

杂质离子对有机共轭聚合物中极化子动力学性质的影响

刘俊娟 魏增江 常虹 张亚琳 邱冰

Dynamics of polarons in organic conjugated polymers with impurity ions

Liu Jun-Juan Wei Zeng-Jiang Chang Hong Zhang Ya-Lin Di Bing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 067202 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.067202

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.067202>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I6>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

共轭聚合物中均匀无序对极化子输运动力学的影响

[Effects of uniform disorder on polaron dynamics in conjugated polymers](#)

物理学报.2015, 64(6): 067201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.067201>

基于电子顺磁共振的 ZnTPP 激发态及其 TEMPO 各向异性的研究

[Study on the excited states of zinc porphyrinogen and anisotropy of 2,2,6,6-tetramethylpiperidinoxy by the technology of electron paramagnetic resonance](#)

物理学报.2014, 63(9): 097201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.097201>

功能层厚度对叠层有机电致发光器件出光性能影响的数值研究

[Influence of the functional layer thickness on the light output property of tandem organic light emitting diode: a numerical study](#)

物理学报.2013, 62(24): 247201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.247201>

基于连续性掺杂的高效全荧光白色有机电致发光器件的研究

[Highly efficient all fluorescent white organic light-emitting devices made by sequential doping](#)

物理学报.2013, 62(19): 197204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.197204>

链间耦合对极化子非弹性散射性质的影响

[The effect of interchain coupling on inelastic scattering of oppositely charged polarons](#)

物理学报.2013, 62(10): 107202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.107202>

杂质离子对有机共轭聚合物中极化子动力学性质的影响*

刘俊娟¹⁾ 魏增江²⁾ 常虹³⁾ 张亚琳³⁾ 邸冰^{3)†}

1)(河北师范大学附属民族学院, 石家庄 050091)

2)(石家庄理工职业学院, 石家庄 050020)

3)(河北师范大学物理科学与信息工程学院, 石家庄 050024)

(2015年11月27日收到; 2015年12月28日收到修改稿)

基于一维紧束缚 Su-Schrieffer-Heeger 模型, 采用分子动力学方法, 讨论了杂质势的强度和杂质之间的距离对电子和空穴极化子动力学性质的影响. 研究表明: 1) 当杂质势强度保持不变时, 两杂质离子之间的距离 (d) 在 2—16 个晶格常数变化时, 电子极化子的平均速度大于空穴极化子的平均速度, 这是由于电子、空穴极化子与杂质势的库仑作用不同而产生的差异, 同时极化子的平均速度随 d 的增加而增大; 若继续增加杂质离子之间的距离, 电子和空穴极化子的平均速度几乎保持不变, 仅有一些微小的振荡, 这是由于不同距离的杂质离子对电子和空穴极化子产生的势垒或势阱的叠加效果不同而引起的; 2) 保持两杂质离子之间的距离不变时, 随着杂质势强度的增大, 电子和空穴极化子的平均速度均减小, 且空穴极化子的平均速度减小趋势更明显.

关键词: 聚合物, 极化子, 分子动力学, 杂质离子

PACS: 72.80.Le, 71.38.-k, 71.15.pd, 71.55.-i

DOI: 10.7498/aps.65.067202

1 引言

有机共轭聚合物由于其高导电性和高发光效率^[1], 使得这种材料在光电器件方面有很广泛的应用, 例如发光二极管^[2]、场效应晶体管^[3]、太阳能电池^[4,5]等. 这类材料的准一维结构具有较强的电子-晶格相互作用, 在有机共轭聚合物中注入一个电子或空穴, 由于电子(空穴)与晶格的耦合作用, 诱导晶格产生局部畸变, 电子(空穴)在局部畸变势场中形成定域的束缚态, 即电子(空穴)极化子^[6]. 研究聚合物中极化子等非线性元激发的动力学性质是理解有机光电器件中光电转换过程的基础^[7]. 目前, 对有机共轭聚合物中极化子的动力学输运性质的研究已有很多工作^[8-11], 这些工作没有考虑

杂质势的影响. 但是, 一般的聚合物是含有杂质的, 而且杂质的浓度是不可忽略的, 这些杂质可能来自于交叉耦合、复杂的形态学缺陷或者外来的杂质. 因此, 研究杂质对有机共轭聚合物的影响具有实际意义.

