

Informe final del Proyecto de Investigación:

“Modificación de superficies de silicio mediante moléculas de anclaje nanoparticuladas para ser utilizadas en dispositivos electrónicos modernos”

Documento I

**Dionisio Gutiérrez Fallas
(Investigador responsable en el ITCR)**

**Escuela de Física
Instituto Tecnológico de Costa Rica**

Marzo de 2011

Tabla de contenido

Tabla de contenido.....	2
Título	3
Autores y direcciones	3
Resumen	4
Palabras Clave	5
Introducción.....	5
Antecedentes.....	5
Justificación.....	6
Objetivos	6
Metodología	8
Resultados	9
Discusión y conclusiones	18
Recomendaciones.....	19
Agradecimientos	19
Referencias	20

Título

Modificación de superficies de silicio mediante moléculas de anclaje nanoparticuladas para ser utilizadas en dispositivos electrónicos modernos

Autores y direcciones

Dra. Mavis Montero Villalobos (Investigadora Principal)	Escuela de Química Universidad de Costa Rica	mavis.montero@gmail.com
Dr. Dionisio Gutiérrez Fallas (Responsable en el ITCR)	Escuela de Física Instituto Tecnológico de Costa Rica	dgutierrez@itcr.ac.cr
Dr. José Vega Baudrit (Responsable en el LANOTEC)	LANOTEC-CENAT	jvegab@hotmail.com

Nota: Inicialmente la propuesta del proyecto fue sometida a consideración por los tres investigadores dados anteriormente, sin embargo, a partir del segundo periodo de ejecución del proyecto, por razones administrativas, no se tenía la participación directa por parte del representante del LANOTEC.

También, otros participantes, quienes realizan su tesis de maestría en la Universidad de Costa Rica dentro de este proyecto, son los siguientes estudiantes:

Bach. Roberto Urcuyo Solórzano	Sistema de Estudios de Posgrado Escuela de Química Universidad de Costa Rica
Bach. Alejandra Sánchez Zamora	Sistema de Estudios de Posgrado Escuela de Química Universidad de Costa Rica
Bach. Diego González Flores	Sistema de Estudios de Posgrado Escuela de Química Universidad de Costa Rica

En el Instituto Tecnológico de Costa Rica se tuvo la participación de un estudiante, quien realizó su proyecto de graduación, con el propósito de cumplir con los requisitos para obtener su grado de licenciatura, en un tema relacionado con el proyecto.

Norberto Salazar Morera	Escuela de Ciencia de Materiales Instituto Tecnológico de Costa Rica
-------------------------	---

Resumen

La modificación de superficies y el anclaje de moléculas es uno de los temas de la nanotecnología que ha resurgido en estos últimos años. Principalmente, se ha observado su potencial en la industria de los dispositivos electrónicos. Es por ello que, a través del plan de fortalecimiento de la educación de la empresa Intel de Costa Rica, que se potencia la investigación en este campo en nuestro país, con proyecciones de la posibilidad de que este tipo de tecnología sustituya la tecnología de la era del Silicio.

Como objetivo *general* del proyecto se planteó la integración de nanopartículas, de conocida relevancia en el campo de la electrónica, en superficies modificadas de silicio, a partir de moléculas de anclaje.

Dentro de los *objetivos específicos* más importantes se propuso: el estudio del estado del arte en la síntesis de moléculas de anclaje, así como la síntesis de nanopartículas¹. Además, dentro de las actividades experimentales, se pretendía obtener la síntesis de los materiales mediante los métodos considerados más adecuados. Otro de los objetivos importantes fue lograr la caracterización de los materiales, principalmente su estructura, microestructura y las propiedades eléctricas.

Dos objetivos destacables fueron el propiciar una relación de investigación entre la empresa INTEL y las universidades públicas de nuestro país, además de propiciar la participación de estudiantes con el propósito de iniciar con la formación de una generación de personas con habilidades en el campo de la nanotecnología.

La metodología utilizada en el desarrollo del proyecto fue la ejecución de este en tres etapas, cada una con una duración de un periodo de un año. En la primera etapa se realizó el estudio del estado del arte, además de la síntesis preliminar de algunos materiales, dentro de ellos moléculas orgánicas, así como nanopartículas a partir de un método de electrólisis.

Como segunda etapa se planificó la optimización de los métodos seleccionados y el estudio experimental anclaje de nanopartículas sobre superficies de Silicio previamente seleccionadas.

En la tercera etapa se continuó con la síntesis de nuevas estructuras moleculares y particularmente con el desarrollo de las destrezas para la caracterización de los materiales en sus diferentes etapas.

Este proyecto se encuentra protegido intelectualmente bajo los derechos de protección de la Universidad de Costa Rica, sin embargo, mi participación estuvo asociada a las diferentes etapas, de las cuales menciono los resultados más importantes:

a) Desarrollo de destrezas en la caracterización de materiales mediante diversas técnicas asociadas a la difracción de rayos X (difracción en polvo, reflectancia).

b) Participación en el proceso de formación de estudiantes en temas relacionados a la cristalografía, mediante la colaboración en dos cursos de la maestría en Química de la Universidad de Costa Rica.

c) Participación como tutor en tesis y proyectos de graduación asociados al proyecto de investigación.

d) Colaboración en la presentación de ponencias en congresos nacionales.

Como conclusión importante, sobre mi participación en el proyecto, se resalta la experiencia desarrollada en la interpretación de algunos fenómenos relacionados con la síntesis y caracterización de materiales a escala nanométrica, principalmente en la difracción de rayos X y en la caracterización eléctrica de los materiales. En lo que respecta específicamente a los resultados de la investigación, se inició una brecha en la que, por primera vez, la empresa Intel fortalecía la formación de una generación de profesionales en nuestro país, en la que la investigación forme una parte importante de sus destrezas.

