

УДК 539.211

ВЫХОД ВОДОРОДА ИЗ НИКЕЛЯ И ПАЛЛАДИЯ, СТИМУЛИРОВАННЫЙ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

© 2018 г. Ю. И. Тюрин¹, И. П. Чернов¹, В. М. Силкин¹, В. С. Сыпченко^{1, *},
А. М. Хашхаш², Н. Н. Никитенков¹, Н. Д. Толмачева¹

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050 Томск, Россия

²Институт атомной энергии, национальный исследовательский центр,
11511–11668 Каир, Египет

*E-mail: sypchenko@tpu.ru

Поступила в редакцию 11.06.2017 г.

Приводятся новые экспериментальные данные о радиационно-стимулированной диффузии водорода в металлах, в частности в никеле и палладии, под действием ускоренных до 30 кэВ электронов. Определены скорости выхода водорода из никеля и палладия в случае термического и радиационного нагрева электронным пучком, обнаружен существенный сдвиг максимумов термического газовыделения при радиационном нагреве в низкотемпературную область. Показано, что наличие внутренней водородной атмосферы создает благоприятные условия для колебательно-поступательного обмена ($V-T$ -обмена), неравновесного перераспределения и выхода водорода из твердого тела при облучении. На качественном уровне объяснена ускоренная миграция водорода, стимулированная электронами с энергией ниже порога образования дефектов. Расчеты из первых принципов электронной структуры системы металл–водород показали, что плазмоны также являются эффективным механизмом распространения энергии излучения по всему кристаллу.

Ключевые слова: водород, никель, палладий, термо- и радиационно-стимулированный выход газов, расчеты из первых принципов, плазмоны.

DOI: 10.7868/S0207352818010055

ВВЕДЕНИЕ

Присутствие водорода в металлах является важной технологической и научной проблемой. Технологическая проблема связана с негативным влиянием водорода на механические свойства металлов. Водород инициирует различные типы дефектов, трещины, водородное охрупчивание. Кроме того, водород, являясь самым легким атомом и обладая высокой подвижностью в твердом теле, представляет самостоятельный интерес для исследования его поведения при воздействии радиации. Радиационно-стимулированная миграция, диффузия водорода в металлах и сплавах изучаются уже многие годы в связи с проблемой водородного охрупчивания конструкционных материалов ядерных и термоядерных реакторов [1–4].

Исследования показали, что при внешнем воздействии имеет место увеличение скорости диффузии и проницаемости водорода в металлах. Ускоренная диффузия водорода в объеме металлов, стимулированная излучением, связывается с дефектами, которые образуются в процессе

воздействия излучения, или с дефектами, уже имеющимися в металлах. Однако особенности атомной и электронной структуры систем металл–водород не учитывались. Следующим важным шагом в понимании механизма радиационно-ускоренной миграции водорода является изучение поведения водорода в “бездефектных” металлах в процессе воздействия ионизирующего излучения с энергией ниже порога образования дефектов. В этом случае энергия излучения полностью тратится на возбуждение электронной подсистемы атомов кристалла. В чистых металлах передача энергии электронных возбуждений ядерной подсистеме наименее вероятна. Отсутствие запрещенной зоны и наличие большого числа свободных электронов приводит к тому, что любое индуцированное излучением неравновесное распределение заряда в металлах быстро экранируется ввиду высокой эффективности оже-распада, время жизни электронного возбуждения значительно сокращается (10^{-14} – 10^{-16} с). Если ускоренная миграция водорода в вышеуказанных условиях имеет место, то это

связано с особенностями атомной и электронной структуры системы металл–водород, с особыми, ранее неизвестными свойствами водорода в металлах. С этой целью было исследовано поведение водорода в палладии, нержавеющей стали, ниобии при воздействии электронов, рентгеновских лучей с энергией ниже порога образования дефектов.

