

Pel-H

PdH

PdD

сдвиг

№ 12 Д151. Спектр PdH и PdD. Lagerqvist A., Neuhaus H., Scullman R. Spectra of PdH and PdD. «Proc. Phys. Soc.», 1964, 83, № 3, 498—499 (англ.)

В области 4100—4700 Å в третьем порядке дифракционного прибора с вогнутой 10,7-м решеткой (дисперсия 0,48 Å/мм) получены спектры поглощения PdH и PdD в печи Кинга ($T \sim 2800^\circ \text{C}$), наполненной Pd и H или Pd и D. Обнаружено изотопич. расщепление ряда полос, соответствующее наиболее распространенным изотопам Pd. Выполнен анализ отнесенной в длинноволн. сторону полосы 4048,6 Å PdD (вероятно, $\Delta v \geq 1$). Полоса отнесена к переходу $^2\Sigma - ^2\Sigma$ (нижнее состояние основное). Получены следующие значения молекулярных констант (в см^{-1}): $B' = 2,950$, $B'' = 3,613$, $D' = 2,8 \cdot 10^{-4}$, $D'' = 1,03 \cdot 10^{-4}$, $\gamma' = -0,45$, $\gamma'' = 2,30$. В верхнем состоянии обнаружены возмущения. Ф. Ортенберг

1964

11-2060-VI
59-2060-VI

ф. 1964. 12

PdH

PdD

6ep - 2060 - VI

1964

16575 SPECTRA OF PdH AND PdD. A. Lagerqvist,
H. Neuhaus, and R. Scullman (Univ. of Stockholm). Proc.
Phys. Soc. (London), 83: 498-9(Mar. 1964).

A rotational analysis is presented of the 4048.6 Å band
of PdD observed in absorption in a King furnace at 2800°C.
Spectra of PdH were also observed. (R.E.U.)

NSA-1964-18-10

Bsp - 2060 - VI

1964

PdH

(Cyper)

Spectra of PdH and PdD. A. Lagerqvist, H. Neuhaus, and R. Scullman (Univ. Stockholm). *Proc. Phys. Soc. (London)* 83(533), 498-9(1964). Absorption was observed in a King furnace with Pd and H as well as with Pd and D at 2800° in the spectral region 4100 to 4700 Å. The structure of both spectra are complicated, except for a weak band with a head at 4048.6 Å. Several bands show isotope sepns. fitting the most abundant Pd isotopes, 104, 105, 106, 108, and 110. The PdD band at 4048.6 Å. has structure which appears to be that of a $^2\Sigma-^2\Sigma$ transition. From the isotope shifts and the fact that the band is degraded to longer wavelengths, the vibrational transition has most probably $\Delta v \geq 1$. The following mol. consts. in cm^{-1} were derived: B' 2.950, B'' 3.613, D' 0.00028, D'' 0.000103, γ' -0.45, and γ'' 2.30. The upper state shows a perturbation which increases with increasing N . Walter J. Lafferty

C. A. 1964 Csp N/A 14048 f.

1964

Pd H
Pd D
спектр

1 Б71. Спектр PdH и PdD. Lagerqvist A., Neuhaus H., Scullman R. Spectra of PdH and PdD. «Proc. Phys. Soc.», 1964, 83, № 3, 498—499 (англ.).

В области 4100—4700 Å в третьем порядке дифракционного прибора с вогнутой 10,7-м решеткой (дисперсия 0,48 Å/мм) получены спектры поглощения PdH и PdD в печи Кингат (T 2800°), наполненной Pd и H или Pd и D. На ряде полос обнаружено изотопич. расщепление, соответствующее наиболее распространенным изотопам Pd. Выполнен анализ отнесенной в длинноволновую сторону полосы 4048,6 Å PdD (вероятно, $\Delta V \geq 1$). Проведено отнесение полосы к переходу $^2\Sigma \rightarrow ^2\Sigma$, где нижнее состояние является основным состоянием молекулы. Получены следующие значения мол. констант (в см^{-1}): B' 2,950, B'' 3,613, D' $2,8 \cdot 10^{-4}$, D'' $1,03 \cdot 10^{-4}$, γ' —0,45, γ'' 2,30. В верхнем состоянии обнаружены возмущения.

Ф. Ортенберг

ж. 1965.1

ВУ-11-7057

1969

11 Б229. Спектры поглощения PdD в области 4000—5000 Å. Malmberg Christina, Scullman Rosemary, Nylen Per. The absorption spectrum of PdD in the 4000—5000 Å region. «Arkiv fys.», 1969, 39, № 6, 495—510 (англ.)

В области 3100—6400 Å получены спектры поглощения молекул PdH и PdD в печи Кинга. Анализ спектра PdH затруднен вследствие сильных возмущений. Выполнен анализ колебательно-вращательной структуры полос при 4000—5000 Å молекулы PdD, отнесенных в длинноволновую область и принадлежащих двум электронным переходам типа $^2\Sigma-^2\Sigma$. Для молек. постоянных основного состояния $X^2\Sigma$ изотопа $Pd^{108}D$ получены значения $B_v = 3,6489 - 0,0812(v+1/2)$, $\gamma_v = -2,262 - 0,051(v+1/2)$, $\omega_e = 1446,02$ и $\omega_e X_e = 19,59 \text{ см}^{-1}$. Отмечены сильные возмущения, затрудняющие определение молек. постоянных для возбужденных состояний.

Резюме

PdD

PdH

спектр

М.И.

X. 1970. 11

PdD

м.и.

8;

ВР-11-7057

1969

№ 6 Д389. Спектр поглощения PdD в области 4000—5000 Å. Malmberg Christina, Scullman Rosemary, Nylen Per. The absorption spectrum of PdD in the 4000—5000 Å region. «Arkiv fys.», 1969, 39, № 6, 495—510 (англ.)

