

Energy transfer in conjugated polymer nanoparticles:
modeling and validation with experimental data

Rodrigo A. Ponzio^{1,2,*}, Franco N. Bellomo^{1,†}, Lucas E. Bellomo^{1,‡}, Daniel A. Bellomo³, Carlos A. Chesta², Rodrigo E. Palacios², Dolores Rexachs⁴

CONICET

GOBIERNO DE LA
PROVINCIA DE
CORDOBA

Ministerio de
CIENCIA Y
TECNOLOGÍA

A GENCIA

1 Dpto. Física, FCEFQyN, UNRC. 2 Dpto. Química, FCEFQyN, UNRC. 3 UTI, UNRC, 4 HPC4EAS, UAB *rponzio@exa.unrc.edu.ar, †fnbellomo@gmail.com, †lbellomo@gmail.com

1 Introduction

Los polímeros conjugados son macromoléculas compuestas por monómeros que presentan enlaces simples y múltiples alternados. Dentro de la cadena existen segmentos (cromóforos) de longitud variable en donde los electrones \pi se encuentran deslocalizados. Debido a la heterogeneidad estructural de estos materiales, los procesos de transferencia de energía (TE) entre cromóforos y dopantes son altamente complejos. Se presenta la validación del caminante aleatorio (en 3D) del modelo computacional para la TE en nanopartículas (NPs) de polímeros conjugados. Este modelo se basa en simulaciones de Monte Carlo y tiene en cuenta varios parámetros, siendo los más importantes la distancia media recorrida (D) y la longitud de un paso de la caminata aleatoria (epsilon) realizada por el excitón. Estos parámetros son de gran importancia debido a la dificultad para obtenerlos de forma experimental pero ademas, al existir una forma analítica de estos, nos posibilita validar el modelo.

debido a la	dificultad	l para	obtenerlos	de forma	experimental	pero	ademas,	al	existir	una	forma	analítica	de est	os, nos	posibilita	validar	el	modelo.
2 Camina	nte Aleat	torio							3 Tau	D								
Texto de prueba									Texto de prueba									
										-								
									5 Res	ultad	dos							
									Texto de									
										o pros								
1																		
T	L																	
Texto de p	orueba																	
C. Consolina																		
6 Conclusiones Texto de prueba											7 Bibliografia y agradecimientos Texto de prueba							
lexto de prue	Texto de prueba										lex	lexto de prueba						