Имеющиеся экспериментальные результаты [5–8] говорят о том, что изотопы водорода, занимающие регулярные положения в металле, образуют собственную водородную подсистему. Энергия, вносимая в процессе радиационного воздействия, аккумулируется водородной подсистемой. В результате атомы изотопов водорода приобретают колебательную энергию, большую, чем атомы матрицы металла, на время, превосходящее время максвелловской релаксации.

Целью настоящей работы являлось получение новых экспериментальных данных о радиационно-стимулированной диффузии водорода в металлах, в частности в никеле и палладии, под действием электронов с низкой энергией и об особенностях возбуждения коллективных состояний в системах металл–водород.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И РЕЗУЛЬТАТЫ

Изучение миграции, диффузии и выхода изотопов водорода из металлов под действием ускоренных электронов осуществлялось методом масс-спектрометрии *in situ* на высоковакуумной ($P < 10^{-5}$ Па) установке с безмасляной откачкой [9, 10].

Для стимуляции выхода изотопов водорода применялся электронный пучок с энергией 35 кэВ, плотность тока пучка составляла 75 мкА/см². Металлы водородом насыщались электролитически в 0.1 М растворе H₂SO₄ при токах 0.02–0.04 А/см² в течение 20–48 ч. Исследуемые образцы в вакуумной ячейке размещали на изолирующей керамической подложке. Температуру образцов измеряли термопарой на лицевой и тыльной сторонах.

На рис. 1, 2 представлены скорости выхода водорода из никеля и палладия в случае термического линейного нагрева со скоростью 1 град/с (кривые 1) и радиационного нагрева электронным пучком (кривые 2) со скоростью 10 град/с. Увеличение скорости нагрева способствует сдвигу максимума на кривых газовой выделения в высокотемпературную область.

Энергия активации выхода водорода при линейном нагреве образца может быть определена по формуле Редхеда [11]:

$$E_d = kT_{\max} \left(\ln \frac{v_1 T_{\max}}{\beta} - 3.64 \right),$$

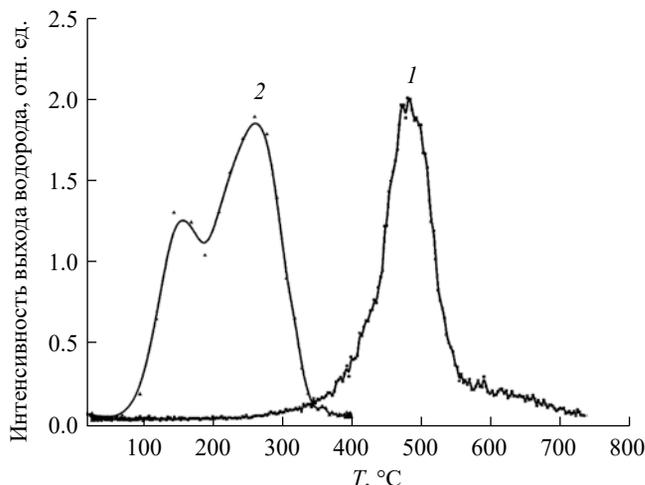


Рис. 1. Термостимулированный (ТГСВ) (1) и радиационно-стимулированный (РСГВ) (2) выход водорода из никеля. Сдвиг РСГВ по сравнению с ТГСВ $\Delta T_{Ni} = 350-250$ °С.

где $\beta = \frac{dT}{dt}$ – скорость нагрева, $v_1 \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ – частотный фактор десорбции.

В таблице приведены результаты расчета выхода энергии активации десорбции водорода при линейном термическом нагреве со скоростью ~ 1 град/с и линейном нагреве образца электронным пучком со скоростью ~ 10 град/с. Полученные результаты показывают, что при нагреве образца электронным пучком десорбция водорода происходит с эффективной энергией активации в 1.5–2 раза меньшей, чем при термическом нагреве.