Palabras Clave

Modificación de superficies, nanomateriales, caracterización

Introducción

Antecedentes

El desarrollo de nuevos materiales es uno de los temas fundamentales a los que se dirige la investigación actual en el campo de la Ciencia de Materiales¹¹. El interés en este tema se fundamenta en la necesidad de nuevos avances en todas las áreas de la industria, la ciencia y la tecnología. Particularmente, en la industria electrónica la tecnología moderna plantea grandes retos debido a que el tamaño de los dispositivos electrónicos se está aproximando a las dimensiones nanométricas^{7,8}.

Actualmente, la empresa Intel Corporation, reconoce la necesidad de inversión y el apoyo de la investigación conjunta con otras instituciones, en la que se encuentran las universidades. Atendiendo a una convocatoria de la empresa Intel, los investigadores Dra. Mavis Montero de la Universidad de Costa Rica, Dr. José Vega Baurdrit de la Universidad Nacional–LANOTEC y el Dr. Dionisio Gutiérrez del Instituto Tecnológico, sometieron la propuesta del proyecto, el cual fue aprobado para un periodo de financiamiento de tres años con un presupuesto de aproximadamente veinte mil dólares anuales.

Justificación

En el aspecto científico, el proyecto se fundamentó en algunas propiedades importantes de los materiales: En los materiales en donde están presentes enlaces químicos fuertes, la deslocalización de los electrones de valencia puede ser extensiva pudiendo variar el alcance con el tamaño del sistema²². Este efecto, junto a los cambios estructurales, puede llevar a diferentes propiedades físicas y químicas, dependiendo principalmente en el tamaño⁴. Otro factor a considerar es que los cristales de tamaño nanométrico exhiben un comportamiento intermedio entre una molécula y una trozo de material conformado. El control sobre el tamaño y la morfología de los semiconductores representa un gran reto en el rediseño de materiales funcionales.

En este trabajo se pretendía aprovechar la experiencia, de algunos de los participantes^{12, 13, 14, 15}, en la síntesis de materiales nanoparticulados por métodos que permiten controlar el tamaño de las partículas de polvo y que no requieren los tradicionales tratamientos térmicos a altas temperaturas, con los cuales se procura modificar superficialmente láminas de sustratos de silicio (Si) utilizadas en la tecnología electrónica actual para la fabricación de semiconductores (obleas de silicio), con el propósito de introducir cambios a nivel tecnológico.

La propuesta pretendía, además de buscar soluciones a problemas de la industria, integrar a estudiantes e investigadores con el propósito de iniciar el proceso del conocimiento de la nanotecnología, de la cual ya debemos invertir en recurso humano e infraestructura, para alcanzar un desarrollo en temas específicos, mediante la planificación de acciones a mediano y largo plazo.

Objetivos

Los objetivos planteados fueron los siguientes:

- Determinar el estado del arte en la producción de moléculas de anclaje.
- Determinar el estado del arte en algunos métodos de producción de nanopartículas.
- Sintetizar nanopartículas con propiedades semiconductoras.
- Sintetizar moléculas de anclaje para ser utilizadas sobre sustratos de silicio.

- Utilizar las moléculas de anclaje para depositar materiales metálicos nanométricos sobre el sustrato de silicio.
- Caracterizar las propiedades de los materiales.
- Establecer un método de procesamiento de materiales, tal que pueda llevarse a escala industrial.
- Crear una relación de investigación entre la empresa INTEL y las Universidades del país, con el propósito de iniciar la cooperación técnica que beneficie tanto al sector industrial como al académico.
- Colaborar con la formación de una nueva generación de estudiantes de posgrado con habilidades en la síntesis de nanomateriales.

Metodología

Este proyecto de investigación se desarrolló principalmente en la Universidad de Costa Rica, sin embargo, parte del estudio teórico y algunos ensayos se realizaron en la Escuela de Física del Instituto Tecnológico de Costa Rica, así como en la Escuela de Ciencia e Ingeniería de Materiales.

En cuanto al estado del arte, se realizó mediante la búsqueda de artículos científicos, principalmente, en los cuales se hacían publicaciones sobre todas las áreas que contemplaba el proyecto: la síntesis de moléculas de anclaje²¹, la limpieza de las muestras⁶, la sensibilización de la superficie^{17,18}, la caracterización estructural y microestructural de la superficie, así como la caracterización eléctrica.

En el tema experimental, la primera etapa del proyecto requería de la adquisición de las obleas de Silicio, cuyas superficies se debían modificar. Estas obleas se adquirieron comercialmente.

Inicialmente se requería resolver la forma de cortar las obleas para poder someterlas a un proceso químico de limpieza, por lo que se utilizó una punta de diamante para realizar los cortes. Es decir, la muestra de estudio consistió en trozos de Silicio cristalino, de aproximadamente 1 cm² de superficie, los cuales se someterían a un proceso de limpieza para ser modificadas.

Las muestras limpias se sometían a la influencia de sustancias químicas con el objeto de propiciar enlaces entre el Silicio de la superficie y otras moléculas, es decir, sensibilizar la superficie¹⁰, para posteriormente enlazar estructuras orgánicas a las moléculas previamente adheridas a la superficie.

Esencialmente se requería la caracterización para observar si la superficie había sido sensibilizada, para lo cual se utilizó la técnica de observación del ángulo de contacto y la variación de la tensión superficial.

Para observar el enlace de moléculas orgánicas se utilizó la técnica de reflectancia de rayos X¹⁹, así como espectroscopía de electrones (XPS) y microscopía de fuerza atómica. Estos ensayos se realizaron en la Universidad de Costa Rica, también mediante cooperación en otros laboratorios internacionales y como corroboración en el microscopio de fuerza atómica del Instituto Tecnológico.

En cuanto a la caracterización eléctrica, se utilizaron muestras modificadas y no modificadas (sujetas al proceso de limpieza), a las cuales se les depositó los electrodos mediante una técnica de evaporación en una cámara de vacío y luego analizadas en el Instituto Tecnológico.

En todos los casos, las mediciones representativas corresponden a un comportamiento estadístico, dado mediante el análisis de la reproducibilidad de las mediciones.