В печи Кинга при 2800°С получены спектры поглощения PdH и PdD в области 3100—6400 Å. Выполнен колебательно-вращательный анализ 20 полос PdD, начинающихся на уровнях $X^2\Sigma^+ v''=0, 1, 2$ и 3. Полосы отнесены к переходам $2\Sigma - 2\Sigma$. Два верхних состояния, принадлежащие электронным конфигурациям $KLMN_{sp}(4d\sigma)^2(4d\pi)^4(4d\delta)^4 5p\sigma$ и $KLMN_{sp}(4d\sigma)^2(4d\pi)^4(4d\delta)^4 6s\sigma$, образованы из Pd (3D) + D(2S) и Pd(1D) + D(2S) атомов. Вычислены значения термов нижнего и верхних состояний и равновесные константы молекулы $^{108}\text{PdD}(X^2\Sigma^+)$. Библи. 6. И. Дворников

ар. 1970. 68

PdH

PdD

M.H.

metip

noted

C.A. 1970.

72.2

(7624b) Absorption spectrum of PdD in the 4000-5000 Å region. Malberg, Christina; Scullman, Rosemary; Nylén, Per (Univ. Stockholm, Stockholm, Swed.). *Ark. Fys.* 1969, 39(35), 495-510 (Eng). The absorption spectra of PdH and PdD were obtained in a King furnace and photographed in the wavelength region between 3100-6400 Å. Because of strong perturbations no anal. has been performed on PdH. The PdD spectrum is not quite so perturbed and 12 bands have been rotationally and partly vibrationally analyzed. The bands are red shaded and they are all of the $^2\Sigma-^2\Sigma$ character. They come from 4 vibrational levels of the $^2\Sigma^+$ ground state, $v'' = 0, 1, 2$ and 3, and go to 5 excited levels. Due to the perturbations no unambiguous vibrational anal. on the upper levels has been performed, but they probably belong to 2 excited $^2\Sigma^+$ states. For the $X^2\Sigma$ ground state of the isotopic mol. ^{108}PdD , the following consts. (in cm^{-1}) have been derived: $B_v = 3.6489 - 0.0812(v + 1/2)$; $\gamma_v = -2.262 - 0.051(v + 1/2)$; $\omega_e = 1446.02$; $\omega_e x_e = 19.59$. RCTT

1969

X

505

117

89-11

XVI-987

1941

PdH

(u.n.)

(8689w) Hyperfine interaction and chemical bonding in the palladium hydride molecule. Knight, Lon B., Jr.; Weltner, William, Jr. (Dep. Chem., Univ. Florida, Gainesville, Fla.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 40(2), 317-27 (Eng). The ESR spectra of PdH and PdD mols. in the $^3\Sigma^+$ ground state were obsd. while trapped in Ar (and Kr) matrices at 4°K. The hyperfine-coupling tensor components relative to both ^{105}Pd and H or D nuclei were detd. and g tensor components found to be $g_{11} = 1.965$, $g_{\perp} = 2.293$. Anal. of these data indicate that the ground-state configuration of PdH is $KLMN_p (4d\delta)^4(4d\pi)^4(5s\sigma)^2(4d\sigma)$ and that an excited $^3\Pi_i$ state of configuration $\dots(4d\pi)^3(5s\sigma)^2(4d\sigma)^2$ lies about 20,000 cm^{-1} above the $X^3\Sigma$. The value of $g_{\perp}$ is in accord with this and also in accord with the obsd. large neg. value of γ_0 , the spin-doubling const. in the ground state. The spin d. on H is small (probably <10%) indicating that the bonding is highly ionic.

C.A. 1942. 46.2

1972

PdH_xNiH_x(Prepr.)
clgju)

52595g Electronic energy bands of metal hydrides. Palladium and nickel hydride. Switendick, A. C. (Sandia Lab., Albuquerque, N. Mex.). *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1972, 76(6), 535-42 (Eng). Electronic energy band calcs. for transition metal hydrides provide a new theoretical understanding of these materials. The calcs. show when the proton model has relevance and when the anion model is more appropriate, the essential feature being the structure of the hydride. The structure in turn is detd. by the lowest energy state of the solid. The relative positions of the electronic energy levels are found to be a function of the interat. distances. The relative stability and structures of the metal hydrides are understood in terms of their band structures. The calcs. lead to a unifying new model, the "band model," for interpreting and understanding the electronic properties of these materials. Energy band calcs. of the Pd-H system for various structures are given. The calcs. were

CA. 1972. 74, 8

-11



carried out with the H atoms occupying various interstitial positions in the fcc. Pd lattice to represent varying H contents for PdH_x (specifically, for $x = 0.25, 0.75, 1.0$, and 2.0). In contrast to the simple proton model for this system, the calculations are able to show why β -phase PdH saturates at higher H concentrations than the known concentration of holes in Pd bands. Calculations for Ni hydride also show why the simple bandfilling concept fails. This result is in agreement with recent experimental electronic specific heat measurements. Both systems demonstrate that the rigid band model is not applicable.

1976

PdH

(J.S. Coenraets)

84: 185165h Electronic states of substoichiometric compounds and application to palladium hydride. Faulkner, J. S. (Met. Ceram. Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Phys. Rev. B* 1976, 13(6), 2391-7 (Eng). A theory for the electronic states of substoichiometric compds. based on the coherent-potential approx. is described. Extensive numerical calcs. were carried out on palladium hydride. These results and the applicability of the theory to this system and other systems will be discussed.

C.A. 1976 84 N26

$\text{Pd}_6\text{-H}$ (кластера)

1978

Adachi Hirohiko, et al

J. Phys. Soc. Jpn. 1978,
44(3), 1039-40

кв. мех.
расчет
кластеров

сст. $\text{Ti}_6\text{-H}$ - III

Записки реферата. Мартинелло 1978

PdH

88: 197793g Transition-metal hydrides: Electronic structure and the heats of formation. Gelatt, C. D., Jr.; Ehrenreich, H.; Weiss, Jacquelyn A. (Phys. Dep., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *Phys. Rev. B* 1978, 17(4), 1940-57 (Eng). Calcns. of the electronic structure of transition metal hydrides are applied to the cohesive energy of 3d and 4d monohydrides, and the single-particle lifetime of states in nonstoichiometric Cu and Pd hydrides. A simple formula is presented which delineates the principal contributions to the cohesive energy of the hydrides: (i) the formation of a metal-H-bonding level derived of states of the pure metal band structure which have s symmetry about the site of the added proton, (ii) a slight increase in binding of the metal d bands due to the added attractive potential, and (iii) the addn. of an extra electron to the metal electron sea. The calcns., correlated for Coulomb repulsion at the H sites, qual. reproduce the exptl. trends of the heats of formation of the transition metal hydrides. The single-particle lifetime calcns. are in quant. agreement with Dingle-temp. measurements and they correctly predict the existence of essentially undamped states on the hole sheets of the α -phase PdH Fermi surface.

