ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 2, № 1 (1998) с. 70–75

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 2, No 1 (1998) p. 70–75

РОЗПОДІЛ ЗАРЯДУ І ХЕМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК У ШАРУВАТИХ МОНОКРИСТАЛАХ ЙОДИДУ ІНДІЮ

М. І. Колінько
Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра експериментальної фізики, Україна, UA–290602, Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8а

(Отримано 22 листопада 1996, в остаточному вигляді — 10 березня 1997)

За густиною електронного заряду валентних зон, розрахованою з використанням хвильових функцій псевдопотенціяльного гамільтоніяна, проаналізовано особливості хемічного зв'язку в шаруватих монокристалах йодиду індію. Виявлений змішаний йонно–ковалентний тип хемічного зв'язку підтверджено аналізом, виконаним на підставі концепцій деформаційної густини та лапласіяна густини. Виявлена локалізація додаткового заряду між катіонами суміжних шарів пов'язується з і зв'язуючою взаємодією.

Ключові слова: розподіл зарядової густини, хемічний зв'язок, анізотропія, йодид індію.

PACS number(s): 71.15.Hx, 61.50.Lt, 61.66.Fn

I. ВСТУП

Одним з найбільш інформативних методів для з'ясування характеру хемічного зв'язку та пояснення оптичних і механічних властивостей кристалів та їхньої анізотропії є розрахунок розподілу електронної густини $\rho(\mathbf{r})$. Традиційно $\rho(\mathbf{r})$ зображають у вигляді карт розподілу заряду для найхарактерніших площин в елементарній комірці. Головні засновки цього дослідження такі: а) електронна густина визначає всі властивості основного стану кристалів; б) диференціяція хемічного зв'язку сполук є результатом виділення особливостей міжатомних взаємодій у системах з подібним розподілом електронної густини; в) електронну густину можна відтворити за результатами куторозділього рентґенівського аналізу.

Складні напівпровідники $A^{III}B^{VI}$ відрізняються від звичайних типу A^NB^{8-N} тим, що найбільш віддалена s-орбіталь катіона A має конфіґурацію замкненої оболонки. У так званих "десятиелектронних" сполуках ця "інертна s-електронна пара" катіона разом з аніонними p-станами утворює валентну зону, тоді як енерґетично найнижчі зони провідности заповнені катіонними p-станами. У результаті їхні електронні властивості демонструють характерні відмінності від інших йонних чи ковалентих сполук, а саме: дуже мала заборонена зона розміщена на межах зони Бріллюена з переважно внутрішньокатіонним екситоном; схильна до деформації найбільш віддалена s-оболонка призводить до незвично великих і негативних коефіцієнтів тиску найнижчих оптичних переходів; ця s-електронна пара зумовлює велике статичне екранування і сильну електрон–фононну взаємодію.

З цього погляду, вивчення характеру хемічного зв'язку в кристалах йодиду індію, шаруватому представникові родини моногалогенідів металів третьої групи, стабільности таких сполук зі зниженою валентністю, впливу "одинокої" s-електронної пари катіона видається актуальним.

II. ТЕХНІКА РОЗРАХУНКІВ

Розподіл заряду електронів розраховують на підставі отриманих за результатами зонно–енерґетичних обчислень хвильових функцій валентних станів $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{e}{\Omega}\sum_{n}^{N_{vb}} \int\limits_{\text{ЗБ}} |\psi_{n\mathbf{k}}|^2 d\mathbf{k}, \tag{1}$$

де Ω — об'єм зони Бріллюена, а $N_{vb} = \frac{1}{2}\sum_\alpha Z_\alpha N_\alpha$ — загальна кількість валентних зон.

