulu ilə tədqiq edilmişdir. Ölçmələr DN-6 difraktometri [16] ilə IBR-2 yüksək axınlı impulslu reaktorda (FLNP JINR, Dubna, Rusiya) aparılmışdır. Əldə edilmiş kristal quruluş parametrləri sıralanmışdır və qəfəs parametrləri a=7,763(4)Å, b=5,503(2)Å, c=25,962(3)Å və β =98,412(2)0 son zamanlar tapılanlarla yaxşı uyğunlaşdırılmışdır[17].

Raman spektrləri ətraf mühitin temperaturunda, 1atm- 30,8 GPa-a qədər təzyiqdə He-Ne lazerindən yayılan 633 nm dalğa uzunluğlu ilə Confotec® Duo spektrometrindən (SOL instruments GmbH, Augsburg, Almaniya), 1800 dərəcədən, 10 μ m dəlik, diapazon 20sm⁻¹–1100sm⁻¹ və x20 obyektivdən istifadə edilərək toplanmışdır. Raman spektrlərinin spektral ayırdetmə qabiliyyəti 2,5 sm⁻¹ - 3,2 sm⁻¹-dir.

Yüksək təzyiq təcrübələrində Boehler-Almax Plate tipli almaz anvil qəfəsi istifadə edilmişdir. 200µm-lik kuletləri olan almazlar istifadə edilmişdir. Nümunə, təxminən 30 µm qalınlığı olan Re gasgetdə hazırlanmış 100 µm diametrli dəliyə yüklənmişdir. Təzyiq metanol-etanol (4:1) qarışıq mühitində yaqut flüoresensiya texnikasından istifadə etməklə ölçülmüşdür [19].

Təzyiq ölçmələrində Almaz Anvil Qəfəsində (DAC) nümunənin yanında təzyiqölçən kimi yaqut çiplərindən istifadə etdik. Mikroskopik müşahidələr zamanı yaqut çipləri DAC-da yaqut çiplərini vizual olaraq təyin etməyə imkan verən gücləndirilmiş parlaqlıq göstərdi. İlkin şərtlərdə ($P \approx 1$ atm, T = ətraf mühitin temperaturu) yaqut kristal üçün əsas Raman rejimi təxminən 694,24 nm-dir. Sonra bu Raman rejiminin dəyişməsini təhlil edərək, Shen et. al. [20] tərəfindən göstərilən tənliklə hesabladıq.

Müzakirə

Nd₂Ti₂O₇ birləşməsinin seçilmiş təzyiqlərdə ölçülən Raman spektrləri şəkil 2-də göstərilmişdir. Göründüyü kimi, ətraf mühit şəraitində əldə edilmiş Raman spektrləri ümumiyyətlə La₂Ti₂O₇ birləşməsi üçün son zamanlar müşahidə edilən spektrlərinə bənzəyir. P2₁ (C₂²)- in monoklinik kristal quruluşu üçün simmetriya, qrup nəzəriyyəsi 132 Raman-aktiv modasını göstərir [12].



Şəkil 2. Raman spektrləri (a) və Nd₂Ti₂O₇-nin genişləndirilmiş hissələri (b və c) 0,9 GPa-dan 30,8 GPa-a qədər təzyiqdə və otaq temperaturunda. Təcrübə 633 nm He -Ne lazeri ilə 20 sm⁻¹-1100 sm⁻¹ diapazonda aparılmışdır.

Faza keçidinin baş verdiyi təzyiqdən aşağı təzyiqlərdə P < 19.2 GPa, müşahidə olunan dalğa ədədinin artması baş verir. Vibrasiya modalarının təzyiqdən asılılıqları .şəkil 3-də göstərilmişdir. Bu kontekstdə, 61,9 sm⁻¹ - 459,7 sm⁻¹ arasında dalğa ədədi diapazonunu əhatə edən Raman modaları Nd-O qarşılıqlı təsirlərinin qəfəs vibrasiyalarına aid olaraq təyin edilmişdir.