C.A. 1978, 82, N&B

1978

PDH

Switendick A.C.

obzop

Adv. Chem. Ser. 1978,
164

31. exp pa

(Cu TiH₂ III)

РdH

Коммуна 9906 | 1980

Basch H., et al.

Электр.
суперк.,
кв. мех.
расст

Israel J. Chem., 1980,
19, 233-41

М.Н.

(сст. Pd₂; IV)

PdH

Коммеса 11150 1981.

Bagus P. S., et al.

кб. мех.
расчет
дл. стерж.

Phys. Rev. 1981, A23,
461-72.

all. NiH; III

Род. и. Н.2

[оттиски 12430] 1981

Багаурьяну А. А.,
изр.

кв. мех.
раск.с
милейной

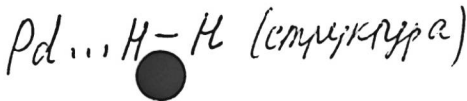
Журн. груз. хим.,
1981, 56, 2035-2039.

PdH_2

1981

Кв. :вех. расем,
Темрукмур

95: 157047e Nonempirical calculation of the interaction of molecular hydrogen with a palladium atom. Bagatur'yants, A. A.; Anikin, N. A.; Zhidomirov, G. M.; Kazanskii, V. B. (Inst. Org. Khim. im. Zelinskogo, Moscow, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1981, 55(8), 2035-9 (Russ). The interaction of H_2 with a Pd atom was analyzed by the nonempirical SCF MO LCAO method. The approach of H_2 to Pd at fixed bond length (0.074 nm) is considered in approxg. the case of an orthogonal (T-forming) structure for a case of a mol. complex formation. The calcns. were performed also for the linear structure Pd...H-H. The formation of the mol. complex is energy-wise convenient. The electronic structure and bond nature of the mol. complex were analyzed and the role of the external s- and p AO of Pd in the Pd-ligand bond formation is discussed.



C. A. 1981, 95, N18.

1981

PdH₂Pd₂H₂Kb. all.
factors

94: 163056c Quantum-chemical calculations of atomic clusters of palladium and their interaction with chemisorbed particles. I. Calculation of palladium...molecular hydrogen and molecular palladium...molecular hydrogen systems by the CNDO method. Kuz'minskii, M. B.; Bagatur'yants, A. A.; Zhidomirov, G. M.; Kazanskii, V. B. (Inst. Org. Khim. im. Zelinskogo, Moscow, USSR). *Kinet. Katal.* 1981, 22(1), 151-6 (Russ). The interaction of chemisorbed H₂ with Pd atoms and Pd₂ clusters was studied within the CNDO method by considering different coordinations for H₂ (bridging, di-σ-, π-). Weakening of the H-H bond during interaction with Pd is considered. The binding is of the donor-acceptor type, with the main contribution coming from overlapping of the s orbitals of the Pd and H atoms. A small pos. charge originates at the H atoms. The results are compared with literature data involving other quantum mech. calcs. The study is of interest in catalysis.

© 1981 GYND

PdH

[Ommuck 13382]

1982

Methfessel M., Kübler J.

некрон.
структура,
расчет

J. Phys. F: Metal. Phys.

1982, 12, N1, 141-161.

PdH

Om. 15563

1982

97: 223267w Pseudopotential SCF and CI investigation of the electronic structure of, palladium hydride (PdH), palladium carbide (PdC), and palladium carbonyl (PdCO) molecules. Pacchioni, Gianfranco; Koutecky, Jaroslav; Fantucci, Piercarlo (Inst. Phys. Chem., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 92(5), 486-92 (Eng). The electronic structures of PdH, PdC, and PdCO mols. were studied by means of the pseudopotential multireference double-excitations CI method. The differences in the bonds of PdH, PdC, and PdCO were explained with these calcs. Correlation effects are crucial for understanding the chem. bonding.

meopem.
paciem

(+2) ☒

C.A. 1982, 97, N26

PdH

Om. 15563

1982

3 Д127. Исследование электронного строения PdH, PdC и PdCO методом ССП с учетом конфигурационного взаимодействия с использованием псевдопотенциала. Pseudopotential SCF and CI investigation of the electronic structure of PdH, PdC and PdCO. Pacchioni Gianfranco, Koutecký Jaroslav, Fantucci Piercarlo. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 5, 486—492 (англ.)

рас. м.п., до;

Методом ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия большого числа одно- и двукратно возбужденных конфигураций и с использованием псевдопотенциала Дюрана и Бартела исследовано электронное строение PdH (I), PdC (II) и PdCO (III). Для Pd использованы базис гауссовых ф-ций $3s2p4d$, сгруппированный в минимальный, и 2 базиса $4s2p5d$, сгруппированных в $2s1p-2d$, оптимизированных для основного 1S - и возбужденного 3D -состояний атома Pd. III полагалась линейной.

(+2) X

ор. 1983, 18, № 3

Обнаружено, что базис, оптимизированный по состоянию 3D , лучше передает перераспределение электронной плотности при образовании молекул. Приведены длины связей, энергии диссоциации, распределения электронной плотности. Для I длина связи (3,06 Å) согласуется с эксперим. значением (2,90) несколько лучше, чем найденная в полном неэмпирич. расчете в двухконфигурац.

приближении метода МК ССП; также несколько лучшей является и энергия диссоциации, хотя она и остается заниженной более чем вдвое. Показано, что связь Pd с лигандами в I и II является ионной (в отличие от ван-дер-ваальсовой связи в PdH_2), причем Pd является преимущественно σ -донором, тогда как в III она обладает большим ковалентным характером, а Pd является σ -акцептором и π -донором. В. Л. Лебедев

PdH

Om. 15563

1982

6 Б28. Исследование методами ССП и КВ электронного строения PdH, PdC и PdCO в псевдопотенциальном приближении. Pseudopotential SCF and CI investigation of the electronic structure of PdH, PdC and PdCo. Pacchioni Gianfranco, Koutecký Jaroslav, Fantucci Piercarlo. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 5, 486—492 (англ.)