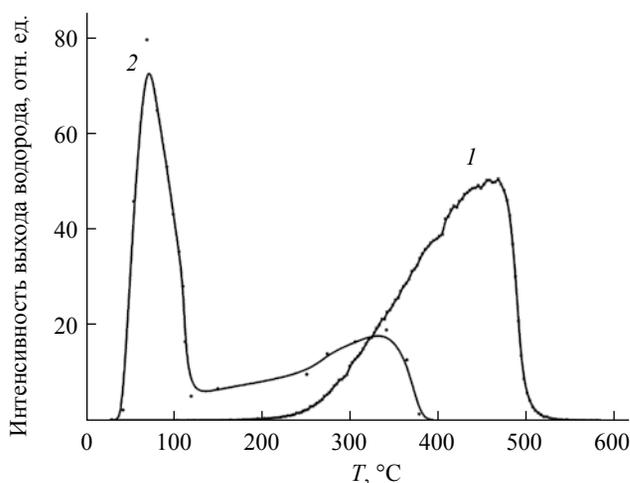


Рис. 2. Термостимулированный (1) и радиационно-стимулированный (2) выход водорода из палладия. Сдвиг РСГВ по сравнению с ТГСВ $\Delta T_{Pd} > 380$ °С.

Сводные данные по результатам эксперимента

Образец	β (ТСГВ), град/с	T_{\max} (ТСГВ), °С	E_d (ТСГВ), эВ	β (РСГВ) град/с	T_{\max} (РСГВ), К	E_d (РСГВ), эВ
Ni	1	773	2.5	10	423, 548	1.3, 1.7
Pd	1	753	2.3	10	363	1.1

Примечание. ТСГВ – термостимулированное газовыделение, РСГВ – радиационно-стимулированное газовыделение, β – скорость нагрева, T_{\max} – максимальная температура нагрева, E_d – энергия активации выхода водорода.

Указанное различие может быть связано с неравновесным характером десорбции водорода в условиях радиационного воздействия [5, 6]. Облучение насыщенных водородом материалов, например электронами, поглощаемыми в слое толщиной L_{ex} , сопровождается генерацией в водородной подсистеме металла колебательно-возбужденных состояний со скоростью Γ_{ex} . Если учесть, что степень насыщения металлов водородом велика и соответствует в Pd примерно одному атому Н(D) на атом металла, то энергия колебаний в водородной подсистеме (частота, с которой колеблются ионы водорода, будучи смещенными относительно ионной подрешетки металла под действием пучка электронов) [5, 6]:

$$\hbar\omega = \hbar e \sqrt{\frac{\rho_{\text{Pd}} N_A}{\mu_{\text{Pd}} m_p \epsilon_0}} = \hbar e \sqrt{\frac{n_{\text{H}}}{m_p \epsilon_0}} \cong 0.2 \text{ эВ},$$

где ρ_{Pd} , μ_{Pd} – плотность и молярная масса палладия; m_p – масса протона; N_A – число Авогадро; ϵ_0 – электрическая постоянная. Это соответствует частоте колебаний в металлах $\text{H}^+ 5 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$.

Эффективный коэффициент диффузии равен [11, 12]:

$$\begin{aligned} D^{\text{эфф}}(x) &= D + D^v \frac{L_{\text{ex}} \Gamma_{\text{ex}} \exp\left(-x \sqrt{\frac{\Gamma_1}{D^v}}\right)}{\sqrt{D^v \Gamma_1 + v_D^v}} \approx \\ &\approx D + D^v \frac{L_{\text{ex}} \Gamma_{\text{ex}}}{\sqrt{D^v \Gamma_1}} = D + \sqrt{D^v} \frac{L_{\text{ex}} \Gamma_{\text{ex}}}{\sqrt{\Gamma_1}} \approx \\ &\approx D_0 \exp(-E_a/kT) + \sqrt{D_0} \frac{L_{\text{ex}} \Gamma_{\text{ex}}}{\sqrt{\Gamma_1}} \exp(-E_a/2\hbar\omega), \end{aligned}$$

где Γ_1 – скорость релаксации колебательно-возбужденных состояний в водородной подсистеме. В условиях радиационного разогрева, переводящего систему в состояние сильного отклонения от равновесного при $kT_{\text{эфф}} \approx \hbar\omega$, неравновесный выход будет осуществляться с энергией активации $E_a/2$, что не противоречит экспериментальным данным (таблица).

