

# Модификация свойств пористого кремния при адсорбции молекул йода

© А.С. Воронцов<sup>¶</sup>, Л.А. Осминкина, А.Е. Ткаченко, Е.А. Константинова,  
В.Г. Еленский, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет),  
119992 Москва, Россия

(Получена 23 октября 2006 г. Принята к печати 3 ноября 2006 г.)

Методами инфракрасной спектроскопии и электронного парамагнитного резонанса исследованы свойства слоев пористого кремния, сформированных на монокристаллических пластинах кремния *p*- и *n*-типа проводимости, при адсорбции молекул йода  $I_2$ . Установлено, что в слоях, полученных на подложках *p*-типа, в атмосфере молекул  $I_2$  может происходить значительное увеличение концентрации носителей заряда — дырок до значений  $\sim 10^{18} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ . В слоях пористого кремния, сформированных на подложках *n*-типа проводимости, зафиксированы вызванное адсорбцией инвертирование типа носителей заряда и частичное замещение кремний-водородных связей на связи кремний-йод. Обнаружено уменьшение концентрации поверхностных парамагнитных дефектов —  $P_b$ -центров в исследуемых образцах после адсорбции йода. Полученные экспериментальные данные объясняются в рамках модели, предполагающей формирование как глубоких, так и мелких акцепторных состояний на поверхности нанокристаллов кремния при адсорбции молекул  $I_2$ .

PACS: 68.43.-h, 78.30.-j, 78.55.Mb

## 1. Введение

Пористый кремний (ПК), получаемый методом электрохимического травления пластин монокристаллического кремния (с-Si) в растворах на основе плавиковой кислоты, при определенных режимах формирования представляет собой ансамбли связанных кремниевых нанокристаллов [1]. В зависимости от размера пор ПК подразделяется на микропористый ( $\leq 2 \text{ нм}$ ), мезопористый (2–50 нм) и макропористый ( $\geq 50 \text{ нм}$ ) [2]. Слои мезо-ПК характеризуются, как правило, размерами кремниевых нанокристаллов (nc-Si) порядка 10–50 нм и имеют развитую удельную поверхность, достигающую  $200 \text{ м}^2/\text{см}^3$  [3]. В nc-Si в слоях мезо-ПК могут существовать подвижные равновесные (свободные или квазисвободные) носители заряда, концентрация которых обычно меньше, чем для подложки, из которой они были получены [4]. Было установлено, что адсорбция химически активных молекул ( $\text{NO}_2$ ,  $\text{C}_3\text{H}_5\text{N}$ ,  $\text{NH}_3$  и др.) приводит к существенному изменению концентрации носителей заряда [5–8] и электропроводности [9,10] в слоях мезо-ПК. Аналогичного эффекта можно также ожидать при адсорбции молекул йода ( $I_2$ ), проявляющих акцепторные свойства, что дает возможность простого управления концентрацией свободных носителей заряда в ансамблях nc-Si. Известно, что взаимодействие молекул  $I_2$  с поверхностью кремния приводит к формированию анион-радикалов  $I_2^-$  [11,12] и не сопровождается образованием дефектов типа оборванных связей кремния [13], являющихся центрами захвата свободных носителей заряда, что, в свою очередь, может ограничивать концентрацию последних [14]. Поэтому цель настоящего исследования заключалась в изучении влияния адсорбции молекул  $I_2$

на концентрацию свободных носителей заряда и дефектов в слоях мезо-ПК методами ИК-спектроскопии и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