Resultados

Esencialmente, este proyecto de investigación pretendía generar estructuras de moléculas que contemplan una cola de unión (que favorece la unión con la superficie de Silicio, una columna (con propiedades características) y una cabeza, a la cual pueden adherirse diferentes moléculas¹⁶ (Figura 1)

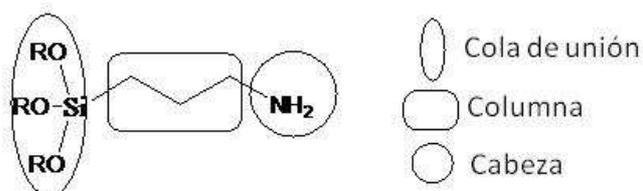


Figura 1: Esquema de la estructura molecular investigada

Basados en este propósito, se seleccionan diferentes moléculas, tal que se obtenga la estructura y prometa propiedades interesantes, como su comportamiento eléctrico. Uno de los principales factores que se tomaron en cuenta es el hecho de que las moléculas seleccionadas puedan manipularse químicamente para adaptarse a las necesidades, por ejemplo, cambiar los grupos terminales¹⁷ o favorecer la conducción eléctrica (Figura 2).

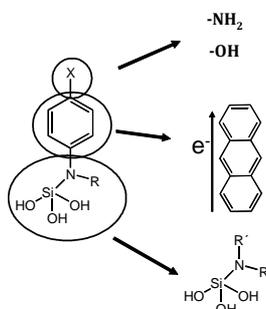


Figura 2. Ejemplo de un "Silanetriol" utilizado como molécula de anclaje

Para anclar una molécula a una oblea de Silicio se requiere que la superficie esté limpia y ordenada a escala atómica. Es por ello que se seleccionan obleas de Silicio orientadas en los planos $\langle 100 \rangle$ o $\langle 111 \rangle$. Sin embargo, debido a la exposición a las condiciones ambientales, principalmente en nuestro país, se forma una capa de óxido de Silicio, de unos cuantos nanómetros de espesor, pero lo suficientemente importante como para entorpecer el anclaje de las moléculas y alterar las propiedades eléctricas del Silicio. Esta capa debe ser removida.

En síntesis, el proyecto consiste en generar nuevas moléculas de anclaje, estudiar posibles moléculas orgánicas como columnas, así como la posibilidad de

seleccionar la cabeza de la estructura, con el propósito de estudiar, en proyectos futuros, diferentes posibilidades para adherir nanopartículas. Sin embargo, se requiere una superficie limpia, en donde se favorezca los enlaces con el Silicio.

Durante la ejecución del proyecto, se han alcanzado principalmente los siguientes resultados:

En el ámbito general:

1. Implementación del método de sensibilización de superficies: En la Escuela de Química de la Universidad de Costa Rica se ha logrado alcanzar gran experiencia en la sensibilización de superficies, uno de los campos en los que se está invirtiendo recursos e investigación a nivel mundial. Se logró desarrollar varias metodologías: mediante la utilización de moléculas de cloro y de moléculas de hidrógeno. Ambos métodos se encuentran en la literatura^{6,25}, sin embargo, dependen de varias variables que deben ser controladas en forma adecuada. Para el desarrollo del método se requirió la adquisición de equipo experimental especial, como lo fue una *caja seca* de características sobresalientes.
2. Síntesis de moléculas de anclaje: Se sintetizaron varias moléculas, específicamente cinco estructuras (protegidas con derechos de autor en la UCR), las cuales presentan características específicas en la modificación de la superficie de Silicio. Algunas de ellas presentan características de alta pureza y además de una excelente reproducibilidad. En otros casos las moléculas están presentes pero en pequeñas cantidades y con algunas impurezas. Las moléculas estas basadas en silantrioles, estructuras que contienen Silicio y a las cuales se le puede promover el desplazamiento de algunas de sus componentes para adherirse o atrapar otras moléculas.

La escogencia de las moléculas se basó en la posibilidad de deslocalización de los electrones debido a enlaces del tipo Si-N, los cuales en unión a otras estructuras (aromáticas) podrían resultar en buenos conductores de la electricidad.

Para la síntesis de estas moléculas se aprovechó la experiencia de varios investigadores de la Escuela de Química de la Universidad de Costa Rica.

3. Anclaje de moléculas orgánicas sobre la superficie: Se implementó un método para adherir las diferentes moléculas orgánicas a la superficie sensibilizada de Silicio, el cual abre la posibilidad de unir, indirectamente, nanopartículas al sustrato de Silicio. Estas moléculas fueron caracterizadas principalmente mediante Resonancia Magnética e Espectroscopia Infrarroja³.

En cuanto a la participación del ITCR

4. Se ha participado en el estudio del estado del arte de todas las etapas, con el propósito de conocer el campo y tener la posibilidad de generar ideas o analizar críticamente los resultados.
5. Se ha participado en una amplia capacitación en la técnica de difracción de rayos X: Se asistió a varios cursos de capacitación en la técnica de difracción de rayos X, algunos impartidos por expertos internacionales que visitaron nuestro país, así como también se realizó una estancia en el Laboratorio Angstrom, en la Universidad de Uppsala, Suecia.

Además se participó en la capacitación para el uso del Microscopio de Fuerza Atómica (AFM).

Como resultado de estas capacitaciones, se realizaron diferentes análisis para este proyecto de investigación, en los cuales se trabajó con difracción de polvo, la técnica de reflexión de rayos X (utilizando el equipo de difracción de la Escuela de Química de la Universidad de Costa Rica y uno de los equipos de el Laboratorio Angstrom, además del análisis de gran cantidad de muestras mediante la técnica de AFM, mediante un equipo similar al recientemente adquirido en el Instituto Tecnológico de Costa Rica (Figura 3 y 4) y el análisis mediante reflectancia de rayos X²⁰.

