

链间耦合对极化子非弹性散射性质的影响*

邸冰^{1)†} 王亚东¹⁾²⁾ 张亚琳¹⁾

1) (河北师范大学物理科学与信息工程学院, 河北省新型薄膜材料实验室, 石家庄 050024)

2) (张家口职业技术学院, 张家口 075051)

(2012年12月10日收到; 2013年1月11日收到修改稿)

基于一维紧束缚的 Su-Schreiffer-Heeger 模型, 采用非绝热动力学方法, 研究了链间耦合对聚合物中极化子对非弹性散射性质的影响: 激子的产生依赖于链间耦合, 随着耦合强度的增加, 正负极化子对的电子波函数交叠增强, 利于提高激子的产率; 当耦合区域是极化子的宽度时, 正负极化子对波函数的耦合最充分、耦合最强, 电荷跃迁更容易, 激子产率最大.

关键词: 聚合物, 极化子, 激子

PACS: 72.80.Le, 71.38.-k, 71.35.Aa

DOI: 10.7498/aps.62.107202

1 引言

自 Burroughs 研究小组^[1]首次用 PPV 单层有机薄膜作为发光层制作发光器件以来, 聚合物电致发光的物理机理研究成为研究热点. 实验方面, 研究者努力提高这些光电器件的发光效率和控制发光颜色等^[2]. 理论方面, 人们致力于研究和理解控制这些器件性能的物理机制^[3-5]. 按照传统的统计观点, 有机材料电致发光量子效率与光致发光量子效率的比值不会超过 25%^[6], 但是 Cao 等^[2]和 Friend 等^[7]发现这一比值可以超过这一极限, 后来无论是实验还是理论工作者都做了大量研究, 发现量子效率可以达到 22%—60%^[8-11], 甚至超过 60%^[12].

准一维有机聚合物的强电声耦合作用下, 电子和空穴分别从阳极和阴极注入到有机聚合物中形成孤子、极化子和双极化子等非线性元激发, 人们对这些元激发的动力学特性进行了研究^[13-18]. 带电载流子在有机层内和有机层之间的传输和碰撞过程对电致发光效率有很大影响. 例如, 电场作用下, 正负极化子对碰撞散射后形成极化子和激子的

混合态, 并且激子的产率敏感地依赖于应用电场强度^[19]. 而自旋相反、相同电荷的极化子对碰撞散射后可以形成双极化子^[20], 形成的双极化子在链内运动具有较小的运动速度, 正负双极化子对可以复合成包含两个电子空穴对、可以发出两个光子的单态双激子, 双激子的形成将能够提高有机电致发光的量子效率^[21].

研究发现, 尽管聚合物中的链间相互作用很小, 但对聚合物的电子性质却有着非常重要的作用^[22,23]. Blackman 和 Sabra^[23]研究了相互平行耦合的两条相同聚合物链中极化子和双极化子的激发, 以及它们定域性大小与耦合强度的变化关系. 刘文等^[24]发现, 当聚合物的耦合链较强时, 注入到系统中的电子会诱导二维链间扩展的极化子态. Johansson 和 Stafström 等^[25,26]在非绝热近似条件下, 进一步探讨了相同材料、部分耦合的两条平行耦合链中电场对极化子运动速度的影响, 以及多条相互平行的聚合物耦合链中极化子运动与电场和耦合强度的关系: 耦合聚合物链中极化子在电场作用下运动, 对电场有一定的依赖关系. 我们也研究了链间相互作用对双极化子和(双)激子形成动力

* 国家自然科学基金(批准号: 11074064)、教育部科学技术研究重点项目基金(批准号: 210021)和河北省自然科学基金(批准号: A2010000357)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: dibing@mail.hebtu.edu.cn

学性质的影响^[19-21]、链间相互作用对聚合物光激发态弛豫过程的影响^[27]和电场作用下耦合聚合物链中光激发产物的解体过程^[28]。链间相互作用对激子形成动力学性质的影响结果表明^[19]：一条链上正负极化子对的碰撞散射过程基本不受链间相互作用的影响，处于不同链上的极化子的非弹性散射可以在一条链上形成自陷的极化子激子，这些研究只是对固定链间耦合作用做了初步探讨，然而不同聚合物材料的链间耦合强度有很大差别，激子的动力学形成产率与链间耦合强度和链间耦合区域的关系需要进一步研究。