В рамках методов ССП МО ЛКАО и конфигурац. взаимодействия (КВ) с использованием приближения псевдопотенциала рассчитаны равновесные межъядерные расстояния, энергии диссоциации, дипольные моменты и распределение заряда в молекулах PdH, PdC и PdCO. Для каждой из молекул расчеты выполнялись с 3 различными базисами валентных АО, оптимизированных для различных возможных валентных конфигураций атома Pd. В методе КВ учитывались одно- и двухэлектронные возбуждения при одной или нескольких исходных конфигурациях (MRDCI). На примере PdH показано, что отличия теор. результатов от экспе-рим. не превосходят подобных отличий в расчетах с учетом всех электронов методом КВ. Учет корреляц.

геометрия,
структ., до;

(+2)

х. 1983, 19,
N 6

эффектов приводит к усилению ионного характера связи в PdH и PdC . В системе $\text{Pd}-\text{CO}$ связь слабее, чем в молекуле PdC , что отражается в увеличении длины связи $\text{Pd}-\text{C}$ (3,98 ат. ед. в $\text{Pd}-\text{CO}$ и 3,77 в $\text{Pd}-\text{C}$). Анализ распределения заряда показал, что в соединении Pd с атомами C и H атом Pd действует как σ -донор. Более ковалентная природа взаимодействия $\text{Pd}-\text{CO}$ м. б. описана в терминах σ -акцепторных и π -донорных характеристик атома металла. Наиболее точные значения молек. постоянных рассчитаны с базисом, оптимизированным для состояния $^3D(4d^95s^1)$ атома Pd ; следовательно, в молекуле валентная конфигурация атома Pd перестраивается с увеличением доли d^9s^1 -конфигурации.

И. А. Тополь

ро.
 зар

PdM

Ommex 14216

1982

Pettersson L., Wahlg-
ren U.,

конспект

Chem. Phys. Lett., 1982,
89, №1, 26-30.

MPdH

1983

Blomberg M., Brande-
mark U., et al.,

"Int. J. Quantum Chem.",
1983, 23, N 3: Proc.

4th Int. Congr. Quantum
Chem., Uppsala, 13-20

June, 1982. Contrib. Pap.
Pt 3, 855-863. (Cu, Fe, Ni, H,
M)

неопре-
делен
смысл

Pd_6H

1983

Frítésche H.-G.

Рассет
электрон.
плотности.

Z. Chem., 1983, 23, N3,
109.

(сер. Pd_6H ; III)

PdH⁺ (2)

(om. 19890)

1984

Mandich M.L., Halle L.F.,
et al.

Do; J. Amer. Chem. Soc., 1984,
106, N 16, 4403-4411.

РдМ

1983

1 Б1022. Расчеты методом эффективного остовного потенциала с использованием замороженных орбиталей. Применения к переходным металлам. Effective core potential calculations using frozen orbitals. Applications to transition metals. Pettersson Lars G. M., Wahlgren Ulf, Groven Odd. «Chem. Phys.», 1983, 80, № 1—2, 7—16 (англ.)

расчет
м.п.

Метод эффективного остовного потенциала (МЭОП) модифицирован с целью включения в расчет замороженных остовных АО для улучшения описания взаимодействия внешних остовных и валентных орбиталей. Орби-



х. 1984, 19, N1

тали в МЭОП разделялись на 3 группы. Валентные АО или МО находились вариационным способом с учетом ограниченного базиса, получаемого из полного базиса в результате исключения базисных функций с наибольшими показателями экспонент. Внешние остовные АО представлены замороженными орбиталями, разложенными по тому же базису, что и валентные орбитали. Внутренние остовные АО заменялись операторами сдвига уровня и сферически симм. локальными потенциалами. Найдены параметры ЭОП для атомов Sc, Ni и Pd. В рамках МЭОП рассчитаны длины связей молекул PdH, NiO и ScO в основном состоянии и величины барьеров вращения в $[\text{NiH}_4]^{2-}$ и $[\text{PdH}_4]^{2-}$, хорошо согласующиеся с данными неэмпирич. расчетов, проведенных с учетом всех электронов. Использование в расчетах многоконфигурац. методом ССП и методом конфигурац. взаимодействия приближения ЭОП позволило с хорошей точностью вычислить энергии возбуждения и спектроскопич. постоянные состояний $^2\Delta$ и $^2\Pi$ молекулы NiH.

И. А. Тополь.

PdD

[Om. 20391]

1983

dr. n.,
Odzor

Sassenberg U.,
Inaugural dissertation,
Institute of Physics,
University of Stockholm
S-113 46 Stockholm,
● 1983.

PdH

1985

Beckmann H.-O.,

Pacchioni G., et al.

Ракрем
емпык-
м.у.р.с.

Chem. Phys. Lett., 1985,
116, N5, 423-428.

(Cur. Sc. Li; III)

Plk(2) [Om. 22 261 a"] 1985

Squires R. R.,

No J. Amer. Chem. Soc., 1985,
107, N 15, 4385-4390.

PdH^+

1986

неоп. пацен

105:121171b Nonempirical calculation of palladium monohydride($1+$) cation and angular structure of palladium dihydride in a double exponent basis. Anikin, N. A.; Bagatur'yants, A. A.; Karanskii, V. B. (Inst. Org. Khim. im. Zelinskogo, Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1986, 60(5), 1310-11 (Russ). The electronic structure and stability of PdH^+ and PdH_2 ($\angle \text{HPdH} = 90^\circ$) were calcd. ab initio by using an extended basis. The Pd-H bond is formed by participation of outer 5s, p-AO's of Pd. Their contribution decreases with increasing pos. charge on the Pd atom, and the bond weakens appreciably. Based on a comparison with literature data for PdH_2 , the extended basis and contribution of electron correlation do not change the conclusions about the covalent character of the Pd-H bond and the unfavorable dissocn. of H_2 at the Pd atom.

121171 PdH₂



C.A. 1986, 105, N 14

PdH

1986

18 Б1035. Неэмпирический расчет PdH и угловой структуры PdH_2 в двухэкспонентном базисе. Ани-к-ин Н. А., Бататурьянц А. А., Казанский В. Б. «Ж. физ. химии», 1986, 60, № 5, 1310—1311

Неэмпирическим методом ССП в расширенном базисе рассчитаны системы PdH^+ и PdH_2 ($\angle \text{HPdH} = 90^\circ$).

