

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

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 (ϵ) 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.

2 Caminante Aleatorio

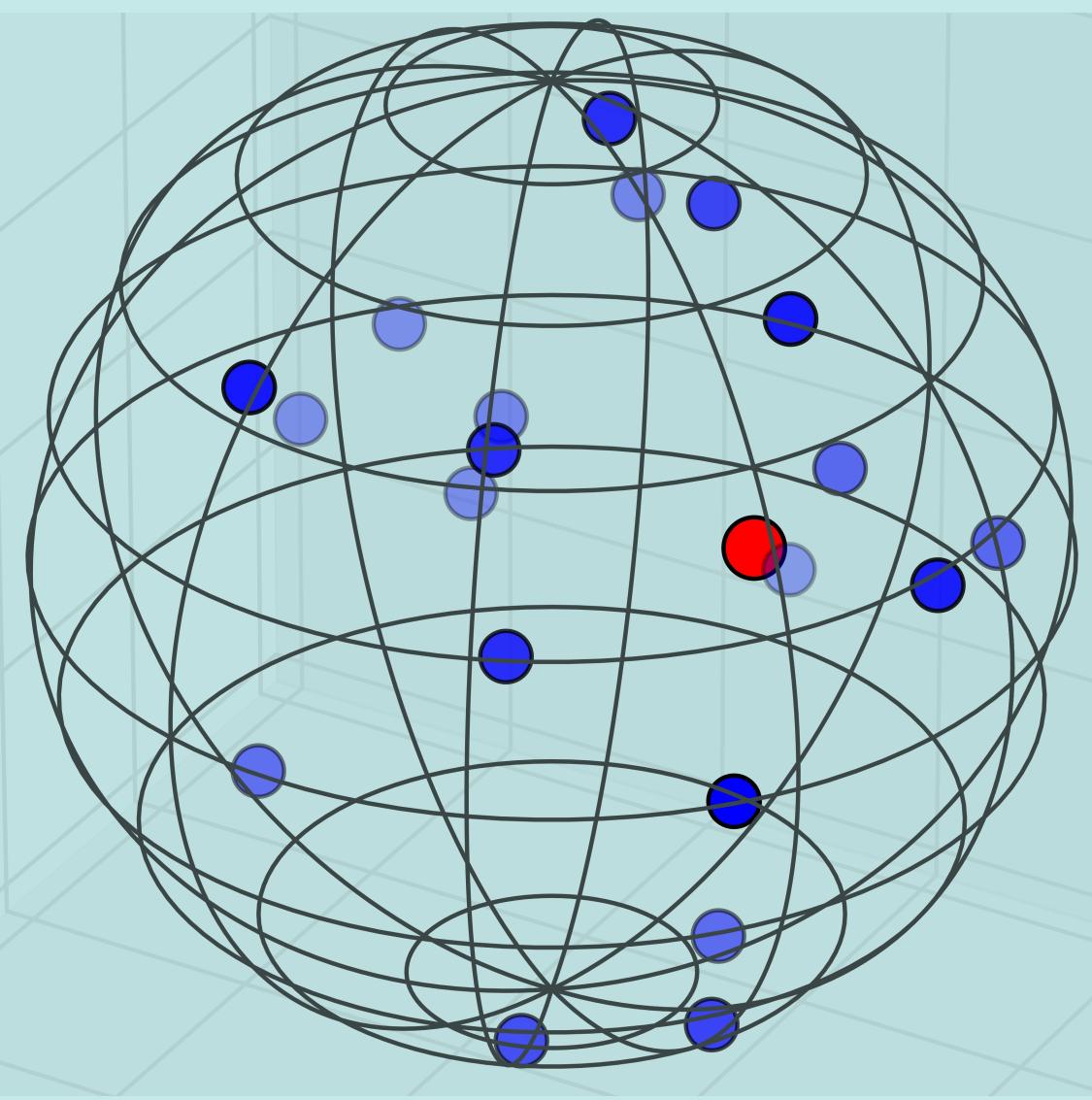


Fig. 1
Generación de dopantes y
excitón en la NP

Ademas, la taza de decaimiento (radiativo o no) es:

$$k_{ET} = \tau_D^{-1} \quad (2)$$

La probabilidad de decaimiento (radiativo, no radiativo o por TE) es:

$$p = 1 - e^{(k_{ET} + k'_{ET})\Delta t} \quad (3)$$

A continuación, se describe el modelo y el método de la simulación: Un excitón es generado de forma aleatoria en la NP. Despues de un intervalo de tiempo Δ_t el excitón genera un paso aleatorio ϵ . El número promedio de pasos N que es necesario para que el excitón viaje una distancia igual al camino libre medio (D) se define como $N=D/e$. El tiempo δ_t de cada paso esta relacionado con el tiempo de vida media de fluorescencia como $N\delta_t=\tau_{[D]}$. En cada paso se calcula the energy transfer rate constant (K_{et}) que depende fuertemente de la distancia entre el excitón y cada acceptor (R_j) como:

$$k'_{ET} = \frac{\#dye}{\sum_{j=1}^6} \left(\frac{R_0}{R_j} \right)^6 \quad (1)$$