ОСОБЕННОСТИ ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ ВОДОРОД–МЕТАЛЛ

Чтобы понять природу радиационно-ускоренной диффузии водорода в металлах, в настоящей работе были изучены особенности электронной структуры системы металл–водород при воздействии ионизирующего излучения. С этой целью были выполнены расчеты из первых принципов электронной структуры системы PdH. Методика и детали расчета подробно изложены в [13]. Кратко, подход, применяемый в настоящей работе, заключается в следующем. Согласно флуктуационно-диссипативной теореме передача энергии ω и момента \mathbf{q} системе от налетающей частицы определяется динамическим структурным фактором $S(\mathbf{q}, \omega)$. В случае периодического кристалла эта величина определяется матрицей для динамической диэлектрической функции $\epsilon_{GG}(\mathbf{Q}, \omega)$ в виде:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{\Omega |\mathbf{Q} + \mathbf{G}|^2}{2\pi} \text{Im}[\epsilon_{GG}^{-1}(\mathbf{Q}, \omega)], \quad (1)$$

где \mathbf{G} обозначает вектор обратной решетки, $\mathbf{q} = \mathbf{Q} + \mathbf{G}$; Ω – объем кристалла. В случае взаимодействующих электронов обратная диэлектрическая функция связана с функцией отклика χ согласно интегральному уравнению $\epsilon^{-1} = 1 + v\chi$, где v обозначает потенциал Кулона. В рамках временной теории функционала плотности [14, 15], χ удовлетворяет интегральному уравнению $\chi = \chi^0 + \chi^0(v + K^v)\chi$, где χ^0 – функция отклика для невзаимодействующих электронов и K^v учитывает динамические обменно-корреляционные эффекты. Мнимая часть функции χ^0 рассчитывается согласно соотношению:

$$\begin{aligned} \chi_{GG}^{01}(\mathbf{Q}, \omega) &= \frac{2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{BZ}} \sum_n^{\text{occ}} \sum_{n'}^{\text{unocc}} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{n'\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \omega) \times \\ &\times \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \exp(-i(\mathbf{Q} + \mathbf{G})\mathbf{r}) | \psi_{n'\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \rangle \times \\ &\times \langle \psi_{n'\mathbf{k}+\mathbf{Q}} | \exp(-i(\mathbf{Q} + \mathbf{G}')\mathbf{r}) | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

В этом выражении учитывается вырождение по спину, n и n' обозначают зонные индексы, суммирование по \mathbf{k} выполняется по первой зоне

Бриллюэна. E_{nk} и ψ_{nk} обозначают, соответственно, одноэлектронную энергию и волновые функции, являющиеся решениями уравнения Кона–Шэма. Для их вычисления был использован обменно-корреляционный потенциал в форме Сеперли–Олдера [16]. Электронно-ионное взаимодействие задано нелокальным псевдопотенциалом, сохраняющим норму [17]. В фурье-разложении χ^0 , χ и ϵ применяли до 200 плоских волн. В уравнении (2) численное суммирование по \mathbf{k} выполнялось по сетке $144 \times 144 \times 144$. После вычисления мнимой части χ^0 ее вещественную часть вычисляли с помощью соотношения Крамерса–Кронига. Для описания K^{χ^0} было использовано приближение хаотических фаз, когда $K^{\chi^0} = 0$.