在低维体系中，基于紧束缚的 Su-Schreiffer-Heeger (SSH) 模型^[29,30]和它的扩展模型^[31]的晶格弛豫动力学方法已经广泛地用来模拟聚合物中非线性元激发的形成过程。本文采用非绝热分子动力学方法，研究不同链间耦合对激子形成产率的影响，此研究对于理解和发现提高发光器件发光效率的物理机制有很大帮助，为设计、合成更具实用意义的新型功能材料提供理论支持。

2 理论模型和计算方法

我们考虑如下的链间耦合的 Hamiltonian^[22,23]

$$H = H_{\text{SSH}} + H_{\text{int}} + H_{\text{ext}}, \quad (1)$$

其中， H_{SSH} 是标准的 SSH 哈密顿

$$H_{\text{SSH}} = - \sum_{j,n} [t_0 - \alpha (u_{j,n+1} - u_{j,n}) + (-1)^n t_e] \times (c_{j,n+1}^\dagger c_{j,n} + \text{h.c.}) + \frac{K}{2} \sum_{j,n} (u_{j,n+1} - u_{j,n})^2 + \frac{M}{2} \sum_{j,n} \dot{u}_{j,n}^2, \quad (2)$$

式中 $j = 1, 2$ 为链指标， $u_{j,n}$ 为第 j 条链上第 n 个格点偏移等间距排列的晶格位移，算子 $c_{j,n}^\dagger (c_{j,n})$ 产生 (湮灭) 第 j 条链、第 n 个格点位置上的一个 π 电子， t_e 是反映基态非简并性的禁闭常数项。为了保持链长不变，我们采用固定边界条件。

两条耦合聚合物链之间的相互作用项 (H_{int}) 可以描述为

$$H_{\text{int}} = - \sum_n [t_1 - (-1)^n t_2] (c_{1,n}^\dagger c_{2,n} + \text{h.c.}), \quad (3)$$

其中， $t_1(t_2)$ 表示链间的耦合强度。研究表明^[22,23]：对于一维无限长聚合物链，当 $t_1 > t_2$ 时，反相序列 (即一条链的双 (单) 键对应另一条链的单 (双) 键)

是能量稳定的；而当 $t_1 < t_2$ 时，同相序列 (即一条链的双 (单) 键对应另一条链的双 (单) 键) 是能量稳定的。聚乙炔链的排列是同相序列的，因此，仅考虑 $t_1 < t_2$ 的情况。

H_{ext} 是外场 $E(t)$ 的贡献，外电场 $E(t)$ 在整个系统中是一个常数 (偶极近似)，作为一个标矢包括在 H_{ext} 中，

$$H_{\text{ext}} = |e| \sum_{j,n} (na + u_{j,n}) (c_{j,n}^\dagger c_{j,n} - 1) E(t). \quad (4)$$

计算中，为了减小系统突变的影响，采用半高斯函数的形式缓慢增加电场强度，经过时间 T_C 后，场强保持常数，即^[16,19]

$$E(t) = \begin{cases} E_0 \exp(-(t - T_C)^2 / T_W^2) & t < T_C \\ E_0 & t \geq T_C \end{cases}, \quad (5)$$

其中， $T_C = 75$ fs 是高斯函数的中心， $T_W = 25$ fs 是高斯函数的宽度， E_0 是电场强度。计算中取的参数为^[30]： $t_0 = 2.5$ eV， $K = 21$ eV/Å²， $M = 1349.14$ eV·fs²/Å²， $a = 1.22$ Å， $\alpha = 4.1$ eV/Å。

在 $t = 0$ 时刻，一旦我们确定了初始的晶格位形和电子分布，那么在 ($t > 0$) 时刻的晶格分布可以由原子的运动方程确定：

$$M\ddot{u}_{j,n} = -K(2u_{j,n}(t) - u_{j,n+1}(t) - u_{j,n-1}(t)) + 2\alpha(\rho_{jn,jn+1}(t) - \rho_{jn,jn-1}(t)) + |e|E(t)(\rho_{jn,jn}(t) - 1), \quad (6)$$

其中，电荷分布函数

$$\rho_{jn,j'n'}(t) = \sum_k \psi_{j,n,k}(t) f_{k,s} \psi_{j',n',k}^*(t).$$

电子波函数 $\psi_{j,n,k}(t)$ 是含时薛定谔方程的解：

$$i\hbar\dot{\psi}_{j,n,k}(t) = \sum_{j',n'} h_{jn,j'n'}(t) \psi_{j',n',k}(t), \quad (7)$$