Безпосереднє обчислення інтеґрала в (1) потребує значних комп'ютерних ресурсів, тому для наближеного розрахунку $\rho(\mathbf{r})$ доцільно використати схему Чеді і Коена [1], що дає змогу розрахувати середнє за зоною Бріллюена значення $\bar{f}$ для функції $f(\mathbf{k})$:

$$\bar{f} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int\limits_{\text{ЗБ}} f(\mathbf{k}) d^3k, \tag{2}$$

за допомогою так званих "спеціяльних точок" $\mathbf{k}_i$, у яких значення функції $f(\mathbf{k})$ визначають нульовий член розкладу цієї функції в ряд

$$f(\mathbf{k}) = f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} f_m A_m(\mathbf{k}), \tag{3}$$

тобто

$$f_0 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i f(\mathbf{k}_i), \tag{4}$$

причому вагові множники α_i та функції $A_m(\mathbf{k})$ повинні задовольняти умови

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i A_m(\mathbf{k}_i) = 0, \qquad m = 1, \ldots, N, \tag{5}$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 1. \tag{6}$$

За цих умов $\overline{f} = f_0$ з доброю точністю для великого N. Слід зауважити, що функція $f(\mathbf{k})$ (тобто підітеґральна функція в (1)) повинна мати повну симетрію ґратки:

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{n_T} \sum_{i=1} g(T_i, \mathbf{k}), \tag{7}$$

де T_i охоплює всі операції точкової групи ґратки T; n_T — порядок фактор–групи за підгрупою трансляцій просторової групи; $g(\mathbf{k})$ — гладка періодична функція хвильового вектора (з періодичністю $\mathbf{G}_n$, $\mathbf{G}_n$ — довільний вектор оберненої ґратки).

Для сполук з симетрією TlI-типу, які описує група D_{2h}^{17}, слід симетризувати підінтеґральну функцію (1) за $\mathbf{k}$ на точкову групу $T \equiv D_{2h}$:

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = |\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{n_T} \sum_i |U_{T_i\mathbf{k},n}(\mathbf{r})|^2. \tag{8}$$

Ураховуючи, що нульовий член розкладу в ряд Фур'є симетризованої функції $\tilde{f}(\mathbf{k})$ збігається з нульовим членом розкладу в ряд Фур'є функції $1/n_T \sum_i |U_{T_i\mathbf{k},n}(\mathbf{r})|^2$, і використавши формулу (4) та розклад псевдохвильової функції за системою плоских хвиль

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}_m} a(\mathbf{G}_m, \mathbf{k}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r})], \tag{9}$$

остаточно отримаємо

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{2e}{\Omega n_t} \sum_{i=1}^{N_{sp}} \alpha_i \sum_{n=1}^{Nvb} \sum_{T} \tag{10}$$

$$\times \left| \sum_{\mathbf{G}_m} a_n(\mathbf{G}_m, \mathbf{k}_i) \exp(-i\hat{T}\mathbf{G}_m(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}_R)) \right|^2,$$

де $a_n(\mathbf{G}_m, \mathbf{k})$ — варіяційні коефіцієнти розкладу функцій Блоха на плоскі хвилі; Ω — об'єм основної області кристала, що містить N елементарних комірок; $\boldsymbol{\tau}_R$ — дробова трансляція (оскільки D_{2h}^{17} — несиморфна група); N_{sp} — кількість спеціяльних точок.

Для безпосередніх розрахунків густини заряду $\rho(\mathbf{r})$ був використаний самоузгоджений псевдопотенціял з зонно–енерґетичного розрахунку [2], у якому отримано добре теоретико–експериментальне узгодження як для ширини забороненого проміжку ($E_g^{\text{розр}}$=1.86 еВ; $E_g^{\text{експ}}$=2.02 еВ [3]), так і в описі на підставі розподілу густини станів основних структур фотоелектронних спектрів. У ролі спеціяльних були використані точки, отримані в [4] для точкової групи D_{2h}. Власні вектори ермітової матриці для 345 плоских хвиль визначали QR-методом. Жодної факторизації матриці не проводили, власні значення і вектори отримані безпосередньо, без залучення техніки **kp**-збурень.

Для обчислення деформаційної густини як опорний стан була використана суперпозиція сферично усереднених непромотованих атомів (прокристал), які описані радіяльними хвильовими функціями Германа–Скілмана [5] і займають адекватні позиції щодо істинних в елементарній комірці [6].

III. КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА

Йодид індію (InI) кристалізується у так званій структурі типу TlI з просторовою несиморфною групою D_{2h}^{17} ($Cmcm$) [7]. Це шарувата структура з шарами, перпендикулярними до кристалічної оси b. Орторомбічна гранецентрована ґратка Браве InI з параметрами a=4.75 Å, b=12.76 Å, c=4.91 Å містить чотири формульні одиниці (рис. 1), координати йонів яких наведені у табл. 1.

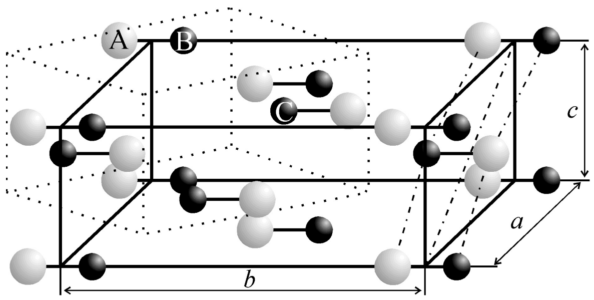

Рис. 1. Розміщення йонів індію (темні кулі) та йоду (світлі кулі) в елементарній комірці InI (крапками позначена примітивна комірка).

Йон	X	Y	Z	Йон	X	Y	Z
In	0	0.398	0.25	I	0	0.145	0.25
In	0	0.398	0.75	I	0	0.145	0.75
In	0	0.898	0.25	I	0	0.545	0.25
In	0	0.898	0.75	I	0	0.545	0.75

Таблиця 1. Координати йонів базису в елементарній комірці кристалів InI (у відносних одиницях параметрів ґратки).

Примітивна комірка (рис. 2) містить дві формульні одиниці з координатами йонів, наведеними у табл. 2.

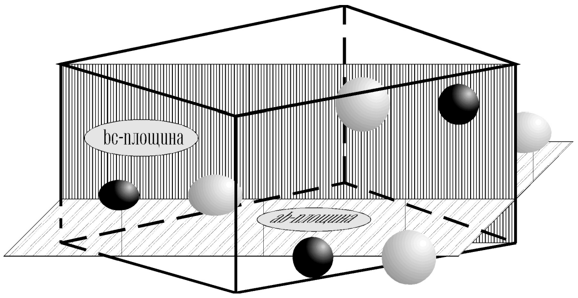

Рис. 2. Розміщення йонів індію (темні кулі) та йоду (світлі кулі) в примітивній комірці InI.

Йон	X	Y	Z	Йон	X	Y	Z
In	0	0.398	0.25	I	0	0.145	0.25
In	0	-0.398	-0.25	I	0	-0.145	-0.25

Таблиця 2. Координати йонів базису в примітивній комірці кристалів InI (у відносних одиницях параметрів ґратки).

Ретельний розгляд кристалічної структури свідчить, що завдяки "зморщеній" природі шарів (йони In висовуються, а йони галоїду добре розміщуються в середині шарів) йони йоду мають п'ять зв'язків, тоді як йони металу — сім. Як наведено в табл. 3, кожен йон In серед найближчих сусідів має п'ять йонів йоду: один у першій координаційній сфері (відстань l_1=3.23 Å), чотири — у другій координації (відстань l_2=3.46 Å), які разом з попереднім утворюють прямокутну призму з висотою в напрямку сталої ґратки a. Сусідами в третій координації є вже два йони металу, які належать до суміжного шару (відстань l_3=3.58 Å), однак відстань до них перевищує відстань до сусідів другої координації всього на 0.12 Å. Для йонів йоду найближчими однойменними сусідами є чотири йони, відстань до яких дорівнює 4.34 Å[8].

Справді, структуру типу TlI (координаційне число 7) можна розглядати [9] як проміжний випадок між структурами типу NaCl (к. ч. 6) та CsCl (к. ч. 8): послідовність $ABAB\ldots$ на рис. 1 відповідає такій у подібній структурі NaCl, тоді як послідовність $BCBC\ldots$ — другому випадку. На рис. 3 показано два випадки, коли будову InI розглядають як сформовану з шарів NaCl (тип I) або (тип II).