На рис. 3 показана рассчитанная мнимая часть обратной диэлектрической функции, часто называемой функцией потерь, для чистого Pd в районе низких энергий. В качестве примера приведены данные для моментов в направлении $\langle 111 \rangle$. Отметим, что плазменная структура в случае более высоких энергий была хорошо изучена в предыдущих работах и не представляет интерес в обсуждаемом контексте, поскольку время жизни таких возбуждений существенно короче. Из рис. 3 видно, что спектр возбуждений в этом энергетическом интервале существенно отличается от предсказаний теории электронного газа, в рамках которой в этом энергетическом интервале наблюдаются только некогерентные пары электрон–дырка.

В частности, в палладии было обнаружено присутствие низкоэнергетической плазменной моды с характерной дисперсией, качественно похожей

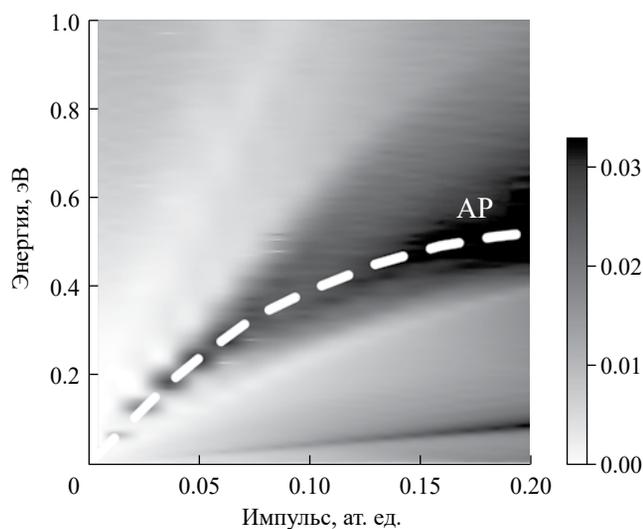


Рис. 3. Функция потерь энергии для чистого Pd в районе низких энергий в случае импульса, направленного вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$. Пунктирной линией отмечена дисперсия доминирующего акустического плазмона AP.

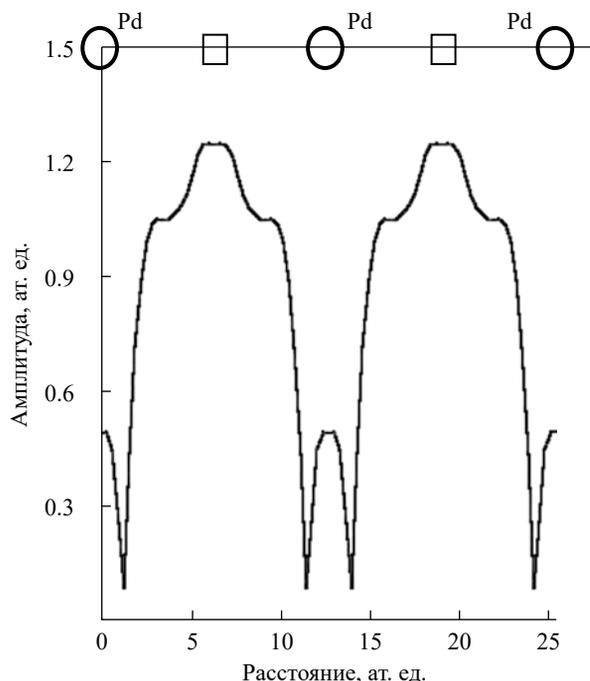


Рис. 4. Рассчитанная амплитуда пространственного распределения полного потенциала, устанавливающегося в чистом Pd вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$ в ответ на приложенный внешний потенциал (3). Положения ионов палладия обозначены кружками. Квадратами показаны положения октаэдрических пор, в которых предпочтительнее всего при растворении располагаются атомы водорода.

на дисперсию акустических фононов. Вследствие этой аналогии коллективные электронные возбуждения такого рода получили название акустических. Причина существования таких плазмонов в чистом палладии была объяснена в предыдущей публикации [18]. Она сводится к наличию высокой плотности состояний на уровне Ферми, где эти состояния разделены на две или три группы, движущиеся с очень разными скоростями.