$h_{jn,j'n'}(t)$ 是电子部分的 Hamiltonian 的矩阵，表示为

$$h_{jn,j'n'} = \begin{cases} -[t_0 - \alpha(u_{j',n'} - u_{j,n})] & j = j', n' = n \pm 1 \\ -[t_1 - (-1)^n t_2] & j \neq j' \\ |e|E(t)[\rho_{jn,j'n'}(t) - 1] & j = j', n' = n \end{cases}. \quad (8)$$

耦合方程组 (6) 和 (7) 可以用 8 阶可控步长的 Runge-Kutta 法求解^[32]，这一方法已经运用在极化子动力学^[16]和聚合物的光激发动力学模拟中^[33]。为了结果分析方便，我们采用交替晶格序参量

$\delta_{j,n} = (-1)^n(2u_{j,n} - u_{j,n-1} - u_{j,n+1})/4$ 表示晶格位形, 格点静电荷分布为 $\rho_{j,n}(t) = \sum_k |\psi_{j,n,k}(t)|^2 - 1$.

激子产物的生成概率的计算方法是^[9-11]: 将动力学演化中每一时刻系统的演化波函数 $|\Phi(t)\rangle$ 在每个本征波函数 $|\Psi_K\rangle$ 上做投影, 就可以得到激子本征态在各个时刻出现的概率值 $Y_K(t)$. 即 $Y_K(t) = |\langle \Psi_K | \Phi(t) \rangle|^2$. 对于由多个电子组成的体系, 它的演化波函数 $|\Phi(t)\rangle$ 和本征波函数 $|\Psi_K\rangle$ 都是一个具有交换对称性的 Slater 行列式, 行列式是由单个电子的波函数组成的, 演化波函数可以通过含时薛定谔方程得到, 而本征波函数可以对角化体系的哈密顿量得到.

3 结果与讨论

3.1 耦合强度对两条耦合聚合物链上极化子对非弹性散射的影响

两条相同材料的聚合物链, 每条包含 $N = 200$ 个格点 (一条链的格点标号为 1—200, 另一条链的格点标号为 201—400), 它们有 N_0 个格点相重叠 (即 $200 - N_0 + 1 - 200$ 与 $201 - 200 + N_0$ 对应). 初始时刻, 在第一条链上的第 50 个格点位置有一个空穴极化子, 在第二条链上的第 350 个格点位置有一个电子极化子, 在电场作用下, 它们将在耦合聚合物链间发生碰撞和散射.

为了便于观察正负极化子对在耦合聚合物链间的碰撞和散射过程, 我们固定链间耦合长度为 $N_0 = 100$, 研究电场作用下 (0.5 mV/\AA) 不同链间耦合强度对正负极化子对的非弹性散射过程产生影响. 首先考虑链间耦合较弱的情况, $t_1 = 0.01 \text{ eV}$, $t_2 = 0.05 \text{ eV}$ (图 1(a)), 当两个极化子在耦合区域靠近时, 由于链间耦合较弱, 因而它们的波函数有较小的交叠, 而电荷在两个极化子之间的转移依赖于它们波函数的交叠程度. 因此, 当两个极化子碰撞弹开后, 局域在两个极化子中的电荷仅仅是量变小了, 而符号没有改变. 此时, 正负极化子对复合形成的产物是极化子和激子的混合态, 但激子产率较低. 这样的两个粒子在电场的作用下不可能分开很远 (分开越远, 电势能越大), 它们将在电场力的作用下再一次靠近, 发生又一次非弹性散射碰撞. 随着耦合强度的增加, $t_1 = 0.05 \text{ eV}$, $t_2 = 0.1 \text{ eV}$ (图 1(b)), 正负极化子碰撞后, 局域在缺陷中的电荷不仅数量减

少了, 而且符号还发生了改变, 这是因为较强的链间耦合使正负极化子的波函数有了较大的交叠, 虽然仍是极化子激子和极化子的混合态, 但是发现第一条链上的激子产率略高于第二条链上激子的产率. 当耦合强度继续增加时, $t_1 = 0.1 \text{ eV}$, $t_2 = 0.15 \text{ eV}$ (图 1(c)), 强的耦合使得电子波函数交叠增大, 这样将在一条链上形成自陷的极化子激子, 激子产率约为 45%, 而另一条链恢复为二聚化状态, 同时有部分电荷成为自由电荷. 由此可见, 链间耦合有利于提高激子的产率. 但链间耦合太强时, 极化子对散射复合过程将被强链间耦合作用破坏, 自由电子将在两条耦合链的链间来回转移.