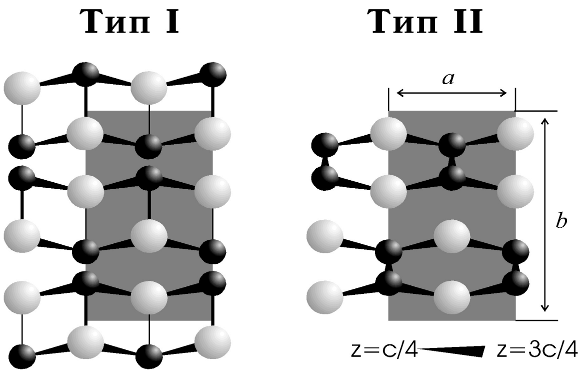

Рис. 3. Проєкція структури кристала йодиду індію в площині (a, b) при організації шарів згідно з типами I і II.

Йон	Симетрія	Сусіди		Відстань	
		к-ть	тип	назва	довжина
		7	I	d+4d'+2d"	3.23; 3.46; 3.95
In	$C_{2v} - mm$	2	In	2e	3.58
		7	In	d+4d'+2d"	3.23; 3.46; 3.95
I	$C_{2v} - mm$	2	I	4f	4.34

Таблиця 3. Симетрія та найближче оточення йонів в кристалах InI.

Шар типу I, який нагадує деформований стан структури NaCl, розкладається на два підшари зі зв'язками найближчих аніонів та катіонів. Причому кожен йон має чотири сусіди в другій координаційній сфері, зв'язки між якими зображені в орторомбічному базисі на рис. 4. У цьому випадку кристал неначе збудований з шарів спотворених кубів, вершини яких почергово займають йони In та I. З цього

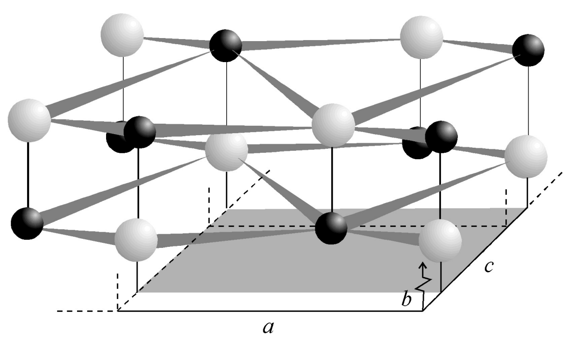

Рис. 4. Кристалічна структура InI у випадку розміщення шарів за типом I (у деформованій структурі NaCl).

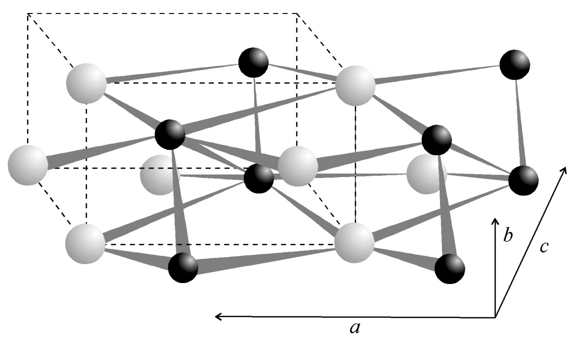

Рис. 5. Кристалічна структура InI у випадку розміщення шарів за типом II (у деформованій структурі CsCl).

погляду, структура складається з шарів кам'яної соли, зсунутих на $(\frac{1}{4};\frac{1}{4};0)a$ щодо гіпотетичної батьківської структури (зі сталою ґратки a).

Шар типу II як внутрішній має катіон–катіонний зв'язок, де кожен йон металу зв'язаний з двома подібними йонами, а кут між зв'язками становить 86°. Такого типу шар, упорядкований за схемою деформованої структури CsCl, зображений на рис. 5.