An 等^[12]研究了场诱导的电荷极化子的钉扎效应, 初始极化子被一个吸引杂质所束缚, 当外电场的强度超过某一临界值时, 电荷极化子将离开杂质, 否则极化子将在杂质周围振荡; Lima 和 e Silva^[13,14]得到极化子和杂质碰撞后, 极化子通过杂质或被局域或被反射取决于杂质的有效势, 极化子和杂质之间是吸引还是排斥作用取决于电荷极化子和杂质(施主或受主)之间的作用. da Cunha 等^[15]研究了杂质在纳米石墨烯中对极化子动力学

* 国家自然科学基金(批准号: 11074064)、河北省自然科学基金(批准号: A2016205271)和河北省教育厅基金(批准号: ZD2014052, Z2014034)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dibing@mail.hebtu.edu.cn

的影响, 结果表明杂质的存在会明显改变与极化子结构相关的净电荷的分布, 外电场和杂质的相互作用对极化子的动力学有很大的影响. Ribeiro Junior 等^[16]认为在考虑杂质时, 双极化子之间、双极化子与极化子之间的散射过程对于光电器件的电致发光的理解起着重要作用. 这些研究主要是讨论外加电场参数的变化或单个杂质有效势的变化对极化子动力学性质的影响, 并没有具体研究多个杂质离子对电子和空穴极化子动力学性质的影响, 而在研究中发现, 多个杂质离子对有机共轭聚合物中电子和空穴极化子的平均速度的影响有所不同, 直接影响有机共轭聚合物中载流子的迁移率.

本文基于一维紧束缚 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型, 采用分子动力学方法^[17-19], 主要讨论两个格点杂质势的强度和杂质离子之间的距离对电子和空穴极化子动力学性质的影响. 研究发现, 在外场作用下, 当两杂质之间的距离不同或两个杂质势的强度变化时, 电子和空穴极化子与杂质作用后的平均速度是有差异的, 这为研究有机共轭聚合物中载流子的迁移率提供一定的理论基础.

2 理论模型和计算方法

有机共轭聚合物中加入杂质离子, 其体系理论模型的哈密顿为^[20]

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_n [t_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n)] \\
 & \times [e^{-i\gamma A(t)} c_{n+1}^+ c_n + \text{h.c.}] \\
 & + \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{M}{2} \sum_n \dot{u}_n^2 \\
 & + \sum_p V_p c_p^+ c_p, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中, t_0 是电子在近邻晶格之间的跃迁积分; α 为电子-晶格耦合常数; c_n^+ (c_n) 分别是第 n 个格点上电子的产生(湮灭)算符; K 是弹性系数; M 是原子晶格的质量; u_n 是第 n 个格点偏离等间距排列的晶格位移; $V_p = V_p \delta_{n,p}$, V_p 为格点 n 上杂质势的强度. 参数 $\gamma = ea/\hbar c$, e , a , c 分别是一个电子的电量, 晶格常数和光速. $A(t)$ 是电场的矢势, 其表达式为 $0 < t < T_c$ 时, $A(t) = -cE_0 t^2/2T_c$; 当 $T_c \leq t < T_{\text{off}}$ 时, $A(t) = -cE_0(t - T_c/2)$. $A(t)$ 与电场之间的关系是 $E(t) = -\partial_t A(t)/c$ ^[21]. 当 $e^{-i\gamma A(t)} = 1$ 时, (1) 式变为静态的理论模型.

体系电子波函数由电子本征值方程得到:

$$\begin{aligned}
 & - [t_0 - \alpha(u_n - u_{n-1})] \phi_{\mu,n-1} \\
 & - [t_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n)] \phi_{\mu,n+1} + V_n \phi_{\mu,n} \\
 = & \varepsilon_\mu \phi_{\mu,n}. \quad (2)
 \end{aligned}$$

晶格位形的方程为

$$\begin{aligned}
 & u_{n+1} - u_n \\
 = & - \frac{2\alpha}{K} \left[\sum_{\mu(\text{occ})} \phi_{\mu,n} \phi_{\mu,n+1} \right. \\
 & \left. - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{\mu(\text{occ})} \phi_{\mu,n} \phi_{\mu,n+1} \right], \quad (3)
 \end{aligned}$$

其中 ε_μ 是第 μ 个本征能量, $\phi_{\mu,n}$ 是本征波函数, N 为聚合物链长. 方程 (2) 和 (3) 自洽迭代求解, 从而得到静态的键结构 $\{u_n\}$ 和电子的波函数 $\phi_{\mu,n}$.