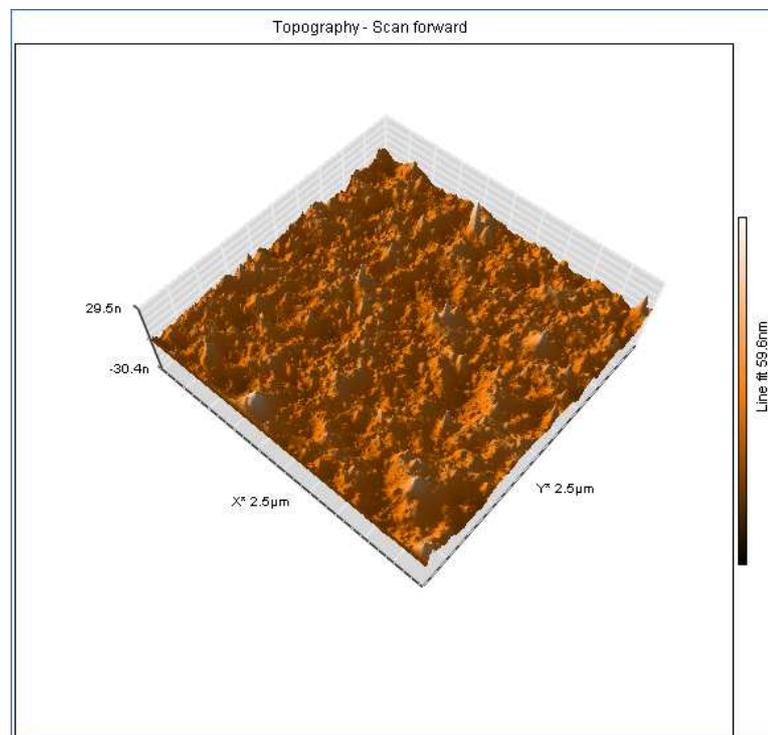


Figura 3: Micrografía mediante la técnica de AFM

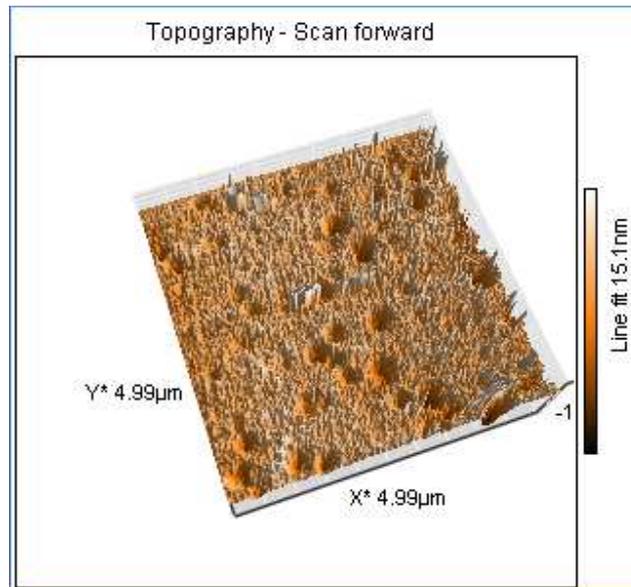


Figura 4: Muestra de Si con molécula de Cobre

En la figura 5 se observa como el tratamiento de limpieza atacó la superficie, por lo cual se debió hacer correcciones para el mejoramiento en la limpieza de las superficies

6. Se planteó un proyecto de graduación, en el cual se participó como tutor en un trabajo titulado "*Caracterización eléctrica y topográfica de moléculas de octanoato de cobre (II) auto-ensambladas sobre obleas de silicio*", el cual se inscribió en la Escuela de Ciencia e Ingeniería de Materiales.

Este trabajo tuvo además la participación de otros investigadores del Instituto Tecnológico, específicamente de la Escuela de Ingeniería en Electrónica y de Ciencia e Ingeniería de Materiales, sin embargo, la dirección principal estuvo a mi cargo.

7. Se participó como tutor en una tesis para obtener el grado de Maestría en Química, tesis realizada en la Universidad de Costa Rica, en la que se desarrollaba el tema de la síntesis de nanopartículas a través de la técnica de electrólisis y su respectiva caracterización: estudio de fases, estructura y microestructura. Además, en la Universidad de Costa Rica, también se está actualmente participando como tutor en una tesis del programa de Maestría en Química, en la que se desarrolla el estudio de las moléculas de anclaje.
8. Se realizaron mediciones de conductividad mediante corriente continua: Se caracterizaron eléctricamente muestras de Silicio modificadas mediante la técnica de medición de 4 puntas, en las que también se participó en la gestión para que la Escuela de Física del ITCR contara con parte del equipo necesario para realizar estas mediciones.

Para realizar las mediciones se diseñó un portamuestras, con el propósito de asegurar la repetitividad y confiabilidad de los ensayos (Figura 5)

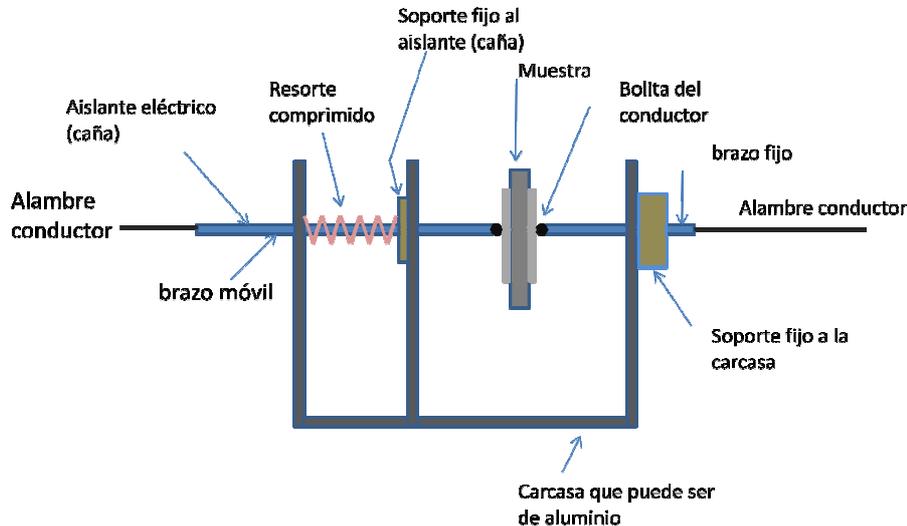


Figura 5: Portamuestras diseñada para realizar las mediciones en corriente continua.

