

Se busca realizar un modelo teórico sobre la Transferencia de Energía (TE) en nanopartículas (NPs) de polímeros conjugados dopadas con colorantes, bajo excitación óptica. Dichos polímeros son materiales amorfos altamente heterogéneos. Debido a esto, hacer un modelo teórico analítico de la situación acarrea dificultades a veces imposibles de sobrellevar. Por esto se optó por modelar el sistema mediante Simulaciones Computacionales del tipo Montecarlo que tienen en cuenta la difusión del excitón a través de la NP, la probabilidad de decaimiento del excitón y la probabilidad de TE. Para contrastar los resultados de las simulaciones se realizaron experimentos para determinar la eficiencia de desactivación de fluorescencia de NPs de F8BT dopadas con **X** y excitadas ópticamente, y también se midió mediante Microscopía de Fuerza Atómica la distribución de tamaños de dichas NPs (fig 1). Se midió la eficiencia de desactivación mediante Espectroscopía de Fluorescencia y se obtuvo que la eficiencia de desactivación para **X** dopantes en NPs de F8BT se ajusta muy bien a los resultados experimentales cuando se ajustan determinados parámetros de la simulación (camino libre medio, largo de un paso de la caminata aleatoria) (fig 2).