在动力学过程中, 体系含时电子波函数 $\Phi_{\mu,n}(t)$ 的演化遵从含时薛定谔方程,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{\mu,n}(t) = \sum_{n'} \mathbf{h}_{n,n'}(t) \Phi_{\mu,n'}(t), \quad (4)$$

其中, $\Phi_{\mu,n}(t)$ 可以在瞬时本征波函数这套完备的基矢上展开, 即 $\Phi_{\mu,n}(t) = \sum_{\nu} C_{\nu,\mu}(t) \phi_{\nu,n}(t)$. $\mathbf{h}_{n,n'}$ 是哈密顿矩阵, 其表达式为

$$\mathbf{h}_{n,n'} = \begin{cases} -[t_0 - \alpha(u_{n'} - u_n)], & n' = n \pm 1, \\ V_n \delta_{n,p1}, & n = p1, \\ V_n \delta_{n,p2}, & n = p2, \\ 0, & \text{other wise.} \end{cases} \quad (5)$$

晶格部分采用经典的处理方法, 遵从牛顿运动方程:

$$\begin{aligned}
 M\ddot{u}_n = & -K(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \\
 & + \alpha e^{-i\gamma A(t)} [\rho_{n+1,n}(t) - \rho_{n,n-1}(t)] \\
 & + \alpha e^{i\gamma A(t)} [\rho_{n,n+1}(t) - \rho_{n-1,n}(t)], \quad (6)
 \end{aligned}$$

其中, 密度矩阵元 $\rho_{n,n'}(t) = \sum_{\mu} \Phi_{\mu,n}^*(t) f_{\mu} \Phi_{\mu,n'}(t)$ 中的 $f_{\mu} (= 0, 1, 2)$ 是初始占据状态决定的函数. 为了防止系统突变, 动力学计算中采用线性电场, 形式为 $0 < t < T_c$ 时, $E(t) = \frac{E_0}{T_c} t$, 当 $T_c \leq t < T_{\text{off}}$ 时, $E(t) = E_0$, $T_c = 75$ fs 是缓慢加大电场持续的时间, $T_{\text{off}} = 800$ fs 是所加电场持续的时间. 计算中各参量取值^[22]: $t_0 = 2.5$ eV, $\alpha = 4.1$ eV/Å, $M = 1349.14$ eV·fs²/Å², $K = 21$ eV/Å².

3 结果与讨论

3.1 静态结果

选取由 $N = 200$ 个格点组成的聚合物链, 在聚合物链中心位置处加入一个杂质, 杂质势的强度分别为 $0, 0.4, 0.8$ eV. 图 1(a) 和图 1(b) 分别给出了杂质势对空穴和电子极化子晶格位形的影响. 由图 1(a) 可以看到, 随着杂质势强度的增加, 空穴极化子的晶格缺陷变深, 说明空穴极化子的局域性增强, 这是由于空穴极化子和杂质势之间是吸引相互作用, 使得空穴极化子束缚在杂质的附近. 而在图 1(b) 中随着杂质势的增加, 电子极化子的晶格位形只发生了平移, 其位形基本没有发生变化, 这是由于电子极化子和杂质势之间是排斥相互作用, 使得电子极化子远离杂质位置所导致的.