Para realizar las mediciones, se participó en la preparación de las muestras, las cuales requirieron la deposición de electrodos mediante la técnica de deposición física de vapor (PVD), la cual se realizó mediante la colaboración del Centro de Investigación en Ciencia e Ingeniería de Materiales (CICIMA), ubicado en la Escuela de Física de la Universidad de Costa Rica.

Utilizando el método de "sándwich" Se depositó electrodos de Cromo, pues en la literatura se encuentra que las partículas son grandes, lo que favorecería, en teoría, que el metal no estuviese en contacto directamente con el Silicio. Cada muestra contaba con cuatro electrodos, lo que permitió la corroboración estadística de los resultados (Figura 6)..

Los resultados experimentales muestran que la conductividad medida, para las muestras modificadas y no modificadas, se encuentra en el orden de magnitud reportado por el fabricante para las obleas utilizadas, lo que hace sospechar que existen regiones en las cuales no hay moléculas orgánicas ancladas Este resultado se complementa con otros resultados obtenidos con otras técnicas, como el XPS, el cual muestra un porcentaje de cobertura inferior al 70 %.

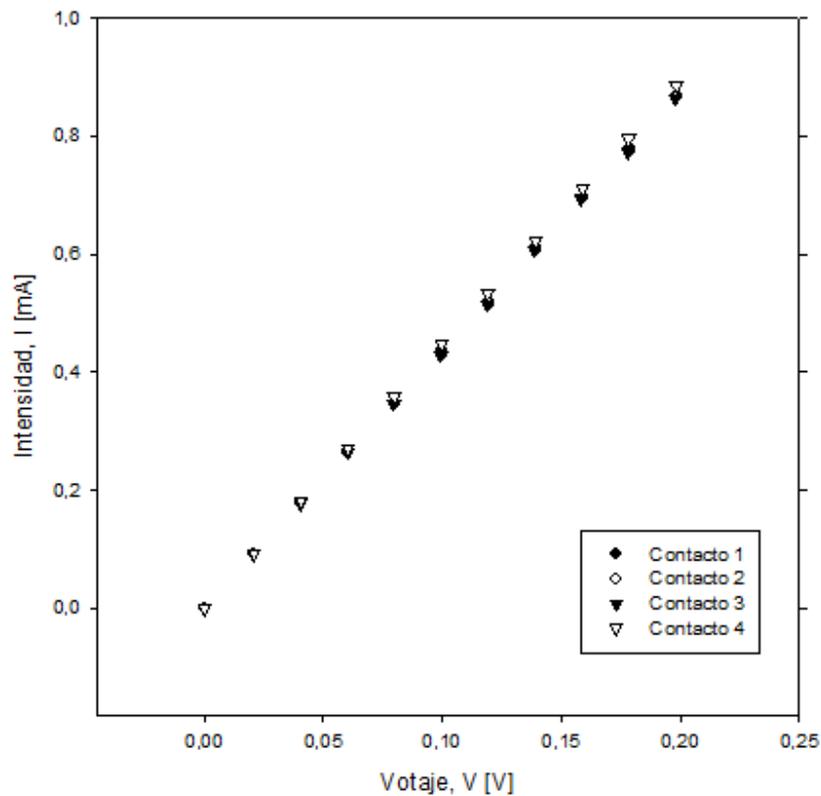


Figura 6: Curvas características para una muestra particular medida en cada uno de los contactos.

La conductividad de las muestras de Silicio sin modificar, fue medida también mediante el método de van der Pauw⁵, obteniéndose resultados dentro del mismo orden de magnitud.

- Se trabajó en la calibración y montaje del diseño experimental para la utilización del *potenciostato/galvanostato*, instrumento perteneciente a la Escuela de Ciencia e Ingeniería de Materiales, el cual puede utilizarse para la caracterización electroquímica de las muestras.

Básicamente, la hipótesis para la utilización de esta técnica², específicamente la *impedancia compleja*, consistía en que quizás podría ser posible observar las contribuciones de la conductividad debido a los electrodos (comportamiento metálico), al Silicio (comportamiento semiconductor) y a la estructura molecular anclada en la superficie de Silicio (comportamiento eléctrico no determinado). De ser posible observar diferencias en la respuesta a los estímulos con corriente alterna (diferentes fases), podría determinarse la presencia de todas las capas mediante un diagrama de Nyquist.

Inicialmente se trabajó con el estudio del equipo: estudio de los manuales, la configuración experimental, la calibración y la medición de las muestras (Figura 7).

Para calibrar el equipo se utilizó una celda, complementaria al equipo, la cual mostró resultados satisfactorios. Para corroborar la medición en muestras diferentes a la celda de calibración se diseñó un circuito en un tablero de prototipos, el cual tenía elementos semejantes a los de la celda de calibración. Los resultados experimentales fueron totalmente correctos y equivalentes a la celda de calibración (Figura 8). Sin embargo, al utilizar el diseño experimental en las muestras modificadas, no se pudo observar diferenciación tal que corroborara la presencia de las moléculas orgánicas ancladas en la superficie. Este resultado es de esperar, pues se tenía seguridad que las moléculas de Cromo estaban en contacto con la superficie de Silicio.