Анализ ширины плазменных пиков показывает, что при низких частотах ~ 100 мэВ время жизни плазмонов может достигать 10^{-13} с, что на один-два порядка больше по сравнению с временем жизни обычных плазмонов. Отличия спектра возбуждений в палладии от результатов теории электронного газа не ограничиваются только наличием коллективных возбуждений при низких энергиях. Сильная пространственная неоднородность валентной электронной плотности в этом материале приводит также к сильной пространственной неоднородности всех низкоэнергетических возбуждений, включая случай статических возмущений. Для демонстрации этого факта на рис. 4 приведена амплитуда пространственного распределения полного потенциала, сгенерированного внутри

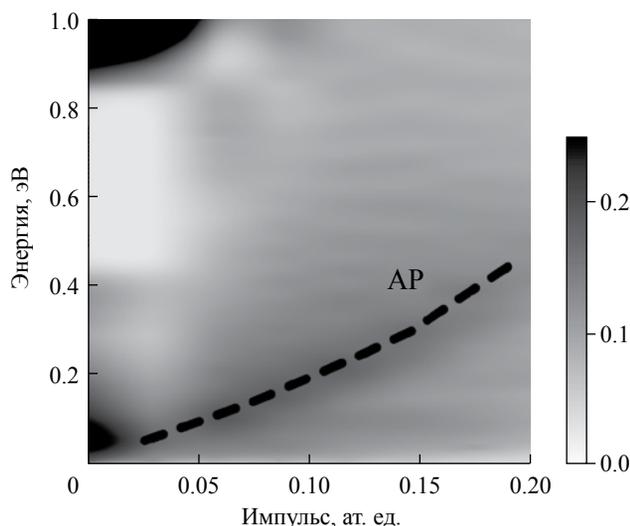


Рис. 5. Рассчитанная функция потерь энергии для PdH в районе низких энергий для импульса, направленного вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$. Пунктирной линией отмечена дисперсия плазмона акустического типа AP.

кристалла внешним потенциалом V_{ext} , медленно изменяющимся со временем и заданным в виде:

$$V_{\text{ext}}(r, t) = \exp(iqr) \exp(-i\omega t). \quad (3)$$

В случае свободного электронного газа распределение представляет собой тривиальную константу по всей ячейке. В то же время из рис. 4 следует, что полный потенциал является сильно неоднородной функцией с максимумом, соответствующим октаэдрическому положению, и с существенно более низкой амплитудой вблизи ионов палладия. Таким образом, наиболее сильные колебания потенциала и, соответственно, электрического поля при внешнем воздействии должно происходить в местах, где преимущественно концентрируются атомы водорода. При этом перенос энергии к ионам матрицы оказывается менее эффективным. При увеличении частоты внешнего возмущения становится возможным возбуждение акустического плазмона. Это сопровождается сильным увеличением амплитуды полного потенциала в кристалле. Детали такого анализа могут быть найдены в [19].

Растворение водорода в палладии приводит к существенным изменениям его спектра возбуждений. Это объясняется сильными изменениями электронной зонной структуры в окрестности уровня Ферми. Так, в PdH на уровне Ферми присутствуют только состояния преимущественно sp -типа. В результате исчезают условия для существования акустического плазмона при очень низких энергиях. Тем не менее, даже в этих условиях в спектре возбуждения PdH можно обнаружить слабое плазмонное возбуждение вдоль

направления $\langle 111 \rangle$, как показано на рис. 5. В то же время анализ распределения полного потенциала в этой системе, вызванного возмущением в виде (3), свидетельствует о том, что, несмотря на сильное подавление низкоэнергетической плазмонной структуры, сильная пространственная локализация наведенных полей сохраняется. На рис. 6 представлено распределение амплитуды полного потенциала вдоль направления $\langle 111 \rangle$. Сравнивая этот рисунок с рис. 4, можно видеть, что произошло существенное перераспределение полного потенциала в пространстве. Так, вблизи положения ионов палладия амплитуда почти на порядок ниже, чем в окрестности ионов водорода. Как и в случае чистого палладия, при возбуждении акустического плазмона в PdH амплитуда колеблющегося потенциала существенно возрастает.