3.2 耦合区域对两条耦合聚合物链上极化子对非弹性散射的影响

作为一个例子, 耦合强度固定在 $t_1 = 0.1 \text{ eV}$, $t_2 = 0.15 \text{ eV}$, 图 2(a) 中给出了两个极化子在耦合区域长度 $N_0 = 10$ 时的碰撞行为: 在 450 fs 前, 两个极化子以恒定速度运动, 在 450 fs 左右, 它们达到最小距离, 而后分开朝着相反的方向运动. 虽然链间耦合强度较强, 但由于耦合链长 $N_0 = 10$ 较小, 在中强度电场 0.5 mV/\AA 作用下, 这两个极化子可以靠得很近, 但它们的波函数有较小的交叠. 因此, 当两个极化子弹开后, 局域在两个极化子中的电荷仅仅是量变小了, 而符号没有改变. 图 2(b) 结果表明: 当增加链间耦合长度到 $N_0 = 50$ 时, 处于不同链上的极化子的非弹性散射与同一条链上两个极化子的碰撞散射过程不同^[22], 当它们在电场的作用下相互靠近后, 在一条链上形成自陷的极化子激子, 而另一条链恢复为二聚化状态, 同时有部分电荷成为自由电荷. 这是因为在这种情况下, 两个极化子的复合有较小的势垒. 因此, 与同一条链上正负极化子对的非弹性散射相比, 链间极化子对的非弹性散射过程有较大的激子生成率.

图 2(b) 演化过程中两个生成粒子的电子特征可以反映在系统的本征能级 (图 3(a)) 和它们的占据数上 (图 3(b)). 对应两个晶格缺陷, 图 3(a) 能隙中存在 4 条局域电子态. 我们用 $\epsilon_{L1}(\epsilon_{R1})$ 表示对应左侧 (右侧) 缺陷的较低的局域能级, 同时用 $\epsilon_{L2}(\epsilon_{R2})$ 表示对应左侧 (右侧) 缺陷的较高的局域能级. 在初始时刻, ϵ_{L1} 和 ϵ_{R1} (ϵ_{L2} 和 ϵ_{R2}) 是两两简并的, 这表明初始时两个极化子是完全分开的, 它们之间

没有波函数的交叠. 随着时间的推移, 它们的简并解除, 一方面是由于电场导致的 Stark 效应 (对应左边缺陷的能级 ϵ_{L1} 和 ϵ_{L2} 向下移动, 对应右边缺陷的能级 ϵ_{R1} 和 ϵ_{R2} 向上移动), 另一方面, 当两个极化子靠近时, 它们之间的相互作用也能解除能级的简并. 两个极化子碰撞后, 与之相应的能级也表现出振荡行为. 图 3(b) 表示分布函数, 价带除了 ϵ_{L1} 单占据外, 其他能级都是双占据的, 同时, 在导带只有 ϵ_{R2} 是单占据的, 其余能级是全空的. 这和初始条件是一致的, 即链的左边是一个空穴极

化子, 右边是一个电子极化子. 在两个极化子发生碰撞前, 占据数基本上不随时间变化. 在碰撞过程中, 能级 ϵ_{R1} 和 ϵ_{R2} 上的占据数减小, 同时, 能级 ϵ_{L1} 和 ϵ_{L2} 上的占据数增加. 当两个晶格缺陷完全分开后, 这些能级上的占据数再一次地保持常数不变 (ϵ_{L1} 上约为 2.0, ϵ_{R1} 上约为 1.2, ϵ_{L2} 上约为 0.8, ϵ_{R2} 上约为 0). 从电荷分布看, 在碰撞后的晶格缺陷中残存的电荷越少, 激子的分量就越大. 这表明, 碰撞后生成一个准粒子, 它主要是激子态, 激子的产率约为 70%.