Eynilə, 459,7sm⁻¹ - 571,3sm⁻¹ arasında olan vibrasiya modaları TiO₆ oktaedr vibrasiyalarına aid edilmiş, dalğa ədədi diapazonu 788,6 sm⁻¹ - 814,6 sm⁻¹ arasında olanlar isə TiO₆ vibrasiyalarına aid edilmişdir. Raman vibrasiya modaları tərəfindən müşaidə edilən təzyiqlə bağlı dəyişikliklər tətbiq olunan təzyiq yüksəldikcə artırılmış Raman sürüşmələrinə nəzərəçarpacaq meyl göstərir. Nd-O atomlarının vibrasiyalarının müxtəlif növlərinə uyğun 196.2 sm⁻¹, 205.0 sm⁻¹, 221,0 sm⁻¹, 255,6 sm⁻¹, 289,0 sm⁻¹, 321,0 sm⁻¹ və 350,9sm⁻¹ dalğa uzunluqlarında olan vibrasiya modalarının ya tamam yoxa çıxmasına və ya da modaların intensivliyinin yoxa çıxması və ya fonun itirilməsinə gətirir. Raman vibrasiya modalarında müşahidə edilən zəifləmənin atomların [22], xüsusən də TiO₆ oktaedri ilə əhatə olunmuş Nd₁, Nd₂, Nd₇ və Nd₈ kimi qeyd olunanların fəza quruluşuna aid edilə biləcəyi düşünülür.Yüksək təzyiq şəraitində bu oktaedral vahidlərin pozulması baş verir, Bu Nd-O əlaqələrinin uzunluğunun azalmasına gətirib çıxarır və bununla da vibrasiyanın yayılmasına mane olur. Bu fərqli modalar, müvafiq ədəbiyyatda göstərildiyi kimi, Nd atomlarının koordinasiya ədədlərindəki dəyişikliklərlə izah oluna bilər [23]. Bu isə Nd₂Ti₂O₇ birləşməsində güman edilən faza keçidinin davamlı xarakterinin göstəricisi ola bilər [11]. Bəzi əlavə Raman modalarının yer alması aşağı simmetriyalı monoklinik fazaya keçidin göstəricisi ola bilər, bu da rentgen analizlərinin nəticələri ilə təsdiqlənir. Yüksək təzyiq əmsalları və Qrüneisen parametrləri 162,7 sm⁻¹, 365,0 sm⁻¹, 512,6 sm⁻¹ və 571,3 sm⁻¹ əlaqə modalari mənfidir və onlar qeyri-anizotropik Nd – O əlaqələri və TiO₆ vibrasiyaları deformasiyanı əks etdirən kifayət qədər fərqli qiymətlərə malikdirlər. Bu kontekstdə, yüksək təzyiqli mühitdə, əvvəlcədən mövcud olan monoklinik struktur konfiqurasiyadan yeni bir fazanın əmələ gəlməsi ilə izah edilə bilər. Bu yaranan fazada TiO₆ oktaedrlarının məruz qaldığı nəzərəçarpacaq bucaq təhrifi, Nd₃, Nd₄, Nd₅ və Nd₆ atomlarının *c* oxu istiqaməti boyunca baş verdiyi yerdəyişmə ilə birlikdə Nd-O əlaqəsinin uzanması ilə nəticələnir. Bu nəticəvi uzanma bu əlaqələrlə baglı enerjini əhəmiyyətli dərəcədə gücləndirir və nəticədə Raman sürüşmələrinin aşağı spektral rejimində nəzərəçarpacaq dərəcədə zəifləməsinə səbəb olur.



Şəkil 3. Nd2Ti2O7-nin vibrasiya modalarının təzyiqdən asılılıqları və onların xətti interpolyasiyası. Kəsik xətlər struktur faza keçidinə uyğun gələn təzyiqi P = 19,2 GPa ifadə edir. Bütün məlumat nöqtələri xüsusi təzyiqdə unikal Raman rejimini təmsil edir və xətti funksiya ilə təchiz edilmişdir.