IV. РЕЗУЛЬТАТИ Й ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 6 показано результати обчислення розподілу густини заряду за даними самоузгодженого розрахунку методом нелокального нормозберігаючого псевдопотенціялу. Умови збереження норми та збіг реальних атомних і псевдохвильових хвильових функцій за межами кістяка дають змогу отримувати точні дані про розподіл електронної густини у випадку систем з багатьма валентними електронами.

Відображені перерізи зроблено через центри йонів згідно з площинами на рис. 2 (для того щоб катіон–катіонний зв'язок був у центрі карт, тут і надалі перерізи в bc-площині зсунуті на $b/2$). Зображення містять дві формульні одиниці, що належать до сусідніх шарів.

Отримані абриси свідчать про змішаний йонно–ковалентний характер зв'язку в йодиді індію. Інші характерні риси, одержані з цього вивчення, зводяться до такого: зарядові згустки розміщуються між йонами індію та йоду вздовж напрямку $< 010 >$; не простежується змішування аніон–аніонних орбіталей; видно наявність катіон–катіонної гібридизації, яка супроводжується накопиченням заряду між однойменними йонами індію. Останнє зауваження стосується міжмолекулярного (міжшарового) зв'язку, оскільки сусідами в третій координації кожного йона In є два йони індію, вони лише трохи більше віддалені (на 3.5%, як видно з табл. 3) порівняно з другими сусідами. Утворені цим зв'язком зиґзаґоподібні ланцюжки [IIn] – [InI] пояснюють сильну анізотропію оптичних та механічних властивостей йодиду індію, у якому кожна молекула InI оточена молекулами, орієнтованими протилежним чином (рис. 1), що, можливо, є головним структурним принципом у цій сполуці. Лише наявність зв'язку між йонами індію [10] або структуротворна роль їхньої $5s^2$ електронної пари дає змогу пояснити кристалічну будову InI з її незвичайно близькими відстанями між йонами металу.

Однак сильний йонний фон, який спостерігається на рис. 6, суттєво затінює зарядові скупчення. Тому для виявлення особливостей перерозподілу електронної густини, зумовленого утворенням хемічного зв'язку між йонами, доцільно використати перерізи функції деформаційної електронної густини $\delta\rho(\mathbf{r})$:

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \tilde{\rho}(\mathbf{r}). \qquad (11)$$

Хоча слід зауважити, що за змістом побудови $\delta\rho(\mathbf{r})$ відображає результат перерозподілу електронної густини у випадку одночасної взаємодії всіх йонів, а за її виглядом іноді складно простежити особливості попарної атомної (чи молекулярної) взаємодії.

Стійкість орторомбічних (типу TlI) сполук A^3B^7 часто обґрунтовують [11] великою поляризаційною здатністю йонів металів та тенденцією галогенів утворювати ковалентні зв'язки. На картах деформаційної густини можна знайти підтвердження обох тез (рис. 7). На лініях зв'язків найближчих сусідів In – I виділяються значні продовгуваті зарядові згущення (до $12\,e/\Omega$), розміщені перпендикулярно до лінії зв'язку. Опріч того, області з від'ємними значеннями $\delta\rho$ поблизу індію та загалом позитивний фон $\delta\rho$ навколо галогену свідчать про очевидне перенесення заряду від катіона до аніона. З позицій концепції йонно–ковалентности хемічного зв'язку в йонних зв'язках повинно простежуватись зміщення