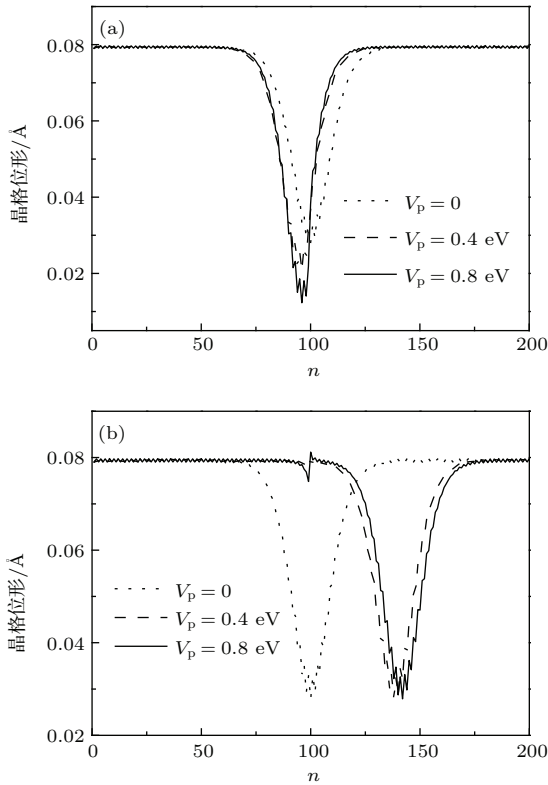


图 1 考虑杂质势后, 空穴极化子 (a) 和电子极化子 (b) 晶格位形的变化

Fig. 1. Lattice configuration as a function of the impurity potential for the hole polaron (a) and the electron polaron (b).

3.2 动力学结果

本部分主要研究两个杂质离子之间的距离和杂质势强度的变化对极化子动力学性质的影响. 选

取含有 200 个碳原子基团的聚乙炔链, 电场强度为 0.5 mV/Å, 此电场可使得电子和空穴极化子都能通过杂质离子区域. 初始时刻, 极化子位于第 170 个格点处, 在电场作用下极化子在链中由右至左被加速, 达到饱和速度后开始匀速运动, 并与杂质离子发生碰撞. 图 2 给出了两杂质离子相距 d 为 6 个晶格常数, 格点杂质势强度为 $V_{p1} = V_{p2} = 0.4$ eV, 电子和空穴极化子电荷密度中心的演化图, 采用周期性边界条件, 电荷密度中心定义为

$$x_c = \begin{cases} N\theta/2\pi, & \langle \cos \theta_n \rangle \geq 0, \\ N(\theta + \pi)/2\pi, & \langle \sin \theta_n \rangle \geq 0, \\ N(\theta + 2\pi)/2\pi, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (7)$$

其中,

$$\langle \sin \theta_n \rangle = \sum_n \rho_n \sin \theta_n, \quad \langle \cos \theta_n \rangle = \sum_n \rho_n \cos \theta_n,$$

$$\theta = \arctan \frac{\langle \sin \theta_n \rangle}{\langle \cos \theta_n \rangle}, \quad \rho_n = \rho_{n,n} - 1$$

为格点 n 上的电荷密度, $\theta_n = 2n\pi/N$. 由图 2 可见, 当电子、空穴极化子与杂质离子碰撞过程中, 电子极化子的速度先减小后增加, 空穴极化子的速度先增加后减小, 这是由于电子极化子和杂质之间是库仑排斥作用, 类似于势垒, 其速度先减小后增加; 而空穴极化子和杂质之间是库仑吸引作用, 类似于势阱, 速度先增加后减小. 正是由于此原因, 电子和空穴极化子与杂质离子碰撞后远离杂质时, 电子极化子的电荷密度中心位置要先于空穴极化子. 如 645 fs 时, 电子极化子运动到第 155 格点处, 而空穴极化子运动到第 200 格点处 (极化子由右至左运动), 两者相差 45 个晶格常数, 电子极化子的速度远大于空穴极化子的速度.

为了进一步说明杂质离子对电子和空穴极化子动力学性质的不同影响, 我们计算了两杂质离子之间的距离 d 与电子和空穴极化子平均速度的关系, 如图 3 所示. 图 3 描述了杂质势 ($V_{p1} = V_{p2} = 0.4$ eV) 强度保持不变, 随着两杂质离子之间的距离 d (介于 2—16 个晶格常数) 变化时, 电子极化子的平均速度大于空穴极化子的平均速度, 但当 d 小于 6 个晶格常数时, 空穴极化子被杂质势所束缚, 但电子极化子是可以通过杂质区域的; 同时, 电子和空穴极化子的平均速度随 d 的增加而增大, 若继续增加杂质离子间的距离, 电子和

