

Pd O_x
Pd-O

PdO_x Norman J. H., Staley H. G., 1964
(A.P.) Bell W. E.

17-0012-VI, J. Phys. Chem., 68 (3), 662-3.

Mass spectrometric study of
gaseous oxides of Rh and Pd.

(con. RhO_x)

PdO

Wayne E.B.,
'Myard R.E.,
Tagami M.

1966

J. Phys. Chem., 70, 11, 3735

Do

Deccoyuayue PdO

(Cu. PdO) ~~II~~ I

PdO

1969

Spous.
Karel.
nocturn.

Leo Brewer, Gerd Rosenblatt.
"Adv. in High Temp. Chem. 2
1969, 2, 1-83.

DO, 1298

continued 1862

$\text{Pd}(\text{O}_2)$

Huber H;
et al.

1973

$(\text{O}_2)\text{Pd}(\text{O}_2)$

комплекс
в матрицах

"Can. J. Chem"

1973, 51, (16), 2722-36

спектры

D_i

(ан. Ni-O; III)

O-Pd

omu. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do) Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75.

$\text{Pd}(\text{O}_2)_2$

1974

Hanlan L. A. J;
et al.

y. gr.
cucurp
b. catpuse

Inorg. chem., 1974,
16 (11), 2848-57.

(see. Rh_2 ; III)

PdO_2 (neorg.)

1978

(vi)

88:202260n Preparation of palladium dioxide at high pressure. Shaplygin, I. S.; Aparnikov, G. I.; Lazarev, V. B. (Inst. Obshch. Neorg. Khim. im. Kurnakova, Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1978, 23(4), 884-7 (Russ). Polycryst. PdO_2 with a rutile structure having a 4.483 and c 3.101 Å was obtained by heating a PdO-KClO_3 mixt. at $950 \pm 20^\circ$ and 65 kbar. PdO_2 is unstable and begins to decomp. in air at $65-70^\circ$ or during mech. treatment. In the IR spectra of PdO_2 has absorption bands with max. at 715 and 640 cm^{-1} ($\nu(\text{Pd-O})$) and 310 and 230 cm^{-1} ($\delta(\text{O-Pd-O})$). PdO_2 has a sp. elec. resistance of $6.2 \times 10^{-2} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ at 295 K and is semiconducting.

(+1)

C.A. 1978, 88, 126

PdO
(reper)

[Commu 2982] 1979

Holl y., et al.

Description.
Empy.

Solid State Commu.

Phys. Rev. 1979, 32, 1189-92

Electronic Structure of PdO.

PdO_2

1981

Müller A., et al.

Matrix Isol. Spectrosc

UKexup, Yect. and Discuss NATO
KPexup. Adv. Study Inst., Montpel.
lier, July 17-31, 1980. Dor.
drecht e.a., 1981, 485-494.

(ex. TiCl_4 ; III)

Pd_3O

1984

Bellezza O., Cattania
M.G., et al.

м.п.,
воинтер.,
сверхшт.

Chem. Phys. Lett.,
1984, 108, N 5, 425-
- 429.

(св. ● PdO ; III)

Pd_4O_2

1984

Bellezza O., Cattania
M. G., et al.

д. н.,
зооинж.,
сержант.

Chem. Phys. Lett.,
1984, 108, N5, 425-
-429.

(ср. PdO ; III)

Pd_2O

1984

Bellezza O., Cattania

M. G., et al.

Chem. Phys. Lett.,

1984, 108, NS, 425-

429.

● (cer. PdO ; III)

сер.,
носер.,
св.рукт.

PdO

1984

12 Д159. Исследование хемосорбции методом ССП МО в приближении псевдопотенциала. Система Pd (111)/кислород. SCF MO pseudopotential studies of chemisorption. The Pd(111)/oxygen system. Bellezza O., Cattania M. G., Gavezzotti A., Simonetta M. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 5, 425—429 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в валентно-расщепленном базисе слэтеровских ф-ций, а также в приближении псевдопотенциала в 1- и 2-экспоненц. базисах исследовано электронное строение кластеров PdO, Pd₂O, Pd₃O, Pd₄O и Pd₄O₂. Для всех кластеров предполагается, что атомы Pd лежат в одной плоскости в плотнейшей упаковке, а атом кислорода расположен над центром кластера. В кластере Pd₄O₂ атомы кислорода располагаются над атомами Pd, лежащими на диагонали квадрата. Приведены потенц. кривые

М. А., химстр,
структура

□ (74)

ф. 1984, 18, N 12

растяжения связи PdO , заселенности перекрывания связей Pd-Pd и Pd-O , заряды на атомах кислорода, равновесные длины связей Pd-O , энергии связывания и частоты вал. кол. Для кластера Pd_3O рассчитана потенц. кривая диффузии атома кислорода вдоль поверхности $\text{Pd}(111)$. Подробно обсуждено влияние изменения базиса на результаты расчетов. В. А. К.