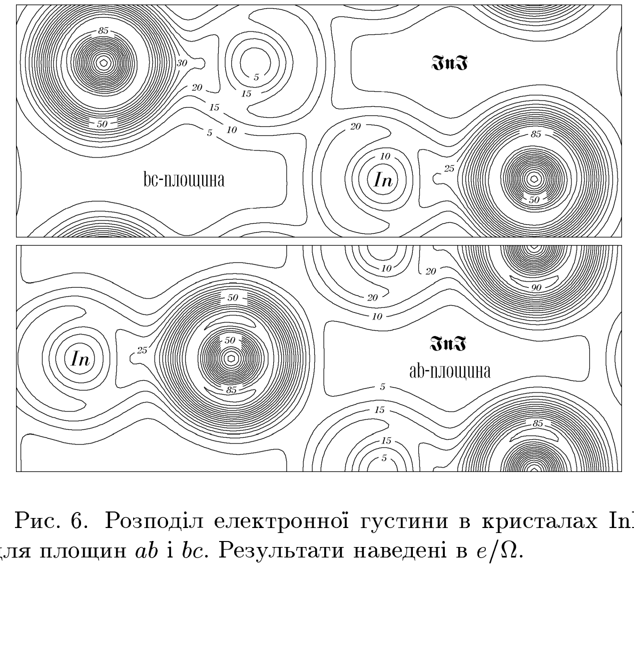

Рис. 6. Розподіл електронної густини в кристалах InI для площин ab і bc. Результати наведені в e/Ω.

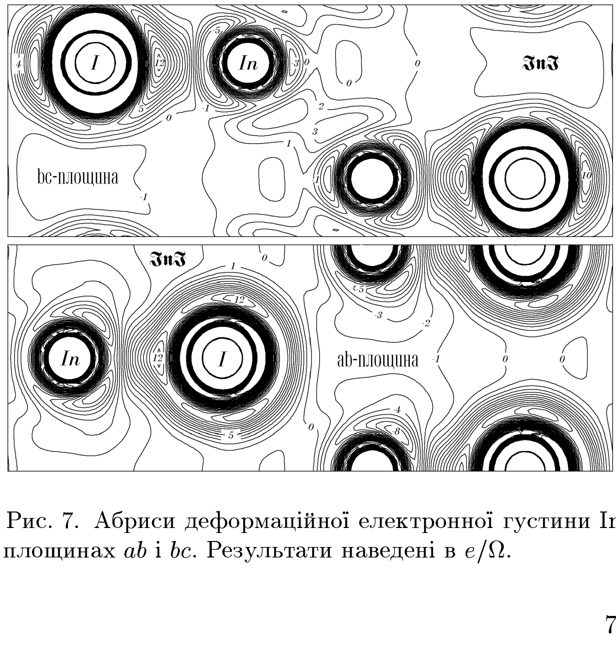

Рис. 7. Абриси деформаційної електронної густини InI у площинах ab і bc. Результати наведені в e/Ω.

електронної густини в бік більш електровід'ємного йона. Отже, зв'язок катіон – галоген є очевидним ковалентним зв'язком з сильною йонністю. Слабкий прояв конструктивної інтерференції областей σ-зв'язку пояснюється великим числом вузлів (кількість яких зростає зі збільшенням головного квантового числа) в радіяльних хвильових $5s$-, $5p$-функціях компонент.

Цікавою особливістю є спостережувані позаду йонів максимуми $\delta\rho$ (рис. 6, bc-площина), пов'язані з неподіленими електронними парами та їхніми орбіталями. Натомість в ac-площині виділяються області конструктивної інтерференції в аніонних підшарах з характерним для p_x-орбіталей розподілом густини.

Однак найбільш характерним для розподілу електронної густини в йодиді індію (як і в інших сполуках TlI-типу) є наявність зв'язуючої взаємодії між катіонами, які належать до різних шарів. Результати EHMO-обчислень [12] на димерах $(TlH)_2$ підтверджують, що зв'язуюча взаємодія між двома катіонами Tl^+ може виникнути у випадку, коли молекули мають орієнтацію "голова–до–голови" (голова = Tl), але димер не є лінійним ($D_{\infty h}$), а швидше має симетрію точкової групи C_{2h}. Заряд в області між катіонами має характерний для $p_\pi - p_\pi$ компонент, витягнутий поперек до лінії зв'язку розподіл. Водночас спостерігається характерне для стерично напружених систем з сильним взаємовпливом сусідніх йонних угруповань зміщення центрів ваги згустків $\delta\rho$ у бік від лінії зв'язку. Такий характер розподілу $\rho(\mathbf{r})$ у цій області може ґрунтуватись на припущенні [13], що $5s^2$ одинока пара катіона не є повністю інертною і в результаті зв'язуючі пари зсуваються в область між двома ядрами.