## 2. Методика эксперимента

В работе исследовались образцы ПК, сформированные на подложках с-Si : В (100) *p*-типа проводимости с концентрацией легирующей примеси  $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (образцы 1, мезо-ПК) и  $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  (образцы 2, микро-ПК), а также образцы пористого кремния, сформированные на подложках с-Si : As (100) *n*-типа с концентрацией легирующей примеси  $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (образцы 3, мезо-ПК). Для травления образцов применялся раствор плавиковой кислоты и этанола  $\text{HF}(48\%) : \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  в пропорции 1 : 1. Плотность тока и время травления составляли  $50 \text{ мА}/\text{см}^2$  и 20 мин. Отслаивание пленок ПК от подложки производилось кратковременным увеличением тока до  $500 \text{ мА}/\text{см}^2$ . Толщина образцов контролировалась с помощью оптического микроскопа и составляла 50 (образцы 1), 56 (образцы 2) и 42 мкм (образцы 3). Пористость полученных образцов определялась гравиметрическим методом и была около 60% для образцов 1 и 3 и 70% для образцов 2. Изучение химического состава поверхностного покрытия слоев ПК и поглощения на свободных носителях заряда осуществлялось с помощью инфракрасного (ИК) фурье-спектрометра RX-I фирмы Perkin Elmer в спектральном интервале 400–6000  $\text{см}^{-1}$  с разрешением  $2 \text{ см}^{-1}$ . Информация о дефектах получалась из измерений спектров ЭПР с использованием спектрометра РХ-100. Рабочая частота составляла 9.45 ГГц, частота модуляции — 100 кГц и чувствительность —  $5 \cdot 10^{10}$  спин/Гс. Адсорбция молекул  $I_2$  на свободные

<sup>¶</sup> E-mail: vorontsov@vega.phys.msu.ru

слои ПК осуществлялась из вакуума после предварительной откачки до давления  $10^{-5}$  Торр. Используемое в работе экспериментальное оборудование позволяло в одном цикле измерений производить напуск молекул и регистрировать ИК- и ЭПР-спектры. Все эксперименты проводились при комнатной температуре.

### 3. Экспериментальные данные и их обсуждение

На рис. 1 представлены спектры поглощения ИК-излучения для образцов 1, до и после адсорбции молекул  $I_2$ . Спектры поглощения  $\alpha(\nu)$  рассчитывались из спектров пропускания  $T(\nu)$  по формуле

$$\alpha(\nu) = -\frac{\ln T(\nu)}{d}, \quad (1)$$

где  $d$  — толщина образца. Зависимость  $\alpha(\nu)$  представляет собой коэффициент поглощения, однако без учета корректировки на спектр отражения.

В спектрах свежеприготовленных образцов, измеренных в вакууме (рис. 1, кривая 1), наблюдаются полосы поглощения на валентных колебаниях Si-H<sub>x</sub> ( $x = 1, 2, 3$ ;  $\nu = 2050-2170 \text{ см}^{-1}$ ), на ножничных колебаниях Si-H<sub>2</sub> ( $\nu = 910 \text{ см}^{-1}$ ) и на деформационных колебаниях Si-H<sub>x</sub> ( $x = 1, 2, 3$ ;  $\nu = 600-760 \text{ см}^{-1}$ ) [14]. Наличие данных полос свидетельствует о водородном покрытии поверхности nc-Si. Наряду с поглощением на поверхностных связях в спектре образца 1 (рис. 1) наблюдается монотонное возрастание величины  $\alpha$  с уменьшением волнового числа. Данная особенность обусловлена поглощением ИК-излучения свободными носителями заряда в слоях мезопористого кремния [4]. После адсорбции молекул  $I_2$  происходит значительный рост поглощения ИК-излучения свободными носителями заряда (рис. 1, кривая 2). Последующее вакуумирование приводит к восстановлению исходного спектра.

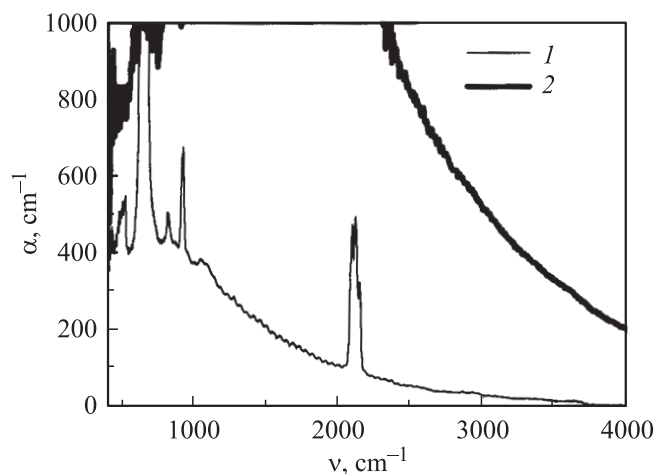


Рис. 1. Спектры поглощения образцов 1: 1 — в вакууме, 2 — при адсорбции молекул  $I_2$  ( $p = 10^{-1}$  Торр).