Kristal quruluşun artan pozğunluğu Nd2Ti2O7-də ferroelektrik xassələrinin azalmasına səbəb ola bilər. Yüksək təzyiqlərdə təqribən ~800.0 sm⁻¹-də yerləşən dublet daxilində intensivliyin nəzərəcarpacaq dərəcədə yenidən paylanması müşahidə edilir. Bu nəzərə çarpan fenomen, əvvəlki işdə [26] göstərildiyi kimi, təhrif olunmuş TiO₆ oktaedrlərinin simmetriyası ilə edilə bilər. Tədqiqat zamanı aşkar edilmiş Raman spektrlərindəki dəyişikliklərin Nd2Ti2O7-nin ilkin aşağı təzyiq fazasında özünü göstərən struktur qeyri-sabitliyini əks etdirə bilər və bununla da bu birləşmədə ferroelektrikliyinin yaranmasının qarşısını ala bilər [11].Raman vibrasiyal modalarının alınma rejimlərinin təyin edilməsində son tədqiqatlar bir neçə əsas modaları müvəffəqiyyətlə müəyyən etmişdir [26-29]. Xüsusilə, RE-O sistemi daxilində S. Jiang et al. [29] 106.6 sm⁻¹ (Nd-O, Eg əyilməsi), 196.2 sm⁻¹ (Nd–O, A1g əyilməsi) tezliklərində mühüm vibrasiya modaları müəyyən etmişlər. Eynilə, Ti-O sistemi üçün bir neçə diqqətə cəlb edən vibrasiya modaları göstərilir. Bunlara 137,5 sm⁻¹ (O-Ti-O, B1g asimmetrik əyilmə), 236,0 sm⁻¹ (A2u + Eu, Multifonon prosesi), 390,7 sm⁻¹ (Nd–O məsələn, uzanma), 459,7 sm⁻¹ (O-Ti-O, məsələn, asimmetrik əyilmə), 512,6 sm⁻¹ (A1g + B1g), 610,8 sm⁻¹ (A1g, O-Ti-O simmetrik uzanma) və 814,6 sm⁻¹ (B2g, O-TiO asimmetrik uzanma) tezliklərdə modalar daxildir.

Nəticə

Hesablama məlumatları birmənalı şəkildə göstərir ki, ətraf mühit şəraitində kristal quruluşu Nd₂Ti₂O₇ 44 atomdan ibarət vahid hüceyrə malik olan P2₁ (C₂²)) monoklinik fazaya uyğundur. Nəticələrimiz göstərir ki, yüksək təzyiqin tətbiqi (P=19.2 GPa) laylı perovskitəbənzər birləşmə c-də ilkin P2₁ (C₂²) simmetriyasından P2 (C₁²) simmetriyası ilə yeni monoklinik fazanın əmələ gəlməsinə səbəb olur. 1 atm-dən 30,8 GPa-a qədər təzyiq diapazonunda atomlararası məsafələrin tədricən qısaldılması Nd₂Ti₂O7 vahid hüceyrəsində ikinci dərəcəli faza keçidinin baş verməsinə səbəb olur. Raman vibrasiya modalarının təhlili göstərir ki, yüksək təzyiqdə baş verən faza keçidi üçün yalnız P2 (C_1^2) fəza qrupu təxmin edilir. Bundan əlavə, Nd₂Ti₂O₇ -nin təzyiqdən asılı vibrasiya modaları tədqiq edilməsi faza keçidinə dair mühüm anlayışların ortaya çıxmasına səbəb oldu. Müəyyən dalğa diapazonlarını əhatə edən Raman modaları Nd-O qarşılıqlı təsirlərinin qəfəs vibrasiyaları, TiO₆ oktaedr vibrasiyaları və Ti-O uzanma vibrasiyaları kimi müəyyən edilmişdir. Yüksək təzyiq vibrasiya modalarında dəyişiklikləri ifadə edən Raman sürüşmələrinin artmasına səbəb oldu. Xüsusilə, Nd-O atom müxtəlif vibrasiyalarına uyğun gələn müəyyən vibrasiya modaları, ehtimal ki, Nd-O əlaqə uzunluqlarına təsir edən TiO₆ oktaedrindəki pozğunluqlar səbəbindən artan təzyiq altında yox olub və ya intensivliyini itirib.