Таким образом, на основе представленных результатов можно заключить, что в случае металлов с частично заполненной электронной d -оболочкой можно ожидать сильную локализацию приложенного внешнего потенциала на субатомных расстояниях. Более того, наличие низкоэнергетических коллективных электронных возбуждений, обладающих временем жизни, более долгим по сравнению с высокоэнергетическими плазмонами, может приводить к сильному увеличению этого эффекта.

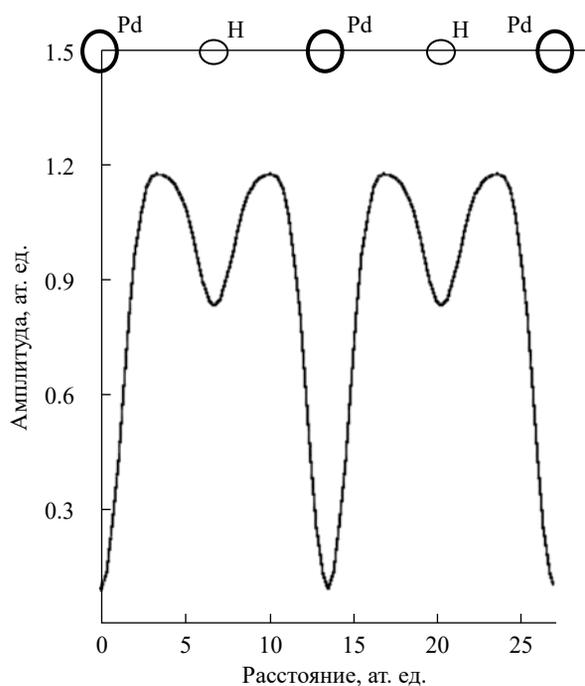


Рис. 6. Рассчитанное распределение амплитуды полного потенциала, устанавливающегося в PdH в кристаллографическом направлении $\langle 111 \rangle$ в ответ на приложенный внешний потенциал (3). Положения ионов палладия и водорода обозначены кружками разного размера.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Определены скорости выхода водорода из никеля и палладия в случае термического линейного нагрева со скоростью 1 град/с и радиационного нагрева электронным пучком со скоростью 10 рад/с. Хотя увеличение скорости нагрева должно способствовать сдвигу максимума на кривых газовой выделения в высокотемпературную область, экспериментально наблюдается существенный сдвиг максимумов при радиационном нагреве в низкотемпературную область на 250–300 °С и понижение энергии активации выхода в 1.5–2 раза.

Это, возможно, связано с тем, что локальные частоты Н-состояний в металлах лежат вне фонного спектра кристаллов. Обладая колебательными квантами с энергией, достигающей ~0.2 эВ, Н-содержащие связи в процессе релаксации вынуждены генерировать сразу три–пять фононов либо передать энергию по механизму диполь(квадруполь) – заряд электронной подсистеме твердого тела. Неравновесное состояние внутренней водородной атмосферы создает благоприятные условия для колебательно-поступательного обмена ($V-T$ -обмена), неравновесного перераспределения и выхода водорода из твердого тела при облучении. Поэтому даже в металлах с быстрой релаксацией в электронной подсистеме ($\tau \leq 10^{-13} - 10^{-14}$ с) наличие легких изотопов атомов водорода создает условия для аккумуляции энергии, и способствует неравновесному движению водорода и других примесных атомов.