空穴极化子的平均速度几乎保持不变, 仅有一些微小的振荡. 这是由于不同距离的杂质离子对电子和空穴极化子产生的势垒或势阱的叠加效果不同所引起的. 当杂质离子相距较近时, 杂质离子产生的晶格畸变可叠加在一起, 如图4所示. 例如 d 为2个晶格常数时, 此时杂质对电子和空穴极化子的势垒或势阱的作用产生叠加效果较强, 即电子和空穴极化子所受到的库仑作用大大加强, 这对它们的运动速度产生了明显影响, 使得电子和空穴极化子的平均速度较低; 而当两杂质离子相距较远时, 如 d 为20个晶格常数时, 两个杂质的晶格位形没有叠加效应, 相当于只有两个单独的杂质势所起的作用, 由于极化子通过单个杂质势之后平均速度变化不大, 所以杂质离子相距较远时, 使得电子和空穴极化子的平均速度基本保持不变.

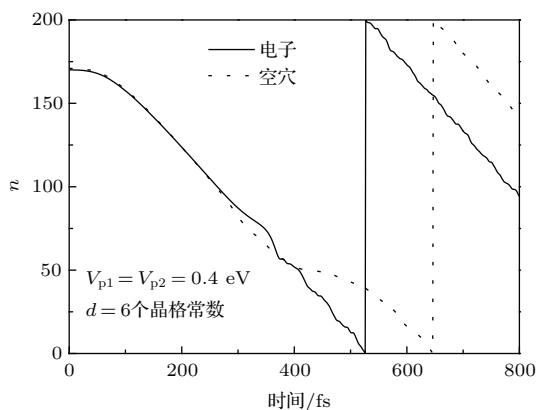


图2 电子和空穴极化子电荷密度中心位置随时间的演化关系

Fig. 2. Temporal evolutions of the charge center for the electron and hole polarons.

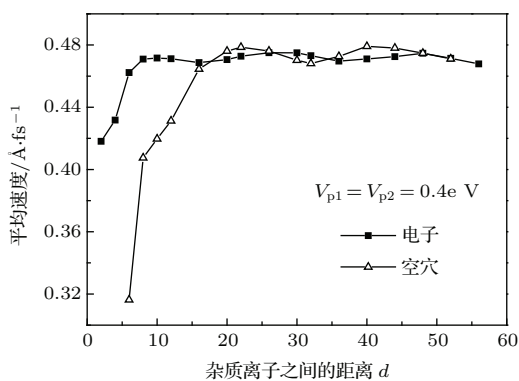


图3 电子和空穴极化子的平均速度随 d 的变化关系

Fig. 3. The average speeds of the electron and hole polarons with different d .

在固定电场作用下, 极化子和杂质碰撞后, 极化子通过杂质或被局域或被反射取决于杂质的有效势, 因此, 为了保证电子和空穴极化子都能通过

杂质, 杂质势的取值范围为0.1—0.4 eV. 图5给出了两个杂质离子的距离保持不变时, 电子、空穴极化子的平均速度随杂质势强度的变化. 当在聚合物中加入相同的两个杂质离子 ($V_p > 0$), 杂质势的强度小时, 由于杂质势的作用效果小, 电子和空穴极化子与杂质离子碰撞后有相同的平均速度, 随着格点杂质势强度的增加, 杂质势作用效果也随之增强, 电子极化子的平均速度大于空穴极化子的平均速度, 并且都随着杂质势强度的增大而减小. 例如两杂质势强度为0.4 eV时, 相距6个晶格常数, 电子极化子的速度为0.462 Å/fs, 而空穴极化子的平均速度为0.316 Å/fs, 这是由于杂质与电子、空穴极化子的库仑作用不同所引起的. 另外, 由图1也可看到, 当杂质势大于零时, 聚合物链杂质的加入使的空穴极化子的晶格位形局域性加强, 从而影响空穴极化子的运动速度, 而电子极化子的晶格位形基本没有变化, 只是发生了平移, 因此, 杂质势大于零时, 杂质势对空穴极化子的平均速度影响更明显, 相反, 如果杂质势小于零, 情况恰好相反.

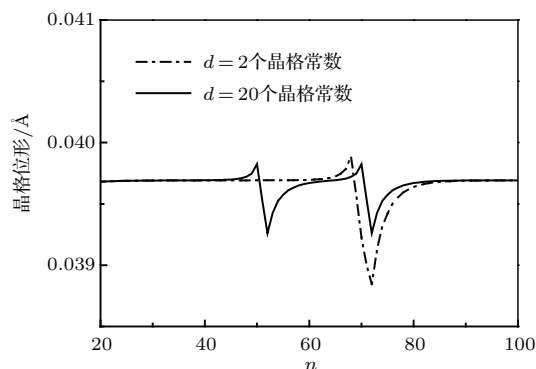


图4 体系二聚化时晶格位形分布图

Fig. 4. The lattice configuration for the dimerization state.