- J. L'opez-P'erez, J. T'niguez, Ab initio study of proper topological ferroelectricity in layered perovskite La₂Ti₂O₇, Phys. Rev. B Condens. Matter. Mater. Phys. 84 (2011), https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075121.
- [2] N. Yamamoto, K. Yagi, G. Honjo, M. Kimura, T. Kawamura. New phases of Sr₂Ta₂O₇ and Sr₂Nb₂O₇ found by Electron microscopy and diffraction, J. Phys. Soc. Jpn. 48 (2013) 185– 191, <u>https://doi.org/10.1143/JPSJ.48.185</u>.
- [3] W.S. Kim, S.M. Ha, J.K. Yang, H.H. Park. Ferroelectric-Gate Field Effect Transistors Using Nd₂Ti₂O₇/Y₂O₃/Si Structures 398–399, 2001, pp. 663–667, https://doi. org/10.1016/S0040-6090(01)01333-5.
- [4] Z. Gao, L. Yi, L. Chengjia, M. Yongjun, X. Yuanhua, F. Leiming, H. Qiang, L. Yan, L.Gaomin, Y. Jia, H. Hongliang, H. Duanwei. Origin of the phase change from pyrochlore to perovskite-like layered structure and a new leadfree ferroelectric, Mater. Sci. (2017). https://arxiv.org/abs/1703.01016.
- [5] H. Yan, H. Ning, Y. Kan, P. Wang, M.J. Reece. Piezoelectric ceramics with super-high piezoelectric ceramics with super-high curie points, J. Am. Ceram. Soc. 92 (2009) 2270– 2275, <u>https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2009.03209.x.</u>
- [6] Y. Li, G. Chen, H. Zang, Z. Li, J. Sun. Electronic Structure and Photocatalytic Properties of ABi₂Ta₂O₉ (A=Ca, Sr, Ba) 181, 2008, pp. 2653– 2659,
- https://doi. org/10.1016/j.jssc.2008.05.020.
- [7] D.W. Hwang, H.G. Kim, J.S. Lee, J. Kim, W. Li, S.H. Oh. Photocatalytic Hydrogen Production from Water over M-Doped La₂Ti₂O₇ (M = Cr, Fe) under Visible Light Irradiation ($\lambda > 420$ nm) 106, 2004, pp. 2093–2102, https://doi.org/10.1021/jp0493226.
- [8] G. Herrera, J. Jim'enez-Mier, E. Chavira. Layered-structural monoclinic-orthorhombic perovskite La₂Ti₂O₇ to orthorhombic LaTiO₃ phase transition and their microstructure

Əksinə, P =20.0 GPa olduqda müəyyən dalğa ədədlərində yeni vibrasiya modalarının yaranmasına, Nd atomlarının koordinasiya ədədlərində dəyişikliklərə və davamlı faza keçidinə işarə edir. Mənfi Grüneisen parametrlərinin görünməsi, yeni modaların formalaşması və piklərin yox olması, TiO₆ oktaedrində əyilmə və Nd-O əlaqələrinin uzanmasına səbəb olan yeni fazanın əmələ gəlməsi ilə əlaqələndirildi.

Bu struktur qeyri-sabitliyi Nd₂Ti₂O₇-də ferroelektrik vəziyyətin yaranmasının qarşısını ala bilər, bu da kristal strukturunda artan pozğunluq səbəbindən sıxılmış ferroelektrik vəziyyətlə əlaqəlidir. Faza keçidindən əvvəl və sonra sıxılma parametrlərindəki fərqlər *c* oxu boyunca sıxılmanın *a* və *b* oxları ilə müqayisədə daha əhəmiyyətli olduğunu göstərir. Nd₂Ti₂O₇ üçün hesablanmış toplu modulu əvvəl və sonra müvafiq olaraq B0 = 191,6(3) GPa və B0 = 202,2(3) GPa-dır.

characterization, Mater. Charact. 89, 2014, 13–22,

https:// doi.org/10.1016/j.matchar.2013.12.013.