Расчеты из первых принципов электронной структуры системы металл–водород позволяют на качественном уровне объяснить экспериментально наблюдаемую ускоренную миграцию водорода, стимулированную электронами с энергией ниже порога образования дефектов. Атомы водорода в металлах имеют положительный заряд, энергия ионизирующего излучения, проникающего в металлы, преимущественно поглощается за счет возбуждения динамических колебаний электронной плотности (плазмонов). В результате взаимодействия положительно заряженного атома водорода с отрицательно заряженным электронным облаком атомы водорода приобретают энергию, достаточную для преодоления диффузионного барьера. Плазмоны также являются эффективным механизмом распространения энергии излучения по всему кристаллу.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках Государственного задания “Наука” (научный проект № 1524).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гапонцев А.В., Кодратьев В.В. // УФН. 2003. Т. 46(10). С. 1077.
2. Fukai Y. The Metal-Hydrogen System. Berlin–Heidelberg–New York: Springer, 2005. 500 p.
3. Нечаев Ю.С. // УФН. 2008. Т. 178. № 7. С. 709.
4. Pundt R., Kirchheim R. // Ann. Rev. Mater. Res. 2006. V. 36. P. 55.
5. Тюрин Ю.И. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1986. Т. 9. С. 115.
6. Tyurin Yu., Chernov I. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2002. V. 27. P. 829.
7. Chernov I.P., Rusetsky A.S., Krasnov D.N. et al. // J. Engin. Thermophys. 2011. V. 20(4). P. 360.
8. Silkin V.M., Chernov I.P., Koroteev Yu.M. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 245114.
9. Nikitenkov N.N., Khashkhash A.M., Sigfusson T.I. et al. // Acta Phys. Polonica. 2012. V. 21(1). P. 78.
10. Никитенков Н.Н., Хаухаи А.М., Шуленов И.А. и др. // Приборы и техника эксперимента. 2009. Т. 52. № 6. С. 865.
11. Woodruff D.P., Delchar T.A. Modern Techniques of Surface Science. Cambridge University Press, 1994. 586 p.
12. Tyurin Yu.I., Nikitenkov N.N., Sigfusson I.T. et al. // Vacuum. 2016. V. 131. P. 73. <http://dx.doi.org/10.1016/j.vacuum.2016.06.001>
13. Silkin V.M., Chernov I.P., Echenique P.M. // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 245105.
14. Runge E., Gross E.K.U. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 52. P. 997.
15. Petersilka M., Gossmann U.J., Gross E.K.U. // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. P. 1212.
16. Ceperley D.M., Alder B.J. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. P. 566.
17. Troullier N., Martin J.L. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 1993.
18. Silkin V.M., Chernov I.P., Koroteev Yu.M., Chulkov E.V. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 245114.
19. Silkin V.M., Nazarov V.U., Chernov I.P., Sklyadneva Y.Y., Chulkov E.V. // J. Phys.: Condens. Matt. 2015. V. 27. P. 055501.

Hydrogen Yield from Nickel and Palladium Stimulated by Electron Beam

Yu. I. Tyurin, I. P. Chernov, V. M. Silkin, V. S. Sypchenko, A. M. Hashhash,
N. N. Nikitenkov, N. D. Tolmacheva

New experimental data on the radiation enhanced diffusion of hydrogen in metals, in particular nickel and palladium, by accelerated 30 keV electrons were obtained. The hydrogen yield spectra from nickel and palladium, in the case of thermal heating and electron beam radiation, were determined. A significant shift of thermal gas-discharge maxima at radiant heating to low temperature region was detected. The presence of internal hydrogen atmosphere was shown to create favorable conditions for the vibrational-translational exchange ($V-T$ -exchange) and the redistribution of non-equilibrium release of hydrogen from solids under irradiation. The accelerated hydrogen migration stimulated by electrons with energies below the defect formation threshold was explained on a qualitative level. Ab initio calculations of electronic structure of the metal-hydrogen systems showed that plasmons were also effective mechanisms for the radiation energy propagation over the whole crystal.

Keywords: hydrogen, nickel, palladium, thermal and radiation enhanced gas yield, ab initio calculations, plasmons.