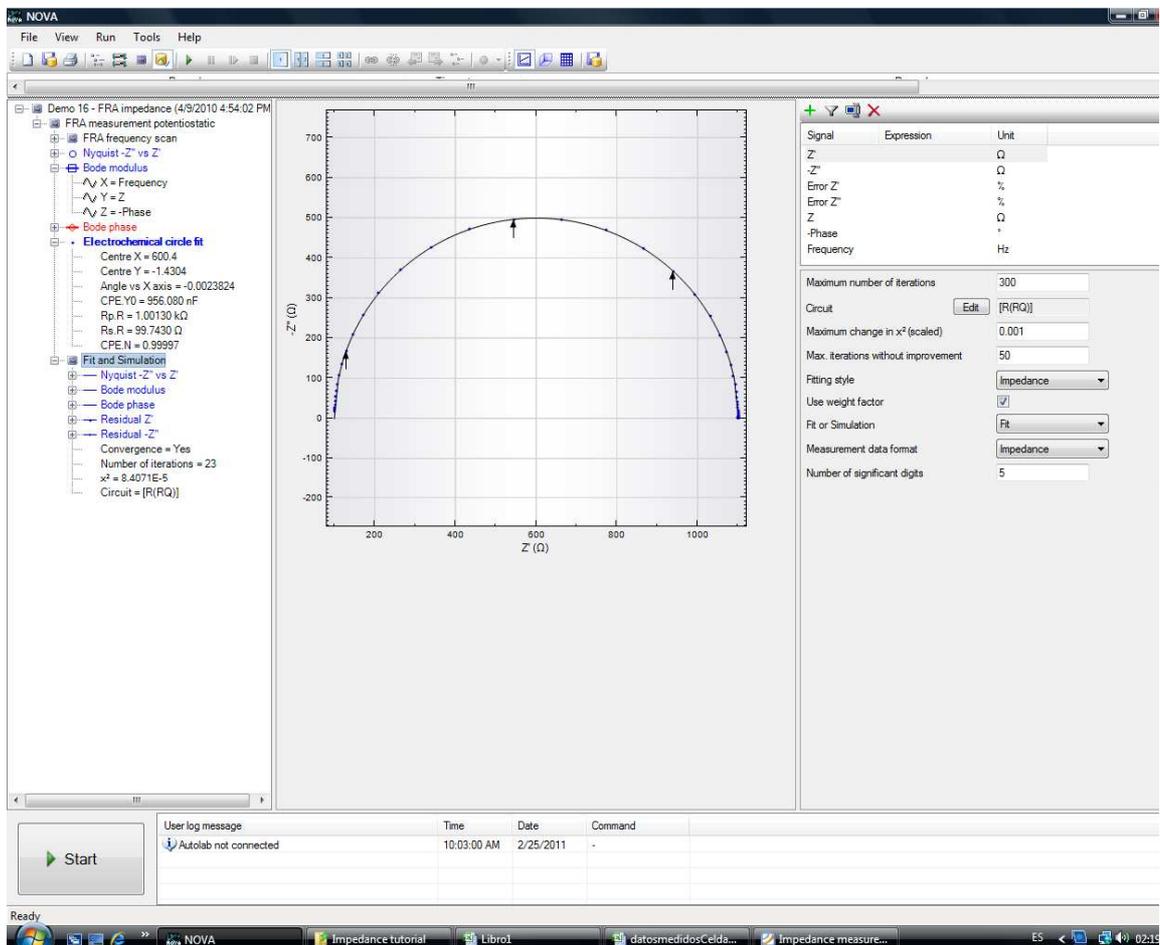


Figura 7: Software utilizado para la medición de la impedancia de las muestras. Se muestra el análisis de la medida en la celda de calibración.

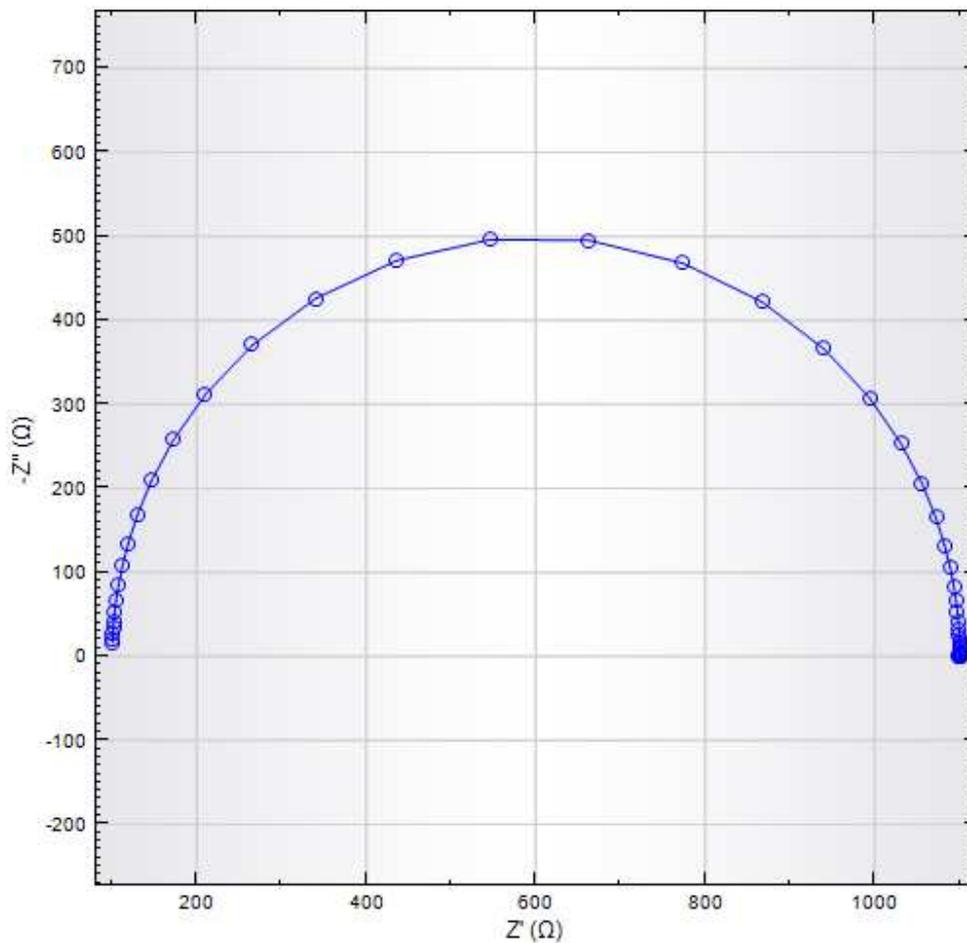


Figura 8: Diagrama de Nyquist para modelo de celda electroquímica realizado en tablero de prototipos y medido en equipo AutoLab (Escuela de Ciencia e Ingeniería de Materiales).