Изучено электронное строение и прочность связи $\text{Pd}-\text{H}$ к-рая образуется при участии внешних $5s$ -, p -АО Pd . Их вклад при увеличении положит. заряда на Pd уменьшается, а связь — существенно ослабляется. Из сопоставления с лит. данными для PdH_2 сделан вывод, что расширение базиса и учет электронной корреляции не изменяют выводов о ковалентном характере связи $\text{Pd}-\text{H}$ и невыгодности диссоциации H_2 на атоме Pd .

Резюме

М.П.

(4) 

X. 1986, 19, N 18

PdH^+

1986

№ 8 Д153. Неэмпирический расчет PdH^+ и угловой структуры PdH_2 в двухэкспонентном базисе. Аннин Н. А., Бататурьянц А. А., Казанский В. Б. «Ж. физ. химии», 1986, 60, № 5, 1310—1311

Неэмпирически (в расширенном базисе) рассчитаны системы PdH^+ и PdH_2 ($\angle \text{HPdH} = 90^\circ$). Изучено электронное строение и прочность связи $\text{Pd}-\text{H}$. Найдено, что связь $\text{Pd}-\text{H}$ образуется при участии внешних $5s$, p -АО, Pd . Их вклад при увеличении положит. заряда на Pd падает, а связь — существенно ослабляется. Из сопоставления с литер. данными для PdH_2 сделан вывод, что расширение базиса и учет электронной корреляции не изменяют выводов о ковалентном характере связи $\text{Pd}-\text{H}$ и невыгодности диссоциации H_2 на атоме Pd . Резюме

М.П.

ср. 1986, 18, № 8

(7) ☒

● PdH_2 (структ.)

PdH_2

1986

Алексеев М. А.,
Багатурьянц А. А. и др.

струк-
тура

ЖЕ. Криз. желены,
1986, 60, N5, 1310-1311.

(сер.  PdH^+ ; III)

PdH_2

1986

Anikin N. A.,
Bagatur'yants A. A.,
et al.

meop.
paerem

Zh. Fiz. Khim. 1986,
60(5), ● 1310-11.

(see. PdH^+ ; III)

Pd H

1986

Elkind J. I.,
Armentrout P. B.

Do;

Inorg. Chem., 1986, 25,
N8, 1078-1080.

(car.  ScH⁺; III)

PdH_2

ОМ. 24 297) 1986

23 Б1046. Об устойчивости молекулы PdH_2 . On the stability of the PdH_2 molecule. Jargue C., Novargo O., Ruiz M. E., Garcia-Prieto J. «J. Amer. Chem. Soc.», 1986, 108, № 12, 3507—3509 (англ.)

Потенциальные кривые взаимодействия молек. водорода с атомом Pd рассчитаны в валентном приближении методом конфигурац. взаимодействия (КВ). Расчет выполнен с использованием основного псевдопотенциала Pd в двухэкспонентном базисе валентных АО с добавлением поляризац. ф-ций на атомах H. Волновая ф-ция из 15 детерминантов, полученная методом КВ, использована в качестве исходной в теории возмущений 2-го порядка, в рамках к-рой учтено $\sim 10^5$ конфигураций. Наиболее устойчивыми найдены структуры PdH_2 (I) с водородом в молек. форме: симм. структура с T-образной координацией H_2 и межъядерными расстояниями $R(\text{Pd}-\text{H})=3,46$ и $R(\text{H}-\text{H})=1,50$ ат. ед. и линей-

(м.п.)

X. 1986, 19, N 23

ная структура $\text{Pd}\cdots\text{H}-\text{H}$ с расстояниями $R(\text{Pd}-\text{H}) = 3,39$ и $R(\text{H}-\text{H}) = 1,40$ ат. ед. В обоих случаях энергия связи $\text{Pd}-\text{H}_2$ составляет ~ 10 ккал/моль. Линейной дигидридной структуре I соответствует локальный минимум, лежащий на 26,4 ккал/моль выше диссоциационного предела и отделенный от абс. минимума барьером в 40 ккал/моль. Результаты расчетов согласуются с эксперим. данными о стабильности комплекса I в инертной матрице и о наличии двух форм этого комплекса.

О. В. Гриценко

PdH_2 ^{DM. 23395} Novaro O., Garcia- 1986
Prieto J. et al.

расчёт
потенс.
кривых

J. Mol. Struct.
Theochem., 1986, 135,
79-91.

(сер. LiH_2 ; III)

PdH

(DM-26543)

1986

Rohlfing C.M., May P.J.,
Martin R.,

J. Chem. Phys., 1986,
85, N3, 1447-1455.

Электрон.
состоян.,
теорет.
расчет,
и.р.

(см. NiH; III)

PdH(2)

[OM. 25 129]

1986

Tolbert M.A., Beauchamp J.L.,

J. Phys. Chem., 1986,

90, N 21, 5015-5022.

Do

PdH

от 28256

1987

4 Д124. Релятивистские расчеты электронных состояний PdH. Relativistic calculations of electronic states of PdH. Balasubramanian K., Feng P. Y., Liao M. Z. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 7, 3981—3985 (англ.)

Проведены расчеты методом ПАП ССП/КВ 1-го порядка, сопровождаемые расчетами релятив. КВ для состояний $^2\Sigma^+$, $^2\Pi$, $^2\Delta$ и $^2\Sigma^+$ (II) $\lambda-s$, а также состояний $1/2$, $3/2$, $1/2$ (II), $3/2$ (II) и $5/2$ $\omega-\omega$ молекулы PdH. Найдено, что основным состоянием является $^2\Sigma_{1/2}^+$. Показано, что спин-орбитальное расщепление и смешивание для возбужденных состояний $^2\Pi$ и $^2\Delta$ велики. Смешанными являются два $3/2$ -состояния ($3/2$ (I): 66% $^2\Delta_{3/2}$, 29% $^2\Pi_{3/2}$). Рассчитаны спектроскопич. параметры R_e , T_e , D_e указанных состояний. Проведенный анализ заселенностей по Малликену для низколежащих состояний PdH показал, что состояние $^2\Sigma^+$ является ионным,

М.П.

ф. 1988, 18, № 4

а возбужденные состояния $^2\Pi$ и $^2\Delta$ несколько более
ионные с той же полярностью, что и основное состоя-
ние. В состоянии $3/2$ найдены квазипересечения.