PdO_4^- | Om. 19355 | 1984

Gutsev G. L., Boldyrev
A. I.,

Электрон.
спектры,
теорет.
расчет

Chem. Phys. Lett.,
1984, 108, N3, 255-
● - 258.

PdO

(DM. 31131)

1985

Baeschlicher Ch. W., Jr.,

Nelin C. F., et al.,

J. Chem. Phys. 1985, 82, N7,
3265-76.

Transition metal oxides:

CrO, MoO, • NiO, PdO, AgO.

Оксиды Pd

1985

11 Б1177. ИК-спектры поглощения простых оксидов платиновых металлов. Гончаренко Г. И., Лазарев В. Б., Шаплыгин И. С. «Ж. неорганич. химии», 1985, 30, № 12, 3032—3037

Изучены спектры поглощения в ИК-обл. простых оксидов Pd, Rh и Pt и рассмотрено соответствие экспериментальных результатов с кол-вом частот, предсказываемым на основе теоретико-группового анализа. Обсуждено влияние искажения структуры оксида на характер его ИК-спектра. Резюме

ИК-спектры
поглощения

(+2) ☒

X. 1986, 19, N 11



Оксиды Rh
— — Pt

PdDy-

(om. 20924)

1985.

PdDy

Тыцев Т. Л., Болдырев А. У.,

Рисун
геоцентр,
структур,
Ае

журн. структур. Хелер,
1985, 26, n1, 22-26.

PdD

(DM 33 964)

1990

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

X. 1990, N 5.

PdO

расчет
основных
электрох.
состоян.

1991
P. Schwerdtfeger,
J. S. McFeaters, et al.

Langmuir. 1991, 7,
No. 2. 116-125.

(ср. ● PdH; III)

Dikerebe Pd

1992

Fink Lothar,

Troemel M.

сб. 36 и 4 De Z. Kristallogr. 1992,
200 (3-4), 169-75.

(сер. Дикеребе Ру, III)

PdO (K)

1994

120: 227424m Electronic structure of noble-metal monoxides: PdO, PtO, and AgO. Park, Key-Taeck; Novikov, D. L.; Gubanov, V. A.; Freeman, A. J. (Dep. Phys., Northwestern Univ., Evanston, IL 60208 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1994, 49(7), 4425-31 (Eng). The electronic structures and properties of the noble metal monoxides, PdO, PtO, and AgO were calc. by using the full-potential-linearized-APW (FLAPW) and full-potential-linear-orbital (FLMTO) methods. The calc. band structures showed PdO and PtO to be poor metals with very low densities of

(meop. pacien)
K7127.



(+2)

PtO, AgO



C.A. 1994, 120, n 18

states at the Fermi level (E_F). Thus as with the 3d oxides, both methods used within the scope of the local-d. approxn. failed to produce the band gaps obsd. exptl. for PdO and PtO ; they did, however, show that these band gaps are of the type that occur from crystal-field effects rather than being of the Mott-Hubbard or charge-transfer type. For AgO , the monoclinic crystal-field splitting of the d-states is strong enough to induce a small direct band gap, which partially separates the electronic states of two nonequivalent silver atoms and results in Ag^{1+} and Ag^{2+} configurations rather than Ag^{1+} and Ag^{3+} . Thus, correlation effects appear to be important for the detailed description of electronic states near E_F not only for 3d metal monoxides, but for noble metal oxides having much-less-localized metallic d-states. Finally, the excellent agreement between the FLAPW and FLMTO results showed the possible advantage of using the much-less-time-consuming FLMTO method in quant. band-structure calcs. of complex crystals.

PdO

1994

7 Б1033. Электронная структура монооксидов благородных металлов PdO, PtO и AgO. Electronic structure of noble-metal monoxides: PdO, PtO, and AgO /Park Key-Taeck, Novikov D. L., Gubanov V. A., Freeman A. J. //Phys. Rev. B. —1994 .—49 ,№ 7 .—С. 4425—4431 .—Англ.

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП X_0 -РВ исследованы электронная структура и св-ва монооксидов благородных металлов: PdO, PtO и AgO. Результаты расчета зонной структуры свидетельствуют о том, что PdO и PtO проявляют слабые металлич. св-ва с очень низкой плотностью состояний на уровне Ферми. Показано, что использование методов, учитывающих только локальный потенциал, не приводит к значениям ширины запрещенной зоны PdO и PtO, близким с эксперим. В случае AgO расщепление d-состояний в кристаллич. поле значительно и присутствуют две неэквивалентные конфигурации Ag^{1+} и Ag^{2+} . Показано, что для детального описания электронной структуры монооксидов исследованных металлов важен учет эффектов электронной корреляции. Е. А. Рыкова

М.А.