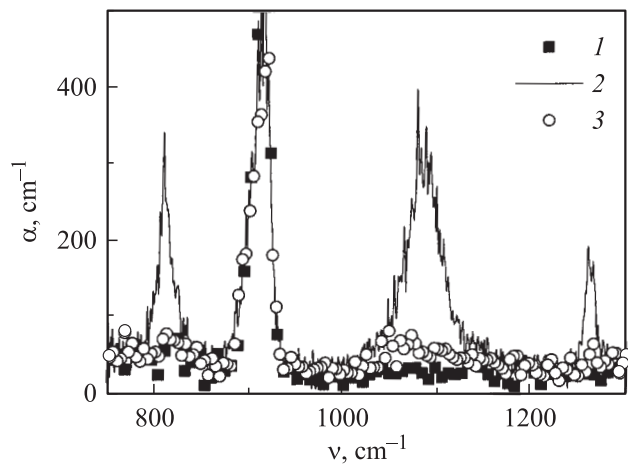
Концентрации свободных носителей заряда в слоях мезопористого ПК могут быть рассчитаны в соответствии с соотношением [5]:

$$N = \frac{\alpha n N_{c-Si}}{(1-p)\alpha_{c-Si} n_{c-Si}}, \quad (2)$$

где  $\alpha_{c-Si}$  и  $\alpha$  — взятые на одной длине волны коэффициенты поглощения монокристаллической подложки кремния соответствующего типа проводимости и выраженных на ней слоев ПК,  $n_{c-Si}$  и  $n$  — показатели преломления кристаллического кремния и слоев ПК,  $p$  — пористость сформированных образцов,  $N_{c-Si}$  — концентрация свободных носителей заряда в кремниевой подложке. Величины  $\alpha_{c-Si}$  и  $n_{c-Si}$  для подложек кремния  $p$ -типа брались из работы [15], а для подложек  $n$ -типа — из [16,17].

Таким образом, для образцов 1 концентрация свободных дырок в вакууме составляет  $N = 7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , после адсорбции молекул  $I_2$  —  $N = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  и при последующем вакуумировании —  $N = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Видно, что адсорбция молекул  $I_2$  приводит к росту концентрации свободных дырок, величина которой, однако, не превышает уровень легирования исходной подложки. Увеличение концентрации свободных дырок может быть формально объяснено образованием анионов  $I_2^-$  на поверхности ПК. Такие адсорбционные комплексы с переносом заряда могут выполнять функции легирующей примеси [18]. Этому соответствует появление соответствующих акцепторных уровней в запрещенной зоне нанокристаллов кремния. Данные уровни, по-видимому, являются достаточно глубокими, т.е. не могут сами обеспечить появление свободных дырок в ПК при комнатной температуре. Однако ввиду малых размеров нанокристаллов возможно кулоновское взаимодействие между адсорбированными молекулами  $I_2$  и  $P_b$ -центрами (дефектами типа оборванной связи кремния на границе раздела Si/SiO<sub>2</sub> [14]), которое приводит к возникновению донорно-акцепторных пар  $P_b^+ - I_2^-$ . Образование подобных пар вызывает рост концентрации свободных дырок ввиду „пассивации“  $P_b$ -центров, которые будучи положительно заряженными перестают быть центрами захвата дырок. В результате появление свободных носителей заряда может быть представлено следующим уравнением реакции:  $P_b^+ + I_2 \rightarrow P_b^0 + I_2 + h^+ \rightarrow (P_b^+ - I_2^-) + h^+$ , т.е. в объем nc-Si выбрасываются свободные дырки. При этом концентрация свободных дырок в nc-Si будет определяться уровнем легирования бором и степенью пассивации исходных  $P_b$ -центров адсорбированными молекулами.