PdH

от. 28 256

1987

8 Б1020. Релятивистские расчеты электронных состояний PdH. Relativistic calculations of electronic states of PdH. Balasubramanian K., Feng P. Y., Liao M. Z. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 7, 3981—3985 (англ.)

Многоконфигурационным методом ССП в полном активном пространстве с послед. учетом конфигурац. взаимодействия (КВ) первого порядка в приближении релятивистского эффективного основного Пт рассчитаны потенциальные кривые, спектроскопич. постоянные и распределение заряда для молекулы PdH в состояниях $^2\Sigma^+$, $^2\Pi$, $^2\Delta$ и $^2\Sigma^+$ (II) (в схеме λ -s-связи), либо в состояниях $1/2, 3/2$, $1/2(II)$, $3/2(II)$ и $5/2$ (в схеме ω - ω -связи), когда были учтены эффекты спин-орбитального взаимодействия (СОВ) в приближении КВ. Основным состоянием PdH является $^2\Sigma^+_{1/2}$. Расщепление энергий

М.П.

X. 1988, 19, № 8

и смешивание возбужденных состояний $^2\Pi$ и $^2\Delta$, обусловленные СОВ, оказались весьма значит. Для состояния $3/2$ (I) вблизи равновесного расстояния ($R = 3,0$ ат. ед.) смешивание состояний при учете СОВ составило: 66% $^2\Delta_{3/2}$ и 29% $^2\Pi_{3/2}$. Рассчитанная энергия диссоциации PdH в основном состоянии равна $2,6 \pm 0,2$ эВ. Для состояний $3/2$ обнаружено квазипересечение при межъядерном расстоянии $\sim 3,25$ ат. ед.

И. А. Тополь

PdH

Om. 28256 1987

107: 223516b Relativistic calculations of electronic states of palladium hydride (PdH). Balasubramanian, K.; Feng, P. Y.; Liao, M. Z. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(7), 3981-5 (Eng). MC-SCF(CAS=SCF)/1st-order FOCI calcns. followed by relativistic CI calcns. were carried out on $2\Sigma^+$, 2Π , 2Δ , and $2\Sigma^+$ (II) λ -s states and $1/2$, $3/2$, $1/2$ (II), $3/2$ (II), and $5/2$ ω - ω states of PdH. The ground state is $2\Sigma_{1/2}^+$. The spin-orbit splitting and contamination of the excited states (2Π and 2Δ) are quite large. The two $3/2$ states are quite mixed [$3/2$ (I):66% $2\Delta_{3/2}$, 29% $2\Pi_{3/2}$] in character. The spectroscopic properties (R_e , T_e , D_e , and ω_e) of all the above states are calcd. and compared with available exptl. results on the ground state of PdD. The Mulliken population anal. of the low-lying states of PdH shows that the $2\Sigma^+$ state is ionic (Pd^+H^-) but the excited 2Π and 2Δ states are a bit more ionic with the same polarity as the ground state. The $3/2$ state exhibits an interesting avoided crossing.

неоп. пацен
м. космоет.

C.A. 1987, 107, N 24

PdH

(om. 26594)

1987

Langhoff S. R., Rettersson
L. G. M., et al.,

J. Chem. Phys., 1987,
86, N1, 268-278.

М.Н.Мух-
них электр.
состояний,
теорет.
расчет.

1987
PdH Langhoff Stephen R.,
Pettersson Lars G. et al.

et al. J. Chem. Phys., 1987,
86, N1, 268-278.

(ccr. ● YH; III)

PdH⁺

[DM. 27787]

1987

Schilling J. B., Goddard

W. A. III, et al.,

meopem.
pocrem.

J. Amer. Chem. Soc.,

1987, 109, N19, 5565-73.



PM

(DM. 26754)

1987

Switendick A.C.,

Электрон.
структура,
теорет.
расчет

J. Less-Common Metals,
1987, 130, 249-259.

PdH₂

[om. 26754]

1987

Switendick A.C.,

металл.
справка,
металл-
расчет

J. Less - Common Metals,
1987, 130, 249-259

PdH_2

DM 29933

1988

11 Д68. Электронные состояния и поверхности потенциальной энергии PdH_2 . Сопоставление с PtH_2 . Electronic states and potential energy surfaces of PdH_2 . Comparison with PtH_2 . Balasubramanian K., Feng P. Y., Liao M. Z. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 11, 6955—6961 (англ.)

Метод полного активного пространства МК ССП (ПАП ССП) и НИК КВ с учетом одно- и двукратных возбуждений использован для расчета 13 электронных состояний PdH_2 и 9 электронных состояний PdH^+ . Получены поверхности потенц. энергии электронных состояний 1A_1 и 3A_1 . Показано, что поверхность 1A_1 содержит 2 изогнутых минимума и один более высокий линейный минимум. Поверхность 3A_1 относительно плоская в области седловой точки. Путем релятив. КВ-расчетов PdH^+ установлены спин-орбитальные эффекты для электронных состояний PdH_2 . Найдено, что основным состоянием PdH_2 является слабо связанное

М.П.

Ф. 1988, 18, N 11

изогнутое состояние 1A_1 с $\theta_e = 30^\circ$ и $r_e(\text{Pd}-\text{H}) = 1,67 \text{ \AA}$. Результаты сопоставлены с данными для PtH_2 и установлено, что связь $\text{Pt}-\text{H}$ сильнее, чем связь $\text{Pd}-\text{H}$, в основном из-за релятив. эффектов, причем последняя является более ионной. Н. В. В.



PdH_2

DM 29933

1988

теорет.
расчет
структуры
и энергии
бонд. состоян.

⊗ (42)

C.A. 1988, 109, N 12.