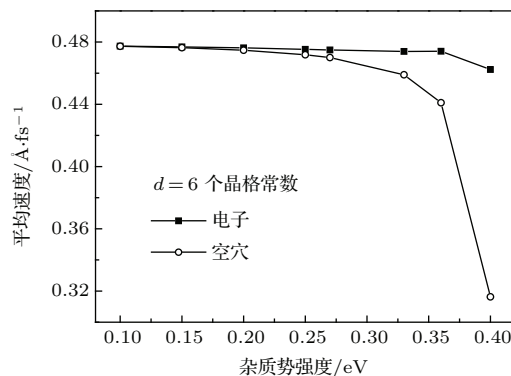


图5 电子和空穴极化子的平均速度随杂质势强度的变化

Fig. 5. The average speeds of the electron and hole polarons with different impurity potential strengths.

4 结 论

基于一维紧束缚SSH模型,采用分子动力学方法,讨论了杂质势的强度和杂质之间的距离对电子和空穴极化子动力学性质的影响.由于电子和空穴极化子与杂质离子之间的库仑作用不同,导致电子、空穴极化子的电荷密度中心位置不同;当杂质势强度保持不变时,杂质离子之间的距离相距2—16个晶格常数时,电子极化子的平均速度大于空穴极化子的平均速度,且都随着杂质离子距离的增加而增大;若继续增加杂质离子之间的距离,电子和空穴极化子的平均速度几乎保持不变,仅有一些微小的振荡,这是由于不同距离的杂质离子对电子、空穴极化子产生的势垒或势阱的叠加效果不同所引起的;随着杂质势强度的增大,电子和空穴极化子的平均速度均减小,杂质势大于零,杂质对空穴极化子的平均速度影响较明显.这是由于杂质和极化子之间的库仑作用,使得空穴极化子的局域程度增强,而电子极化子的晶格位形基本不变,极化子的局域程度影响极化子的运动速度,所以空穴极化子的运动速度受杂质的影响更明显.由此可以得到,杂质势和杂质之间的距离均会影响聚合物中电子和空穴极化子的动力学性质.此研究成果对掺杂聚合物材料的导电性能的研究提供了一定的理论基础.

参考文献

- [1] Heeger A J 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 681
- [2] Zhu Y X, Chen Z H, Yang Y, Cai P, Chen J W, Li Y Y, Yang W, Peng J B, Cao Y 2015 *Org. Electron.* **23** 193
- [3] Mei J G, Diao Y, Appleton A L, Fang L, Bao Z N 2013 *J. Am. Chem. Soc.* **135** 6724
- [4] Sun Y, Yan Y D, Hu Z J, Zhao X S, Yan J C 2012 *Nat. Mat.* **47** 44
- [5] Braga D, Erickson N C, Renn M J, Holmes R J, Frisbie C D 2012 *Adv. Func. Mat.* **22** 1623
- [6] Sun X 1990 *The Soliton And Polaron In High Polymers* (Chengdu: Sichuan Education press) p135 (in Chinese) [孙鑫 1990 高聚物中的孤子和极化子 (成都: 四川教育出版社) 第135页]
- [7] Liu W, Zhang M H, Li H H, Wang Y J, Liu D S 2011 *Chin. Phys. B* **20** 037102
- [8] Song R, Liu X J, Wang Y D, Di B, An Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3461 (in Chinese) [宋瑞, 刘晓静, 王亚东, 邸冰, 安忠 2010 物理学报 **59** 3461]
- [9] Zhao H X, Zhao H, Chen Y G, Yan Y H 2015 *Chin. Phys. Lett.* **32** 047201
- [10] Di B, Wang Y D, Zhang Y L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 107202 (in Chinese) [邸冰, 王亚东, 张亚琳 2013 物理学报 **62** 107202]
- [11] Yang F J, Xie S J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 097306
- [12] Yan Y H, An Z, Wu C Q 2004 *Eur. Phys. J. B* **42** 157
- [13] Lima M P, e Silva G M 2005 *Braz. J. Phys.* **35** 961
- [14] Lima M P, e Silva G M 2006 *Int. J. Quantum Chem.* **106** 2597
- [15] da Cunha W F, Ribeiro Junior L A, de Almeida Fonseca A L, Gargano R, e Silva G M 2015 *Carbon* **91** 171
- [16] Ribeiro Junior L A, da Cunha W F, de Oliveira Neto P H, Gargano R, e Silva G M 2013 *J. Chem. Phys.* **139** 174903
- [17] Li D M, Yuan X J, Ma J S, Liu D S 2011 *Chin. Phys. B* **20** 117203
- [18] Wang Y D, Meng Y, Di B, Wang S L, An Z 2010 *Chin. Phys. B* **19** 127105
- [19] Di B, Wang Y D, Zhang Y L, An Z 2013 *Chin. Phys. B* **22** 067103
- [20] An Z, Li Z J, Liu Y, Li Y C 1997 *Z. Phys. B* **103** 61
- [21] Zhang X J, Li G Q, Sun X 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 134 (in Chinese) [张锡娟, 李广起, 孙鑫 2002 物理学报 **51** 134]
- [22] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J 1980 *Phys. Rev. B* **22** 2099