10. Se implementó el método de Warren-Averbach^{23,24}, el cual se utiliza para el estudio de los perfiles de los patrones de difracción de rayos X. El método requiere del estudio del análisis de Fourier y su implementación en algún software de análisis. En nuestro caso se ejecutó mediante el uso de EXCEL, Mathcad o Matematica. En este método se trata el patrón de difracción total, como resultado del producto de la convolución de la contribución del instrumento y de la propia muestra. Lo importante de esta convolución, es que puede relacionarse con el tamaño del cristalito, el cual prácticamente corresponde al tamaño de grano en las muestras de polvo nanométrico⁹.

Este método lo utilizamos para encontrar una distribución del tamaño de partícula en muestras de polvo sintetizadas en la Escuela de Química de la UCR (Figura 9).

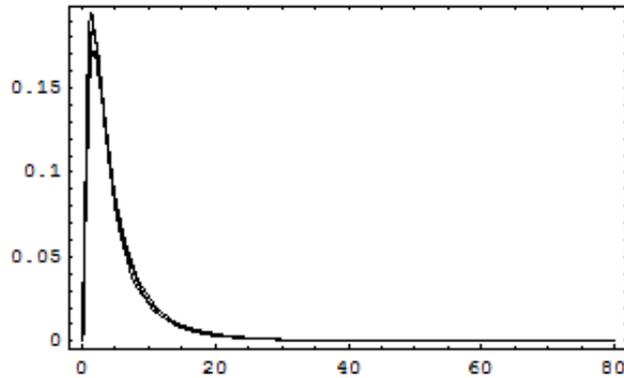


Figura 9: Distribución log-normal calculada a partir de datos experimentales de muestras de polvo de tamaño nanométrico, mediante el método de Warren-Averbach.

11. Como consecuencia del desarrollo del trabajo en el área de los materiales se ha fortalecido la relación con la Escuela de Química de la Universidad de Costa Rica, así como el Centro de Investigaciones en Ciencia de Materiales (CICIMA), como producto actualmente se está gestionando la propuesta de nuevos proyectos de investigación dentro de los cuales se está concretando la presentación de una propuesta para sintetizar y caracterizar grafeno, así como una propuesta de trabajo de graduación en el campo de la caracterización de superficies por reflexión de rayos X, en el cual participará un estudiante de la Escuela de Ciencia e Ingeniería de Materiales del Instituto Tecnológico de Costa Rica.

10. Se participó con estudiantes en la preparación de ponencias en los congresos nacionales sobre materiales, realizados en la Universidad de Costa Rica.

Se tuvo participación mediante el entrenamiento de estudiantes del programa de Maestría en Química, de la Universidad de Costa Rica, a través de varias charlas en el curso de Cristalografía.

Discusión y conclusiones

Luego de finalizado el periodo de ejecución del proyecto, podemos establecer algunas conclusiones generales:

Se ha desarrollado experiencia en el campo de la nanotecnología, específicamente en la síntesis y caracterización de los materiales. Este fue el objetivo primordial que justifica el apoyo de la empresa INTEL.

La caracterización de materiales de tamaño nanométrico requiere de la inversión de equipo adecuado, además de la especialización de personas para poder medir las diferentes variables e interpretar las observaciones experimentales.

Se ha logrado trabajar conjuntamente con un grupo de investigación interuniversitario, el cual ha financiado, en parte, su investigación por medio de la consecución de fondos externos.

Se ha tenido gran participación en entrenamientos sobre el uso de la técnica de difracción de rayos X, lo que también ha llevado al estudio de temas relacionados, los cuales tienen un ámbito de aplicación más allá de la aplicación en rayos X.

Se ha cumplido adecuadamente con el propósito de contribuir al establecimiento de una generación de científicos jóvenes con destrezas en temas que actualmente se consideran de gran transcendencia, como lo es la nanotecnología.

Como consecuencia de la ejecución de este proyecto de investigación se resaltan algunos aportes importantes:

- Fortalecer la cooperación interuniversitaria mediante la realización de proyectos de investigación en el campo de la nanotecnología.
- Establecer los procedimientos básicos para la síntesis de moléculas orgánicas.
- Desarrollar pericia en algunas técnicas de caracterización de materiales.
- Incorporar estudiantes en las labores de investigación.
- Vincular la actividad de investigación que se realiza en el ITCR con otras universidades estatales y otras instituciones públicas.
- Estrechar vínculos con investigadores nacionales e internacionales por medio de la participación en actividades científicas realizadas en el ámbito nacional.
- Contribuir a la resolución de necesidades planteadas por otras entidades internas o externas a la institución.
- Contribuir al desarrollo de la investigación científica de la Escuela de Física del ITCR.

Recomendaciones

El proyecto contempla varios estados: la limpieza de la superficie, la funcionalización de la superficie, la síntesis de moléculas de anclaje y la caracterización.

En cuanto al anclaje de las moléculas, los resultados experimentales mostraron que la presencia de moléculas orgánicas ancladas a la superficie de Silicio no es homogénea. En este sentido, se debe seguir trabajando con el propósito de mejorar la cobertura. En la literatura también se reporta este tipo de fenómeno, relacionado directamente con la aglomeración de las moléculas y la presencia de impurezas.

Con respecto a la caracterización, se presentaron varios problemas para la detección de la capa orgánica, así como la medición de las propiedades eléctricas a través de las moléculas orgánicas. Se podrían utilizar otras técnicas que permitan asegurar la presencia de la capa orgánica y determinar apropiadamente las propiedades eléctricas. Sin embargo, la metodología empleada daría mejores resultados si se mejorara la cobertura de la capa orgánica sobre la superficie.

Sobre la síntesis de nuevas moléculas de anclaje, el tema sigue abierto, lo que hace posible la realización de trabajos de graduación conexos a esta área.

También, se plantea trabajar en el área de la modificación de la cabeza de la molécula, lo que permitiría la incorporación de nanopartículas en la superficie y la posibilidad de observar fenómenos interesantes.