Для изучения влияния адсорбции молекул  $I_2$  на состав поверхностного покрытия nc-Si были выбраны образцы 2. Это обусловлено тем, что в образцах 1 в атмосфере  $I_2$  сильное поглощение на свободных носителях заряда делает невозможным детектирование поглощения ИК-излучения локальными поверхностными колебаниями. В то же время известно, что в образцах 2



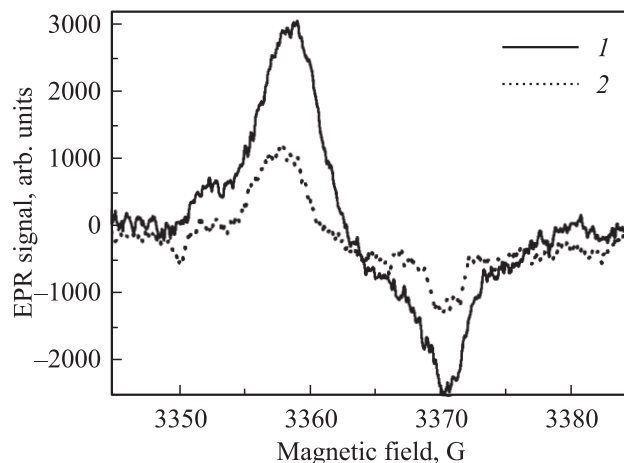
**Рис. 2.** Спектры образцов 2 в различных средах: 1 — в вакууме, 2 — при адсорбции молекул  $I_2$  ( $p = 10^{-1}$  Торр), 3 — в вакууме после адсорбции молекул  $I_2$ .

концентрации свободных носителей заряда существенно понижены (рис. 2, кривая 1) вследствие квантово-размерного эффекта [14]. После адсорбции молекул  $I_2$  в ИК-спектре образца 2 (рис. 2, кривая 2) появляются новые полосы поглощения на частотах 810, 1080 и 1260  $\text{cm}^{-1}$ , которые практически полностью исчезают при последующем вакуумировании образца до  $10^{-4}$  Торр (рис. 2, кривая 3). Повторный напуск молекул  $I_2$  в ячейку с ПК вновь приводит к появлению полос поглощения на указанных частотах. Отметим, что изолированные (не взаимодействующие с поверхностью твердого тела) молекулы  $I_2$  не активны в ИК-диапазоне, поскольку имеют нулевой дипольный электрический момент. Появление новых полос в ИК-спектре в атмосфере молекул  $I_2$  позволяет предположить, что адсорбированные на поверхности *nc*-Si молекулы  $I_2$  взаимодействуют с кристаллическим полем решетки. В результате в молекулах  $I_2$  происходит перераспределение электронной плотности и соответственно возникает индуцированный дипольный электрический момент, что, в свою очередь, обуславливает появление поглощения ИК-излучения адсорбированными молекулами. Таким образом, можно предположить, что наблюдаемые полосы поглощения обусловлены адсорбированными на поверхности *nc*-Si молекулами  $I_2$ .

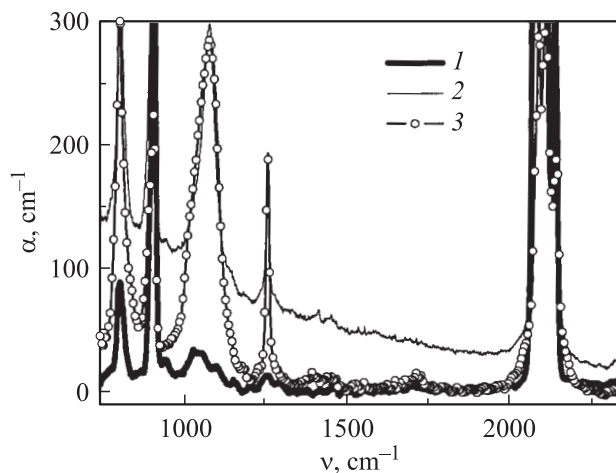
Для контроля концентрации дефектов и выяснения их роли в процессе взаимодействия молекул  $I_2$  с поверхностью *nc*-Si были измерены спектры ЭПР образцов 2 в различных условиях (рис. 3). Характерная структура спектра и рассчитанные величины  $g$ -факторов ( $g_{\perp} = 2.0087 \pm 0.0005$ ,  $g_{\parallel} = 2.0017 \pm 0.0005$ ) свидетельствуют о том, что детектируемый сигнал обусловлен  $P_b$ -центрами [14,19,20]. Данные дефекты, как известно, могут находиться в трех зарядовых состояниях  $P_b^0$ ,  $P_b^+$  и  $P_b^-$  [21]. Последние два состояния являются непарамагнитными.