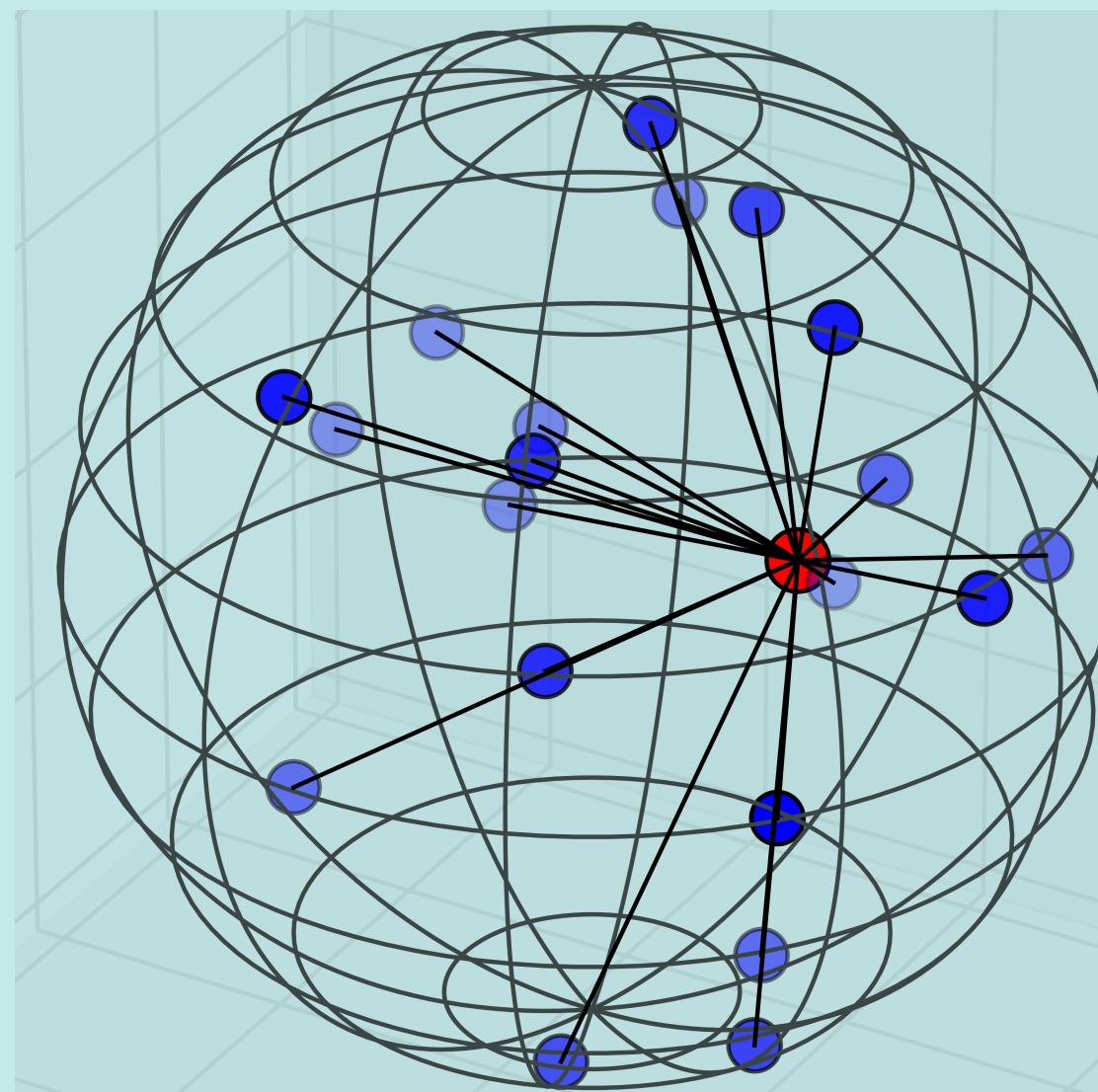


Fig. 1
Generación de dopantes y
excitón en la NP

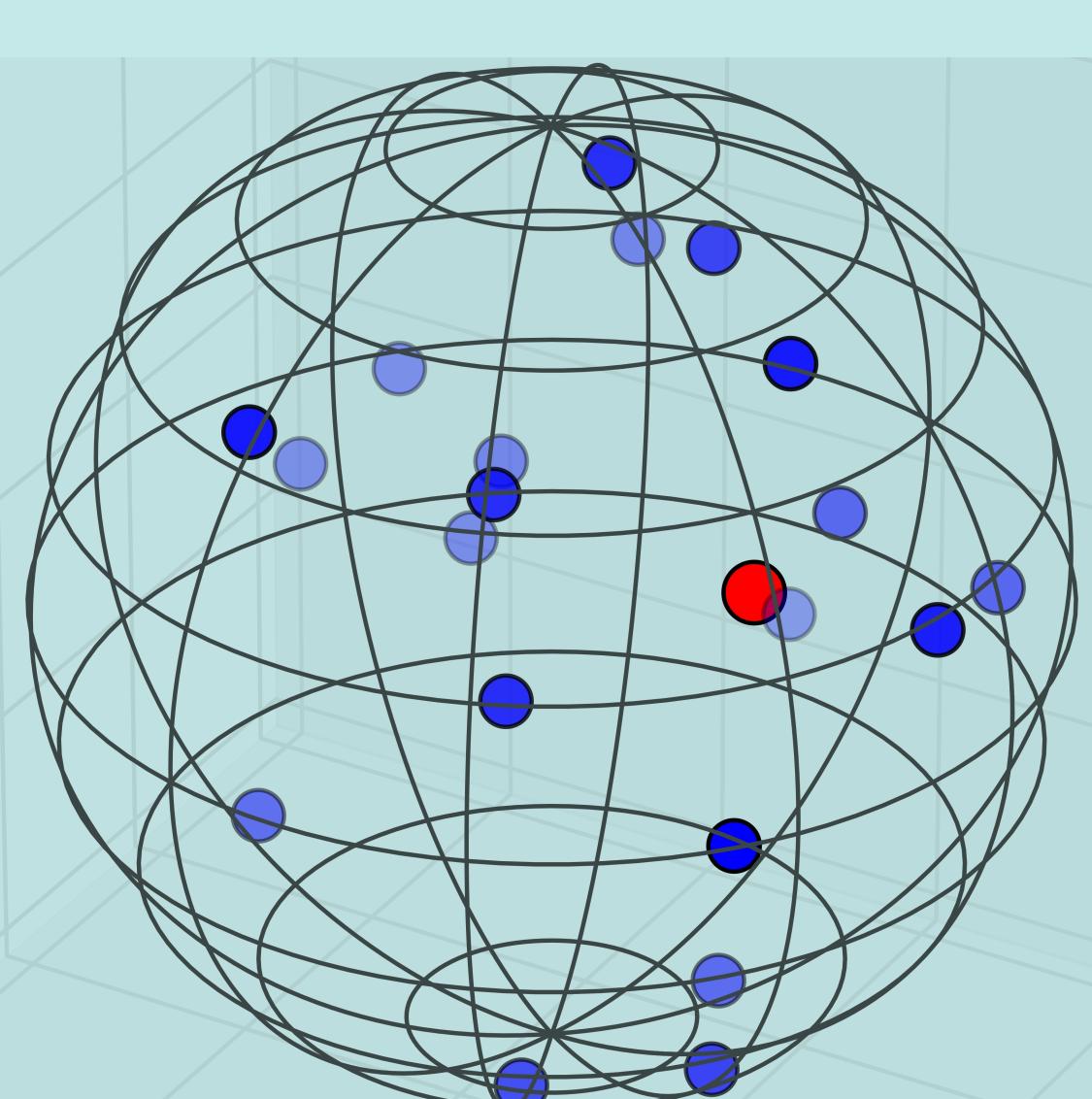


Fig. 5
Paso aleatorio del excitón.

- 1- Se generan X dopantes distribuidos uniformemente sobre la NP, donde X viene dado por la densidad de dopaje de la NP. El excitón se genera con la misma probabilidad en toda la NP (Fig. 1).
- 2- Se calcula la probabilidad de desexcitación del excitón (p) y se lo compara con un número aleatorio.
- 3- Si $p > \text{aleatorio}$, se genera otro aleatorio(0,1) para determinar si el excitón murió por TE o decaimiento.
- 4- Si $p < \text{aleatorio}$, el excitón realiza un paso aleatorio ϵ (Fig 3) y se vuelve al paso 2 hasta que eventualmente, termina decayendo.

4

Texto de prueba

3 Tau_D

Texto de prueba

5 Resultados

Texto de prueba

6 Conclusiones

Texto de prueba

7 Bibliografia y agradecimientos

Texto de prueba