- [9] N. Ishizawa, K. Ninomiya, T. Sakakura, J. Wang. Redetermination of Nd₂Ti₂O₇: a noncentrosymmetric structure with perovskite-type slabs, Acta Crystallogr. 69 (2013) i19, https://doi.org/10.1107/S1600536813005497.
- [10] F.X. Zhang, J. Lian, U. Becker, R.C. Ewing, L.M. Wang, Hu Jingzhu, S.K. Saxena. Structural change of layered perovskite La₂Ti₂O₇ at high pressures, J. Solid State Chem. 180 (2007) 571– 576, <u>https://doi.org/10.1016/j.jssc.2006.11.022</u>.
- [11] S.J. Patwe, V. Katari, N.P. Salke, S.K. Deshpande, R. Rao, M.K. Gupta, R. Mittal, S. N. Achary, A.K. Tyagi. Structural and electrical properties of layered perovskite type Pr₂Ti₂O₇: experimental and theoretical investigations, J. Mater. Chem. C 3, 2015, 4570–4584, https://doi.org/10.1039/C5TC00242G.
- [12] A.G. Asadov, D.P. Kozlenko, A. Mammadov, R. Mehdiyeva, S.E. Kichanov, E. V. Lukin, O.N. Lis, A.V. Rutkauskas. A structural phase transition in La₂Ti₂O₇ at high pressure, Phys. B Condens. Matter 655, 2023, 414753, https://doi.org/ 10.1016/j.physb .2023. 414753.
- [13] E. Bruyer, A. Sayede. Density functional calculations of the structural, electronic, and ferroelectric properties of high-k titanate Re₂Ti₂O₇Re₂Ti₂O₇ (re=LaRe=La and Nd), J. Appl. Phys. 108, 2010, 053705, https://doi.org/10.1063/1.3459891.
- [14] M.M. Milanova, M. Kakihana, M. Arima, M. Yashima, M. Yoshimura. A simple solution route to the synthesis of pure La₂Ti₂O₇ and Nd₂Ti₂O₇ at 700–800°C by polymerized complex method, J. Alloys Compd. 242, 1996, 6–10, https://doi.org/ 10.1016/0925-8388(96)02323-7.
- [15] D. Kozlenko, S. Kichanov, E. Lukin, B. Savenko. The DN-6 neutron diffractometer for highpressure research at half a Megabar scale, Crystals 8, 2018, 331, https://doi.org/10.3390/cryst8080331.

PEROVSKİTƏBƏNZƏR LAYLI Nd2Ti2O7 BİRLƏŞMƏSİNDƏ YÜKSƏK TƏZYİQLƏRDƏ VİBRASİYA MODALARININ...

- [16] K. Scheunemann, Hk. Müller-Buschbaum. Zur Kristallstruktur von Nd₂Ti₂O₇, J. Inorg. Nucl. Chem. 37, 1975, 2261–2263, https://doi.org/10.1016/0022-1902(75)80723-8.
- [17] J. Rodiguez-Carvajal. Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction, Physica B 192, 1993, 55, https://doi.org/10.1016/0921-4526(93)90108-I.
- [18] J.C. Chervin, B. Canny, M. Mancinelli. Rubyspheres as pressure gauge for optically transparent high pressure cells, High Pressure Res. 21, 2006, 305–314, https://doi.org/10.1080/08957950108202589.
- [19] N.O. Golosova, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, A.V. Rutkauskas, K. V. Glazyrin, B.N. Savenko. Magnetic and structural properties of Fe-doped layered cobaltite TbBaCo_{1.91}Fe_{0.09}O_{5.5} at high pressures, J. Magn. Magn. Mater. 494, 2020, https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165801, 165801.
- [20] G. Shen, Y. Wang, A. Dewaele, C. Wu, D.E. Fratanduono, J. Eggert, S. Klotz, K. F. Dziubek, P. Loubeyre, O.V. Fatyanov, P.D. Asimow, T. Mashimo, R.M.M. Wentzcovitch. Toward an International Practical Pressure Scale: A Proposal for an IPPS Ruby Gauge (IPPS-Ruby2020) 40, 2020, pp. 299–314, https://doi.org/ 10.1080/08957959.2020.1791107.
- [21] R. Jeanloz. Universal equation of state, Phys. Rev. B 38, 1988, 805, https://doi.org/10.1102/PhysRevP.38.805