Водночас карти $\rho(\mathbf{r})$ і $\delta\rho(\mathbf{r})$ в ab-площині при описі зв'язку катіонів і аніонів (сусідів другої координації) з суміжних шарів містять певне протиріччя: якщо карта густини свідчить про можливість накопичення заряду в цій області, то на деформаційних абрисах ізоліній з позитивними значеннями в міжатомній області нема. Пояснити це можна тим, що в йодиді індію перебудова електронних оболонок атомів при утворенні зв'язку супроводжується таким відтоком електронів з між'ядерної области, який перевищує результат конструктивної інтерференції. Абриси ж деформаційної густини відображають лише наслідок перерозподілу електронної густини щодо гіпотетичного прокристала.

Уникнути суб'єктивности при виборі прокристала $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$ дає змогу опис хемічного зв'язку в термінах лапласіяна електронної густини [14]:

$$\nabla^2\rho(\mathbf{r}) = \partial^2\rho/\partial x^2 + \partial^2\rho/\partial y^2 + \partial^2\rho/\partial z^2. \qquad (12)$$

Отже, скалярне поле $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ характеризує кривизну $\rho(\mathbf{r})$ як різницю між значенням електронної густини в заданій точці $\mathbf{r}$ та її середнім значенням у сусідніх точках $\mathbf{r} \pm d\mathbf{r}$ і залежить від кривизни $\rho(\mathbf{r})$ у трьох взаємоперпендикулярних напрямках. Знак $\nabla^2\rho$ буде визначати розподіл областей локалізації і відтоку електронів в об'ємі елементарної комірки. Очевидно, що кривизна функції ρ уздовж лінії зв'язку між йонами завжди додатна. Таким чином, при утворенні ковалентного зв'язку, коли електронна густина в між'ядерному просторі збільшується, кривизна ρ уздовж лінії зв'язку буде зменшуватись з одночасним збільшенням в обох перпендикулярних напрямках, звідси $\nabla^2\rho(\mathbf{r}) < 0$.

Результати обчислення лапласіяна електронної густини для монокристалів йодиду індію показані на рис. 8.

Отримані результати в цілому підтверджують висновки, одержані під час розгляду розподілів електронної густини ρ і деформаційної густини $\delta\rho$: усі максимуми $\delta\rho$ відтворюються на картах лапласіяна у вигляді мінімумів, однак зміщених у випадку частково йонних зв'язків у бік катіона. Натомість чітко виявляються зарядові згустки на зв'язках катіонів і аніонів з сусідніх шарів. Заряд же s-електронів йоду зберігає сферичний розподіл, що підтверджує їхній квазіостовний характер.

V. ВИСНОВКИ

Вивчено особливості кристалічного впорядкування та характеру хемічного зв'язку в шаруватих монокристалах йодиду індію (пр. група D_{2h}^{17}) на підставі результатів самоузгодженого розрахунку методом нормозберігаючого псевдопотенціялу. Аналіз розподілу електронної густини $\rho(\mathbf{r})$, деформаційної густини $\delta\rho(\mathbf{r})$ та лапласіяна густини $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ свідчить, що в кристалах йодиду індію реалізується змішаний йонно–ковалентний тип хемічного зв'язку. Визначено розміщення додаткового заряду між