Адсорбция молекул  $I_2$  приводит к уменьшению интенсивности сигнала ЭПР образца 2 (рис. 3, кривая 2). Изменение числа дефектов носит обратимый характер в цикле напуск молекул  $I_2$ —последующее вакуумирование. Учитывая данные экспериментальные факты, взаимодействие между молекулами  $I_2$  и  $P_b$ -центрами может быть описано следующей реакцией:  $I_2 + P_b^0 \rightarrow P_b^+ + I_2^-$ . Рассчитанные из спектров ЭПР концентрации дефектов  $N_s$  составляют:  $N_s = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  и  $N_s = 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  в вакууме и в атмосфере молекул  $I_2$  соответственно. Таким образом, адсорбция молекул  $I_2$  не приводит к генерации  $P_b$ -центров.

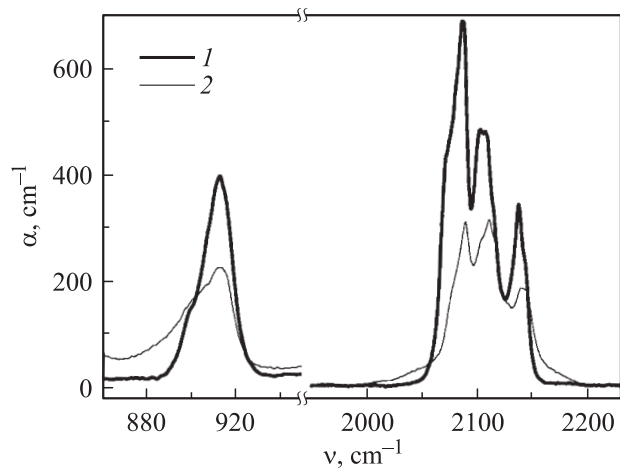
Перейдем к обсуждению экспериментальных данных, полученных для образцов мезо-ПК *n*-типа. На рис. 4 представлены рассчитанные с помощью соотношения (1) спектры поглощения  $\alpha(\nu)$  для образцов 3 в различных условиях. Исходные слои ПК в вакууме характеризуются преимущественно водородным покры-



**Рис. 3.** Спектры ЭПР-сигналов для образцов 2: 1 — в вакууме, 2 — при адсорбции молекул  $I_2$  ( $P = 10^{-1}$  Торр).



**Рис. 4.** Спектры поглощения образцов 3 в различных средах: 1 — в вакууме, 2 — при адсорбции молекул  $I_2$  ( $p = 10^{-1}$  Торр), 3 — в вакууме после адсорбции молекул  $I_2$ .



**Рис. 5.** Фрагменты спектров поглощения на ножничных Si–H<sub>2</sub>- и валентных Si–H<sub>x</sub>-связях для исходных образцов 3: 1 — в вакууме, 2 — в вакууме после адсорбции молекул I<sub>2</sub>.

тием поверхности (рис. 4, кривая 1), как и образцы *p*-типа 1 и 2. Как и в случае образцов 1 и 2, адсорбция молекул I<sub>2</sub> приводит к появлению линий поглощения на частотах 810, 1080 и 1260 см<sup>-1</sup> (за которые ответственны адсорбированные на поверхности *nc*-Si молекулы I<sub>2</sub>) и увеличению поглощения ИК-излучения на свободных носителях заряда (рис. 4, кривая 2). Последнее может быть обусловлено как ростом концентрации свободных электронов (основных носителей заряда), так и дырок (неосновных носителей заряда) в исследуемых образцах. Обсудим, какой процесс является наиболее вероятным. Как уже отмечалось выше, молекулы I<sub>2</sub> проявляют свойства акцепторов при адсорбции на поверхности кремния, тогда можно предположить, что в атмосфере йода происходит образование мелких акцепторных состояний I<sub>2</sub><sup>-</sup> на поверхности *nc*-Si. Это, в свою очередь, приведет к компенсации исходной примеси в образцах и к инвертированию в них электронного типа проводимости на дырочный. По формуле (2) были рассчитаны концентрации свободных носителей заряда мезо-ПК *n*-типа. Для исходных образцов концентрация свободных электронов в вакууме составляет  $N = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . После адсорбции молекул I<sub>2</sub>, которая, согласно нашей гипотезе, приводит к изменению типа основных носителей заряда, концентрация теперь уже свободных дырок составляет  $N = 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Последующее вакуумирование приводит к уменьшению концентрации свободных дырок до величины  $N = 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Как видно из приведенных данных, для слоев мезо-ПК *n*-типа изменение концентрации свободных носителей заряда является лишь частично обратимым в цикле напуск молекул адсорбата — последующее вакуумирование. Кроме того, после адсорбции молекул I<sub>2</sub> уменьшается поглощение на валентных колебаниях Si–H<sub>x</sub> ( $x = 1, 2, 3$ ) и происходит смещение данной полосы поглощения в область больших частот (рис. 5). Также необратимо