Agradecimientos

Los investigadores deseamos agradecer el apoyo que hemos recibido, durante el periodo de realización del proyecto, por parte de la Vicerrectoría de Investigación y Extensión, particularmente de su Dirección de Proyectos, la Vicerrectoría de Docencia, la Escuela de Física del Instituto Tecnológico de Costa Rica (ITCR), así como de la Escuela de Física de la Universidad de Costa Rica, a través del Centro de Investigación en Ciencia e Ingeniería de Materiales (CICIMA) y especialmente la *Escuela de Química de la Universidad de Costa Rica*, a través de la Sección de Química Inorgánica y el Centro de Electroquímica y Energía (CELEQ), quienes son los gestores y coordinadores generales del proyecto.

Referencias

1. Allongue, P., Henry de Villeneuve, C., Pinson, J. et al. (1998). Organic monolayers on Si(111) by electrochemical method. *Electrochimica Acta*, 43 (19-20), 2791-2798.
2. Allongue, P., Henry de Villeneuve, C., & Pinson, J. (2000). Structural characterization of organic monolayers on Si<111> from capacitance measurements. *Electrochimica Acta*, 45, 3241-3248.
3. Barrelet, C. J., Cheng, J., Hunt, T. P., Quate, C. F., & Chidsey, C. D. (2001). Surface Characterization and Electrochemical Properties of Alkyl, Fluorinated Alkyl, and Alkoxy Monolayers on Silicon. *Langmuir*, 17, 3460-3465.
4. Buriak, J. M. (2002). Organometallic Chemistry on Silicon and Germanium Surfaces. *Chemical Reviews*, 102(5), 1271-1307.
5. De Virles, D. K., & Wieck, A. D. (1995). Potential distribution in the van der Pauw technique. *Am. J. Physics*, 63 (12).
6. Dumas, P.; Chabal, Y. J.; & Jakob, P. (1992). Morphology of hydrogen-terminated Si(111) and Si(100) surfaces upon etching in HF and buffered-HF solutions. *Surface Science*, 269/270, 867-878.
7. Haick, H., & Cahen, D. (2007). Contacting Organic Molecules by Soft Methods: Towards Molecule-Based Electronic Devices. *Accounts of chemical research*, 41(3), 359-366.
8. Holche, T.; Bolhme, R.; Gerlach, J.W.; Frost, F.; & Zimmer, K. (2004) *Nano Lett*, 4, 895-897.
9. Krill, C. E., & Birringer, R. (1998). Estimating grain-size distributions in nanocrystalline materials from X-ray diffraction profile analysis. *Philosophical Magazine A*, 77(3), 621-640.
10. Lua, Y.-Y.; Fillmore, W. J. J.; Yang, L.; Lee, M. V.; Savage, P. B.; Asplund, M. C.; & Linford, M. R. (2005). First reaction of a bare silicon substrate with acid chlorides and a one-step preparation of a acid chloride terminated monolayers on scribed silicon. *Langmuir*, 21(6), 2093-2097.
11. Mann, S. *Biom mineralization* (2001). *Principles and Concepts in Bioinorganic Materials Chemistry*. Oxford, U. K.: Oxford University Press.
12. Montero, M.L., H.W. Roesky, & I. Usón, *Angew* (1994). *Chem. Int. Ed. Engl.*, 33, 2103.
13. Montero, M.L., A. Voigt, H.W. Roesky, M. Teichert, & I. Usón, *Angew* (1995). *Chem. Int. Ed. Engl.*, 34, 2504.

14. Montero, M. L., H. Wessel, H.W. Roesky, M. Teichert, & I. Usón, *Angew (1997). Chem. Int. Ed. Engl.* 36, 629.
15. Montero, M.L., J.G. Rodríguez, A. Sáenz V.M., & Castaño (2006). *J. Mater. Sci. and Letters*, 41, 2141.
16. Murugavel. R., Chandrasekhar, V., Voigt, A., Roesky, H., Schmidt, H., & Noltemeyer M.(1995). New Lipophilic Air-Stable Silanetriols: First Example of an X-ray Crystal Structure of a Silanetriol with Si-N Bonds. *Organometallics*, 14, 5298-5301.
17. Pang, Q; Zhao, L, & Cai,Y. (2005). *Chem. Mater.*, 17, 5263-5267.
18. Prabusanka, G., Murugavel, R., & Butcher, R. J. (2004) Stabilization of Organosilanetriols in Amine Matrices: Trapping Intermediates between RSi(OH)^3 and $(\text{RSiO}_3)^{3-}$ Anions. *Organometallics*, 23, 2305-2314.
19. Tidswel, M., Ocko, I, B., & Pershan, P. S.(1990). X ray specular reflection studies of silicon coated by organic monolayer (alkylsiloxanes). *Physical Review B*, 41(2).
20. Tidswell, I. M., Ocko, B. M., Pershan, P. S., et al. (1990). X-ray specular reflection studies of silicon coated by organic monolayer (alkylsiloxanes). *Physical Review B*, 41(2), 111-1128.
21. Tidswell, I. M., Rabedeau, T. A, & Pershan, P.S. (1991). Wetting films on chemically modified surfaces: An x-ray study. *Physical Review B*, 44(19).
22. Salomon, Adi, Cahen, D, Lindsay, S. et al (2003). Comparasion of Electronic Transport Measurements on Organic Molecules. *Advanced Materials*, 15(22), 1881-1890.
23. Warren, B. E., & Averbach, B. L. (1950). The Effect of Cold-Wok Distortion on X-Ray Patterns. *J. App. Phys.*,21, 595-599
24. Warren, B. E., & Averbach, B. L. (1952). The Separation of Cold-Work Distortion and Particle Size Broadning in X-Ray Patterns. *Journal of Applied Physics*, 23(4), 497-498.
25. Fenner, D. B., Biegelsen, D. K, & Bringans, R. D (1989). Silicon surface passivation by hydrogen termination: A comparative study of preparation methods. *J. Appl. Phys.*, 66(1), 419-424.