PtH_2 , PdH^+

109: 99056b Electronic states and potential energy surfaces of palladium hydride (PdH_2): comparison with platinum hydride (PtH_2). Balasubramanian, K.; Feng, P. Y.; Liao, M. Z. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(11), 6955-61 (Eng). Complete active space MCSCF (CASSCF) followed by multireference singles and doubles CI (MRSDCI) calcs. are carried out on 13 electronic states of PdH_2 and 9 electronic states of PdH^+ . The bending potential energy surfaces of 1A_1 and 3A_1 electronic states were obtained. The 1A_1 surface contains two bent min. ($\theta_e = 30^\circ$ and $\theta_e = 62^\circ$) and a higher linear min. sep'd. by a saddle point. The 3A_1 surface is relatively flat in the region of the saddle point. The $Pd(^1S_0)$ atom forms a weak complex with H_2 but inserts spontaneously into H_2 while the $Pd(^3D_5)$ atom has to surmount a large barrier for insertion into H_2 . The spin-orbit effects for the electronic states of PdH_2 are estd. through relativistic CI calcs. of PdH^+ whose d Mulliken population is close to that of the d population of PdH_2 . The ground state of PdH_2 is found to be a weakly bound bent 1A_1 state with $\theta_e = 30^\circ$ and $r_e(Pd-H) = 1.67 \text{ \AA}$. The electronic state and potential energy surfaces of PdH_2 are compared with PtH_2 . The Pt-H bond is stronger than the Pd-H bond mainly due to relativistic effects. The Pd-H bonds are more ionic than the Pt-H bonds.

PdH^+

(Im. 29933) 1988

Balasubramanian K.,

Feng P. Y., et al.

теорет.
расчет
сферич.
и энергет.
возд. осей.

J. Chem. Phys. 1988,
88 (11), 6955-61.

●
(сер. PdH_2 ; III)

RhH₂OMM 30864
30606

1988

109: 197471c Electronic states and potential energy surfaces of rhodium dihydride. Balasubramanian, K.; Liao, Dai Wei (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(22), 6259-64 (Eng). Complete active space MCSCF (CASSCF) followed by multireference singles + doubles CI (MRSDCI) and relativistic CI calcs. are carried out on 10 electronic states of RhH₂. In addn., the bending potential energy surfaces of 6 electronic states and the electronic properties of 12 excited linear states of RhH₂ are obtained with the CASSCF method. These calcs. reveal that the Rh(2F) atom inserts spontaneously into H₂ to form RhH_2 in a $2A_1$ bent state while the Rh(4F) ground state has to surmount a large barrier for the insertion into H₂. The ground state of RhH_2 is a $2A_1$ electronic state with $r_{\text{Rh-H}} = 1.61$ Å and $\angle \text{H-Rh-H} = 100^\circ$. The low-lying excited states are the low-lying excited states, which are quadratic wave linear an. with seps. larger than 1.6 eV. Among linear states the $4A_1$ state is the lowest.

можем
расчет
структур
и стабильности

C.A. 1988, 109, N 22

PdH

(DM 33964)

1990

Anderson W. P.,
Cendari T. R. et al.
womp.
paciū. Inorg. Chem. 1990,
29, ● N1, 1-3.

of 1990, 3.



PdH

[om. 35966]

1990

Balasubramanian K.,

et al. J. Chem. Phys. 1990, 93,
NH, 8061-8072.

The low-lying states of the second-
row transition ● metal hydrides

(YM-CdM).

PdH
PdH₂⁺

Om 34128

1990

Knight L.B., Jr., Cobran-
chi S.T., et al.,

J. Chem. Phys. 1990, 92(5),
2721-2732.

Laser vaporization / rare gas
matrix-isolation electron

PdH_2^+

(OM 34128)

1990

Knight L.B., Jr., Cobranchi
S.T. et al.

J. Chem. Phys. 1990, 92 (5),
2721 - 2732.

Laser vaporization / rare gas
matrix-isolation electron.

PdH

1991

23 Б1069. Теоретическое изучение хемосорбции и димерных модельных систем. Расчеты методами Мёллера — Плессета и конфигурационного взаимодействия PdH, PdC, PdO, PdF, Pd₂ и PdCO. Theoretical studies of chemisorption and dimer model systems: Moller — Plesset and configuration interaction calculations on PdH, PdC, PdO, PdF, Pd₂, and PdCO / P. Schwerdtfeger, J. S. McFeaters, J. J. Moore, D. M. McPherson, R. P. Cooney, G. A. Bowmaker, M. Dolg, D. Andrae // Langmuir. — 1991. — 7, № 1. — С. 116—125. — Англ.

С помощью теории возмущений Мёллера — Плессета 3-го порядка и методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом однократных и двухкратных возбуждений рассчитаны основные электронные состояния молекул PdH, PdC, PdO, PdF, Pd₂ и PdCO, а также низколежащие возбужденные состояния PdC, PdO и Pd₂. Использованы нерелятивистский и усредненный релятивистский эффективные основные ПТ для валентной оболочки 3s3p3d4s атома Pd. Основным для PdC (КВ)

расчет
основных
электрон.
состояний.



(45)

х. 1991, № 23

найденно состояние $^2\Pi$, энергия к-рого оказалась на 0,26 эВ ниже энергии состояния $^3\Sigma^-$, ранее считавшегося основным, и на 0,51 эВ ниже энергии состояния $^1\Sigma^+$. Предсказано, что молекула PdC д. б. стабильной в газ. фазе. На основе расчетов молекулы PdCO проанализирована хемосорбция CO на Pd. Обсужден сдвиг колебат. частоты CO при хемосорбции. Библ. 77.

А. А. Сафонов

Pd_2H

1992

→ 1 Д64. Поверхности потенциальной энергии для взаимодействий Pd_2+H и Ni_2+H . Potential energy surfaces for Pd_2+H and Ni_2+H interactions / Balasubramanian K., Feng P. Y. // J. Chem. Phys. — 1992. — 96, № 4. — С. 2881—2888. — Англ.

Методом полного активного пространства многоконфигурац. ССП в сочетании с методом НИК-КВ, включающим одно- и двукратно возбужденные конфигурации, проведены расчеты взаимодействий Pd_2+H и Ni_2+H . В рамках релятив. метода конфигурац. взаимодействия включались спин-орбитальные эффекты. Найдено, что Pd_2H и Ni_2H образуют мостиковые равновесные структуры. В обеих системах обнаружены три почти вырожденных электронных состояния. Обсуждена природа мостиковых связей металл—водород—металл. Для Pd_2H обнаружено существенное влияние спин-орбитальных эффектов на вырождение низколежащих состояний.

М.А.

Ср. 1993, N 1

Pt₃H

1992

Dai D., Salasubramanian K.