уменьшается полоса поглощения на ножничных колебаниях Si–H<sub>2</sub> (рис. 5). Указанные вариации полос поглощения, обусловленных Si–H<sub>x</sub>-связями, обсуждаются в работе [22] и объясняются частичным замещением Si–H-связей на поверхности образцов на Si–I-связи. Образование Si–I-связей является отличительной чертой адсорбции молекул I<sub>2</sub> на поверхности *nc*-Si *n*-типа по сравнению с *nc*-Si *p*-типа. Действительно, в пределах чувствительности метода вариации полос поглощения, обусловленных Si–H-связями, в *nc*-Si *p*-типа не зафиксированы. По-видимому, это обусловлено наличием свободных (или захваченных на дефектах) электронов в *nc*-Si *n*-типа. Действительно, большое сродство к электрону молекул I<sub>2</sub> обеспечивает более эффективное взаимодействие молекул I<sub>2</sub> с поверхностью *nc*-Si *n*-типа, в то время как для *nc*-Si *p*-типа адсорбция протекает преимущественно на дефектах, как следует из наших [5] и литературных данных [18].

#### 4. Заключение

В работе показано, что в процессе адсорбции молекул I<sub>2</sub> увеличивается концентрация свободных носителей заряда в *nc*-Si в слоях мезо-ПК. Результирующая концентрация носителей заряда в образцах определяется типом проводимости и уровнем легирования подложек, использованных при формировании ПК. Важным экспериментальным фактом является отсутствие в процессе адсорбции молекул I<sub>2</sub> генерации дефектов типа *P<sub>b</sub>*-центров, являющихся центрами захвата свободных носителей заряда и, следовательно, ограничивающих их концентрацию. Рост концентрации свободных носителей заряда в образцах *p*-типа объясняется формированием на поверхности *nc*-Si донорно-акцепторных пар *P<sub>b</sub>*<sup>+</sup>–I<sub>2</sub><sup>-</sup>, в результате чего дефекты перестают быть центрами захвата дырок; в объем *nc*-Si выбрасываются свободные дырки, и их концентрация приближается к уровню легирования исходной монокристаллической подложки. В образцах мезо-ПК *n*-типа, согласно нашей гипотезе, наблюдается инвертирование типа проводимости с электронного на дырочный, обусловленное, по-видимому, формированием мелких акцепторных состояний на поверхности *nc*-Si. Кроме того, происходит частичное замещение Si–H-поверхностных связей на Si–I, стимулированное, на наш взгляд, наличием достаточно высоких концентраций электронов в *nc*-Si *n*-типа. Полученные данные свидетельствуют о возможности управления типом и концентрацией свободных носителей заряда в ансамблях *nc*-Si в слоях ПК, что может быть использовано при разработке различных электронных устройств на его основе.

Работа была поддержана грантами Министерства образования и науки РФ и выполнена на оборудовании ЦКП МГУ им. М.В. Ломоносова.