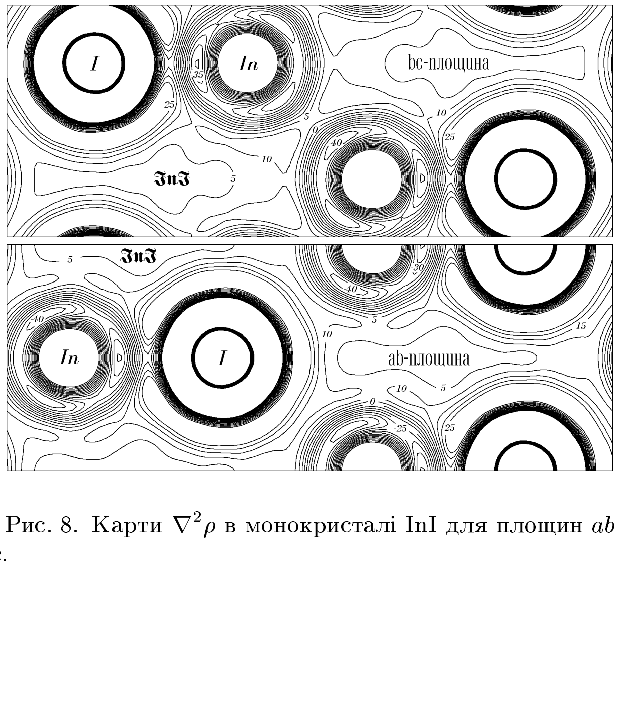

Рис. 8. Карти $\nabla^2\rho$ в монокристалі InI для площин ab і bc.

катіонами суміжних шарів, незвично мала відстань між якими пов'язується зі зв'язуючою взаємодією. Виявлено обмеженість інтерпретації в термінах лише $\delta\rho(\mathbf{r})$ чи $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ і показано їхній взаємодоповнювальний характер.

ПОДЯКИ

Представлена робота виконана завдяки підтримці Державного комітету України з питань науки і технологій і в рамках його програми "Нові матеріяли функціональної електроніки" за завданням 7.01.03/047–92. Дослідження, описані в цій публікації, стали можливими частково завдяки ґранту No U1L000 Міжнародного Наукового Фонду.

---

[1] D. J. Chadi, M. L. Cohen, Phys. Rev. B **8**, 5747 (1973).
[2] M. I. Kolinko, J. Phys.: Cond. Matt. **6**, 183 (1994).
[3] F. Jin, T. Itoh, T. Goto, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 2586 (1986).
[4] Ф. М. Гашимзаде, Д. А. Гусейнова, А. М. Алиев, Физ. тверд. тела **31**, 21 (1989).
[5] F. Herman, S. Skillman, *Atomic Structure Calculations* (New Jersey, Prentice–Hall, Englewood Cliffs, 1963).
[6] При цьому визначенні $\delta\rho(\mathbf{r})$ розгляд розподілу деформаційної густини має зміст лише в позакістяковій області.
[7] R. E. Jones, D. P. Templeton, Acta Crystallogr. **8**, 847 (1955).
[8] У праці [7] помилково визначено як найближчі сусіди два зв'язки I – I з відстанню 4.44 Å.
[9] F. Levy, E. Mooser, Helv. Phys. Acta **45**, 69 (1972).
[10] Зовнішніми електронами металів III групи є s^2p^1, а галогенів VI групи — s^2p^5 і переважно вони утворюють сполуки $M^{3+}X^{3-}$. Однак з ростом атомного числа металу спостерігається тенденція до утворення сполук типу M^+X^-. Наприклад, для Tl ймовірність утворення одновалентної сполуки є вже набагато більшою, ніж тривалентної.
[11] G. A. Samara, L. C. Walters, D. A. Northrop, J. Phys. Chem. Solids **28**, 1875 (1967).
[12] C. Janiak, R. Hoffmann, Angew. Chem. **101**, 1706 (1989).
[13] B. G. Hyde, S. Andersson, *Inorganic crystal structures* (N–Y, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapure, A Wiley–Interscince publication, 1989).
[14] R. F. W. Bader, *The force concept in chemistry* (N–Y, Van Nostrand, 1981).

CHARGE DISTRIBUTION AND CHEMICAL BOND IN THE LAYERED INDIUM IODIDE SINGLE CRYSTALS

M. I. Kolinko
Ivan Franko Lviv State University, Chair of Experimental Physics
8a Kyrylo i Mefodii Str., Lviv, UA–290005, Ukraine

Using the valence zone electron charge density data calculated with the wave functions of pseudopotential Hamiltonian, the chemical bond features are studied for the layered indium iodide single crystal. A mixed ionic–covalent type of the chemical bond is revealed and justified by the analysis performed on the basis of the concept of differential deformation density and the density Laplacian. The localization of the additional charge between the cations of adjacent layers is related to coupling interaction.