микромаяз-
спектр
состояние

J. Phys. Chem. 1992, 96(8),
3279-82.

(cell. Pt₃H, ● III)

PdH

1992

Elbaesser C., Ho K.M.,
et al.

meop.
pacrēm

J. Phys.: Condens. Mat-
ter 1992, 4 (22), 5207-
5226.

( ver. NBH; iii)

PdH_x

1992

$PdD_{0,4}$

5 E508. Субмикроскопическая структура PdH_x и $PdD_{0,4}$
/ Гинопдман В. Б., Жерихина Л. Н., Кузнецов С. П.,
Мешков И. В., Перекрестенко А. Д., Шелагин А. В. //
Кратк. сообщ. по физ. .— 1992 , № 7—8 .— С. 35—39
.— Рус.

При температурах 300 и 80К с помощью очень холодных нейтронов ($2,5 < v < 90$ м/с) изучена субмикроскопич. структура PdH_x ($x=0—0,71$) и $PdD_{0,6}$, возникающая в объеме образца после электролитич. насыщения водородом и дейтерием чистой (99,99%) холоднокатанной фольги Pd толщиной 73,9 мкм. В образцах обнаружены кластеры, представляющие собой вкращения α - и β -фаз в матрице PdH_x и $PdD_{0,6}$. Показано, что субмикроструктура лучше всего описывается моделью рассеивателей.

(H)

ф. 1993, №5

Pd H.

1994

Jenderek J.,
Marian Ch. M.

meop.
pacrēm
M

Theor. Chim. Acta 1994,
88 (1), 13-27.

(see  Cu H; III)

PdH

Om 37655.

1994

7A- CNEAMP

121: 21355b Frequency-modulation enhanced magnetic rotation spectroscopy of PdH, PdD, NiH, and CuH. McCarthy, Michael C.; Field, Robert W. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(9), 6347-58 (Eng). The technique of frequency-modulation enhanced magnetic rotation spectroscopy (FM-MRS) is applied here to the study of the electronic spectra of gas-phase transition metal hydrides and deuterides. Exptl. FM-MR results for several bands of PdH, PdD, NiH, and CuH are presented. In the case of PdH, an $\Omega = 0.5$ -X $\Omega = 0.5$ band at 4371 Å has been obsd. and assigned. Prior to this work, although several bands of PdD had been reported previously, no electronic transitions of PdH had been assigned. All of the PdH, PdD, and NiH bands studied in the 4200-4600 Å wavelength region are strongly predissociated, and in the case of PdH and PdD, strongly and multiply perturbed as well.

(2) 

C.A. 1994, 121, N 2



PdD, NiH

PdH_2

1994

Siegbahn Per E.M.

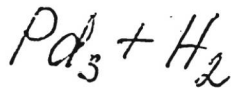
свойствен.
и структуры,
теор. расчет

Theor. Chim. Acta

1994, 87 (6),

441-52.

● (cell. YH_2 ; III)



1995

Dai Dingqun, Liao D.W.,
et al.

J. Chem. Phys. 1995,
102(19), 7530-9.

( $\text{Pt}_3 + \text{H}_2$; III)

потенс.
поверхн.
сферич.
двухочащ.
тридц.
мюр.
расчёт

PdO

1997

McCarthy, M.C.; Kanamori, H.,
et al.,

Chem. Phys. 1997, 107(11),
4179-4188.

(see. NiH● ; III)

Pd_4H_4

1997

Srinivas, Fantasia Naja,
et al.,

моном.
расчет
смп-рз
и сша-
бульн.

J. Am. Chem. Soc. 1997,
119(52), 12968-973

(cell. C_4H_4 ; III)

PdH

1998

PdD

J. Chem. Phys., 1998,
108, 9(10?), 3517 - 3521

Pd(H₂)

2000

check
of no. Ar

134: 63309p Observed and Calculated Infrared Spectrum of Pd-(H₂) in Solid Argon: A Ligand-Free Side-Bonded Molecular Hydrogen Complex. Andrews, Lester; Manceron, Laurent; Alikhani, Mohammad Esmail; Wang, Xuefeng (LADIR/Spectrochimie Moléculaire UMR 7075, Université Pierre et Marie Curie, 75252 Paris, Fr.). *J. Am. Chem. Soc.* 2000, 122(44), 11011-11012 (Eng), American Chemical Society. The reactions of laser-ablated and thermal Pd atoms with H₂ in Ar matrix are reported. The complete IR spectrum of Pd(H₂) in solid Ar, which is in agreement with the d. functional theory calcd. vibrational spectrum. The novel bis- and tris-H₂ complexes, the related Pd-Pd-(H₂) complex, and the stable (PdH)₂ reaction product contg. dissociated H₂ were identified.

134: 63309p

C.A. 2001, 134, N5.

on. 41046

2007

F: Pd(H₂)

P: 3

134:358868 **Observed and Calculated Infrared Spectra of Pd(H₂)_{1,2,3} Complexes and Palladium Hydrides in Solid Argon and Neon.** Andrews, Lester; Wang, Xuefeng; Alikhani, Mohammad Esmail; Manceron, Laurent. Chemistry Department, University of Virginia, Charlottesville, VA, USA. J. Phys. Chem. A (2001), 105(13), 3052-3063. in English.

Thermally evapd. and laser-ablated Pd atoms interact with H₂ in excess Ar to form the side-bonded Pd(H₂) complex, which is characterized by 2971, 1507, and 950 cm⁻¹ fundamental frequencies.



These IR absorptions are assigned to Pd(H₂) from the HD and D₂ shifts and DFT frequency calcns. Higher H₂ concns. favor the Pd(H₂)_{2,3} complexes, which exhibit 3038, 778 cm⁻¹ and 2909, 730, 319 cm⁻¹ fundamentals, resp. These complexes involve electrostatic bonding owing to a small amt. of charge reorganization. Higher Pd concns. enhance absorptions due to a Pd--Pd(H₂) complex and the stable (PdH)₂ mol. with no H-H bond. This work shows that 1 neutral Pd atom cannot insert into a H₂ mol. but that 2 Pd atoms dissoc. mol. H with no activation energy. Laser ablation produces energetic Pd atoms which also form PdH, electrons which are captured to give PdH₂⁻, and radiation which ionizes H and yields AmH⁺ in the matrix cage. Diat. PdH also forms complexes with dihydrogen.