X.1995, № 7

1995

F: PdO

P: 3

1B155. Влияние релятивистских эффектов на электронное строение монооксидов и монокарбониллов Ni, Pd и Pt. Расчеты методом функционала плотности в локальном приближении и с градиентными поправками. Relativistic effects in the electronic structure of the monoxides and monocarbonyls of Ni, Pd, and Pt: Local and gradient-corrected density functional calculations / Chung Sai-Cheong, Kruger Sven, Pacchioni Gianfranco, Rosch Notker // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 9. - С. 3695-3702. - Англ.

Методом функционала плотности в локальном приближении и с градиентными поправками в расширенных базисах в релятивистском варианте метода исследовано электронное строение монооксидов и монокарбониллов Ni, Pd и Pt. Обнаружено, что для соединений Pt релятивистские эффекты оказывают существенное влияние, особенно на расстояния металл-лиганд. Длины связей металл-лиганд увеличиваются в ряду Ni < Pt < Pd. Градиентные поправки значительно уменьшают энергии связи, но оказывают намного меньшее влияние на геометрию и колебательные частоты. Библ. 73.

Р. Ж. Х. N1, 1996

PdO

1995

F: PdO

P: 3

05.Д.0146. Релятивистские эффекты и электронное строение монооксидов и монокарбонидов Ni, Pd и Pt: расчеты методом функционала плотности в локальном приближении и с градиентной поправкой. Relativistic effects in the electronic structure of the monoxides and monocarbonyls of Ni, Pd, and Pt: Local and gradient-corrected density functional calculations / Chung Sai-Cheong, Kruger Sven, Pacchioni Gianfranco,

Rosch Notker // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 9. - С. 3695-3702. Англ. Методом функционала плотности в скалярном релятив. варианте в локальном приближении и с учетом градиентной поправки в больших базисах исследовано электронное строение монооксидов и монокарбонидов Ni, Pd и Pt. Обнаружено, что релятив. эффекты играют важную роль для соединений Pt, особенно сильно влияя на длины связей. Расстояния Pt-O и Pt-CO короче, чем у соединений Pd, и длиннее, чем у соединений Ni. Градиентные поправки существенно уменьшают энергии связи, но менее важны для геометрии и колебательных частот.

X.1996, N 5

PdO

[Um 38390]

1996

37, 35- Ewa Broclawik, Ryo Yama
иши, Akiha Endou et al,
соц.

J. Chem. Phys., 1996, 104,

N 11, 4098...

On the electro●nic structure

of the palladium monoxide
and the methane adsorption,
Density functional calcula-
tions.

PdO

1997

127: 114761v The electronic structure of PdO found by photoemission (UPS and XPS) and inverse photoemission (BIS). Pillo, Th.; Zimmerman, R.; Steiner, P.; Hufner, S. (Institut fur Experimentalphysik, Universitat des Saarlandes, D-66041 Saarbrucken, Germany). *J. Phys.: Condens. Matter* 1997, 9(19), 3987-3999 (Eng), Institute of Physics Publishing. The electronic structure of the 4d transition-metal oxide PdO was studied by photoemission (UPS and XPS), inverse photoemission (BIS; $h\nu = 1486.6$ eV), and EELS in reflection geometry (REELS; primary energy, $50 \text{ eV} \leq E_0 \leq 1500 \text{ eV}$). The valence band spectra are compared to recent theor. ab initio band-structure calcn. Good agreement between theory and expt. is found in the occupied part of the band structure down to 8 eV below E_F as well as in the unoccupied part up to 6 eV above E_F . This confirms the common view that the electronic structure of the 4d transition-metal oxides, e.g. PdO, can be explained in terms of a single-electron picture. Nevertheless correlation effects among the Pd 4d electrons are clearly visible in the spectra, as e.g. satellites of the Pd core level spectra. To explain the origin of these satellites the authors performed simple cluster model calcns. and as a result the authors can explain one satellite in a screening picture by a charge transfer process. In addn. radiation damage effects in PdO during the electron bombardment in the BIS expts. are reported. This is explained by the formation of the Pd $4d^{10}$ -like states connected with O loss due to the electron bombardment.

М. СМП-РА,
СРЕКМП и
РАСЕМ

С.А. 1997, 127, N 8

PdO

(Om. 40 127)

1999

OPdO

Pd(O₂)

PdOO

William D. Bare, Angelo
Citra et al.,

J. Phys. Chem. A1999,

103, 5456-62.

Reactions of
Platinum and

Laser-Ablated
Palladium



Atoms with Dioxygen.
Matrix Infrared Spectra
and Density Functional
Calculations of Platinum
Oxides and Complexes and
Palladium Complexes



PdD-

(Om. 40068)

1999

Stephan A. Klopčič et al.,

помощи-
чекки

J. Chem. Phys., 1999,
110, N20, 10216..

PdO

[Om 40241]

2000

Hildenbrand D.L., Lau K.H.,

Chem. Phys. Lett., 2000,
319, N1-2, 95-98.

Do