Dynamics of polarons in organic conjugated polymers with impurity ions*

Liu Jun-Juan¹⁾ Wei Zeng-Jiang²⁾ Chang Hong³⁾ Zhang Ya-Lin³⁾ Di Bing³⁾†

1) (Hebei Normal University Affiliated College of Nationalities, Shijiazhuang 050091, China)

2) (Shijiazhuang Institute of Technology, Career Academy, Shijiazhuang 050020, China)

3) (College of Physics, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China)

(Received 27 November 2015; revised manuscript received 28 December 2015)

Abstract

Based on the one-dimensional tight-binding Su-Schrieffer-Heeger model, and using the molecular dynamics method, we discuss the dynamics of electron and hole polarons under the influence of impurity potentials and the distance between impurities. Under an external electric field, the electron or hole polaron can move along the polymer chain with a steady velocity. When the polarons collide with impurities, the velocities of the polarons would be affected by the impurity potentials and the distance between the impurities. 1) Firstly, at a fixed impurity potential strength, the average velocities of the electron and hole polarons as a function of the distance (2–16 times the lattice constant) between impurities have been discussed in polymers. It is found that the average velocities of the electron and hole polarons increase with increasing distance between impurities. It is worth noting that the average velocities of the electron polarons are greater than those of the hole polarons, which results from the fact that the electron and hole polarons have different coulomb interactions with the impurity ions. That is to say, the coulomb repulsion is shown between the electron polarons and impurity ions, which is similar to the potential barriers; while the coulomb attraction appears between the hole polaron and impurity ions, which is similar to a potential well. However, as the distance between the impurity ions becomes large enough, the average speeds of the electron and hole polarons almost remain the same, and show just a few small oscillation. This is due to the different distances between impurity ions which generate the different superposition effects of barrier or potential well on the electron and hole polarons. 2) Next, with a fixed distance between the two impurity ions, we find that with the increase of impurity potential strength, the average velocities of the electron and hole polarons decrease. And the decrease of the average speed of the hole polaron is more obvious. It can be explained as follows: the coulomb attraction interactions between the hole polaron and impurity ions can obviously enhance the localization of the hole polaron. While the coulomb repulsion interactions between electron polaron and impurity ions can only make the electron polaron undergo a small shift in the polymer chain, so that the localization of it is almost unchanged. In view of the average speed of the polaron being closely related to the localization of the polaron, the change of the average speed of the hole polaron is more obvious. The results above may provide some theoretical basis for understanding the conduction properties in doped polymers.

Keywords: polymers, polaron, molecular dynamics, impurity ions

PACS: 72.80.Le, 71.38.-k, 71.15.pd, 71.55.-i

DOI: 10.7498/aps.65.067202

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11074064), the Natural Science Fund of Hebei Province of China (Grant No. A2016205271) and the Educational Commission of Hebei Province of China (Grant Nos. ZD2014052, Z2014034).

† Corresponding author. E-mail: dibing@mail.hebtu.edu.cn