https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.805.

[22] A. Segura, R. Cusc'o, T. Taniguchi, K. Watanabe, G. Cassabois, B. Gil, L. Artús, Highpressure softening of the out-of-plane A2u(transverse-optic) mode of hexagonal boron nitride induced by dynamical buckling, J. Phys. Chem. C 123, 2019, 17491–17497, https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b04582.

- [23] H. Man, A. Ghasemi, M. Adnani, M.A. Siegler, E. Anber, Y. Li, C.L. Chien, M. Taheri, C.W. Chu, C.L. Broholm, S.M. Koohpayeh. Quantum paramagnetism in a non-Kramers rare-earth oxide: monoclinic Pr₂Ti₂O₇, Mater. Sci., 2022. https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.06758.
- [24] N.A. Abdullaev. Grüneisen parameters for layered crystals, Phys. Solid State 43, 2001. 727–731, https://doi.org/10.1134/1.1366002.
- [25] P.S. Peercy, B. Morosin. Pressure and temperature dependences of the Raman-active phonons in SnO₂, Phys. Rev. B 7, 1973, 2779. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.7.27 79.
- [26] F.X. Zhang, M. Lang, J.M. Zhang, Z.Q. Cheng, Z.X. Liu, J. Lian, R.C. Ewing. Phase transition and abnormal compressibility of lanthanide silicate with the apatite structure, Phys. Rev. B 85, 2012, 214116. https://link.aps.org/doi/10.1103 /PhysRevB.85.214116.
- [27] I. Luka cevi c, S.K. Gupta, P.K. Jha, D. Kirin. Lattice dynamics and Raman spectrum of rutile TiO₂: the role of soft phonon modes in pressure induced phase transition, Mater. Chem. Phys. 137, 2012, 282–289, https://doi.org/10.1016/j. matchemphys.2012.09.022.
- [28] Y. Zhang, C.X. Harris, P. Wallenmeyer, J. Murowchick, X. Chen. Asymmetric lattice vibration characteristics of rutile TiO2 as revealed by laser power dependent Raman, Spectroscopy 117, 2013, 24015–24022, https://doi.org/10.1021/jp406948e.
- [29] S. Jiang, J. Liu, L. Bai, X. Li, Y. Li, S. He, S. Yan, D. Liang, Anomalous Compression Behaviour in Nd₂O₃ Studied by X-ray Diffraction and Raman Spectroscopy 8, 2018, https://doi.org/10.1063/1.5018020, 025019.

A.G. Asadov, A.İ. Mammadov, D.P. Kozlenko, S.E. Kiçanov, R.Z. Mehdiyeva, E.V. Lukin, O.N. Lis, R.E. Huseynov, E.R. Huseynova

STUDY OF VIBRATION MODES AT HIGH PRESSURES IN LAYERED PEROVSKITE-LIKE Nd₂Ti₂O₇

The vibrational properties of a layered Nd₂Ti₂O₇ have been studied by means Raman spectroscopy at pressures up to 30 GPa. The gradual structural phase transition from the initial monoclinic $P2_1$ (C_2^2) phase to the monoclinic P2 (C_1^2) phase was observed at $P \sim 19$ GPa. The role of pressure application as a trigger for a significant rotation of the TiO₆ octahedra, alterations in interatomic distances, and the displacement of Nd atoms were discussed.