## Список литературы

- [1] A. Uhler. *Bell Syst. Tech.*, **35**, 333 (1956).
- [2] J. Rouquerol, D. Avnir, C.W. Fairbridge, D.H. Everett, J.H. Haynes, N. Pernicone, J.D.F. Ramsay, K.S.W. Sing, K.K. Unger. *Pure Appl. Chem.*, **66**, 1739 (1994).
- [3] O. Bisi, S. Ossicini, L. Pavesi. *Surf. Sci. Rep.*, **38**, 1 (2000).
- [4] V.Yu. Timoshenko, Th. Dittrich, F. Koch. *Phys. Status Solidi B*, **222**, R1 (2000).
- [5] Е.А. Константинова, Л.А. Осминкина, К.С. Шаров, Е.В. Курепина, П.К. Кашкаров, В.Ю. Тимошенко. *ЖЭТФ*, **126** (10), 857 (2004).
- [6] Л.А. Осминкина, А.С. Воронцов, Е.А. Константинова, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров. *ФТП*, **39**, 482 (2005).
- [7] А.В. Павликов, Л.А. Осминкина, И.А. Белогорохов, Е.А. Константинова, А.И. Ефимова, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров. *ФТП*, **39**, 1385 (2005).
- [8] M. Chiesa, G. Amato, L. Boarino, E. Garrone, F. Geobaldo, E. Giamello. *Angew. Chem.*, **42**, 5031 (2003).
- [9] L. Boarino, C. Baratto, F. Geobaldo, G. Amato, E. Comini, A.M. Rossi, G. Faglia, G. Le'rondel, G. Sberveglieri. *Mater. Sci. Engin.*, **В**, **69–70**, 210 (2000).
- [10] L. Boarino, F. Geobaldo, S. Borini, A.M. Rossi, P. Rivolo, M. Rocchia, E. Garrone, G. Amato. *Phys. Rev. B*, **64**, 205 308 (2001).
- [11] Y. Yang, J.A. Yarnoff. *Surf. Sci.*, **573**, 335 (2004).
- [12] D. Rioux, F. Stepniak, R.J. Pechman, J.H. Weaver. *Phys. Rev. B*, **51**, 10981 (1995).
- [13] K. Kurita, T. Shingyouji. *Jap. J. Appl. Phys.*, **38**, 5710 (1999).
- [14] W. Theiß. *Surf. Sci. Rep.*, **29**, 91 (1997).
- [15] H. Hara, Y. Nishi. *J. Phys. Soc. Japan*, **21**, 6 (1966).
- [16] W. Spitzer, H.Y. Fan. *Phys. Rev.*, **108**, 2 (1957).
- [17] D.K. Schröder, R.N. Thomos, J.C. Swartz. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-25**, 2 (1978).
- [18] Ф.Ф. Волькенштейн. *Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции* (М., Наука, 1987).
- [19] H.J. von Bardeleben, D. Stievenard, A. Grosman, C. Ortega, J. Siejka. *Phys. Rev. B*, **47**, 10 899 (1993).
- [20] Е.А. Константинова, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров. *Поверхность. Физика, химия, механика*, **2**, 32 (1996).
- [21] P.M. Lenahan, J.F. Conley, Jr. *J. Vac.Sci. Technol. B*, **16**, 2134 (1998).
- [22] X. Zhou, M. Ishida, A. Imanishi, Y. Nakato. *Electrochim. Acta*, **45**, 4655 (2000).

Редактор Л.В. Беляков

## Modification of porous silicon electronic properties by means of iodine molecule adsorption

A.S. Vorontsov, L.A. Osminkina, A.E. Tkachenko, E.A. Konstantinova, V.G. Elenskii, V.Yu. Timoshenko, P.K. Kashkarov

Lomonosov Moscow State University,  
Physics Department,  
119992 Moscow, Russia

**Abstract** Properties of porous silicon layers formed on the *p*- and *n*-type silicon single crystals have been studied by FTIR- and EPR-spectroscopy under iodine molecules ( $I_2$ ) adsorption. An increase of charge carrier (holes) concentration up to  $10^{18}$ – $10^{19}$   $cm^{-3}$  was found in *p*-type porous silicon layers in  $I_2$  ambient. In *n*-type porous silicon layers the inversion of charge carrier type induced by adsorption and a partial substitution of the Si–H bonds by the Si–I bonds was detected. A decrease of the defect ( $P_b$ -centers) concentration in the investigated samples after  $I_2$  adsorption was observed. The obtained experimental data are explained by the model which takes into account the formation both the deep and shallow acceptor states on the silicon nanocrystal surface under  $I_2$  molecule adsorption.