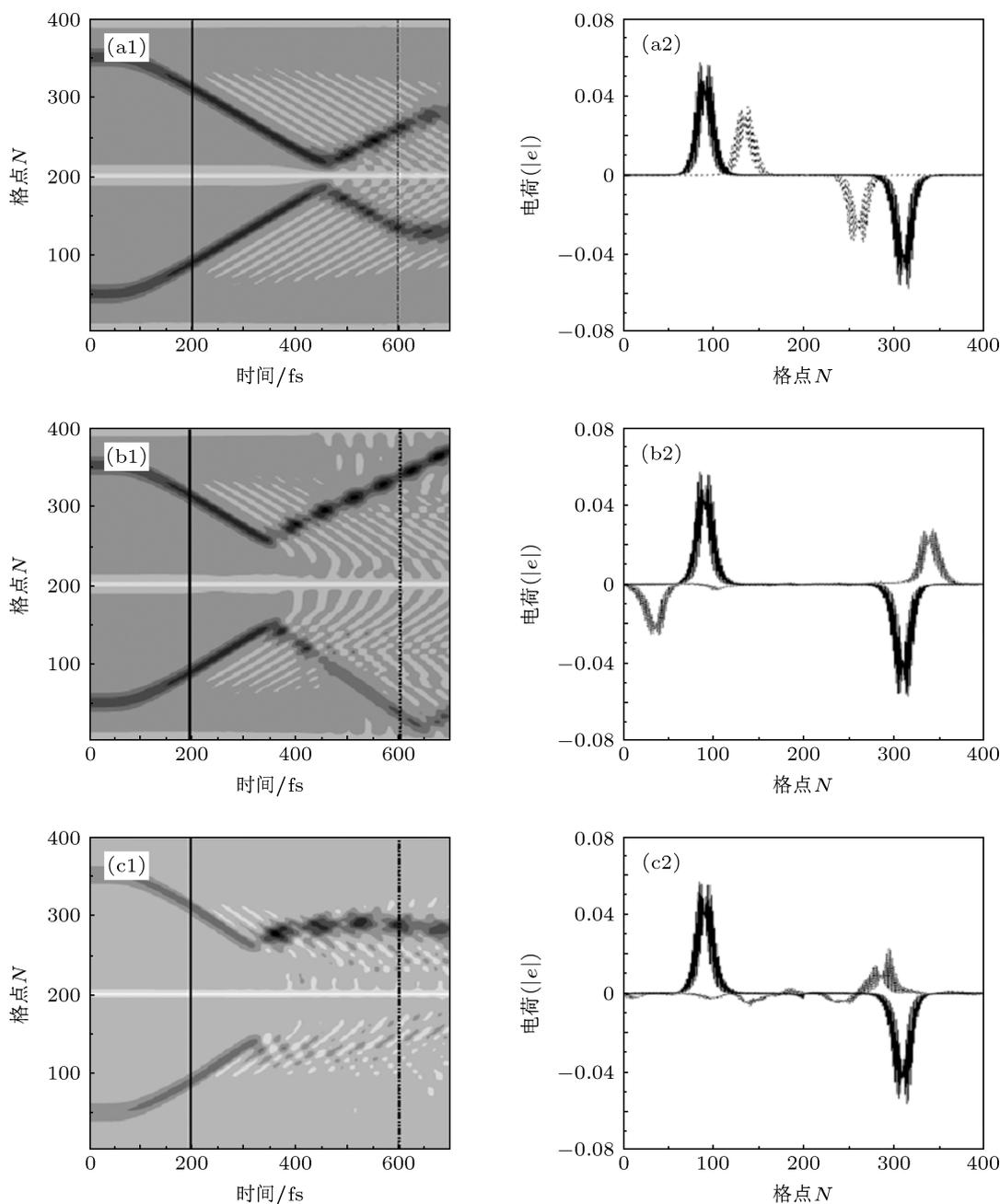


图 1 固定链间耦合区域长度, 链间耦合强度 ($t_1(t_2)$) 对耦合聚合物链上极化子对非弹性散射性质的影响: 左边一列是交替晶格序参量 $\delta_{j,n}$ 随时间的演化过程, 右边一列是左图中所示时刻净电荷 $r_{j,n}$ 分布 (a) $t_1 = 0.01$ eV, $t_2 = 0.05$ eV; (b) $t_1 = 0.05$ eV, $t_2 = 0.1$ eV; (c) $t_1 = 0.1$ eV, $t_2 = 0.15$ eV

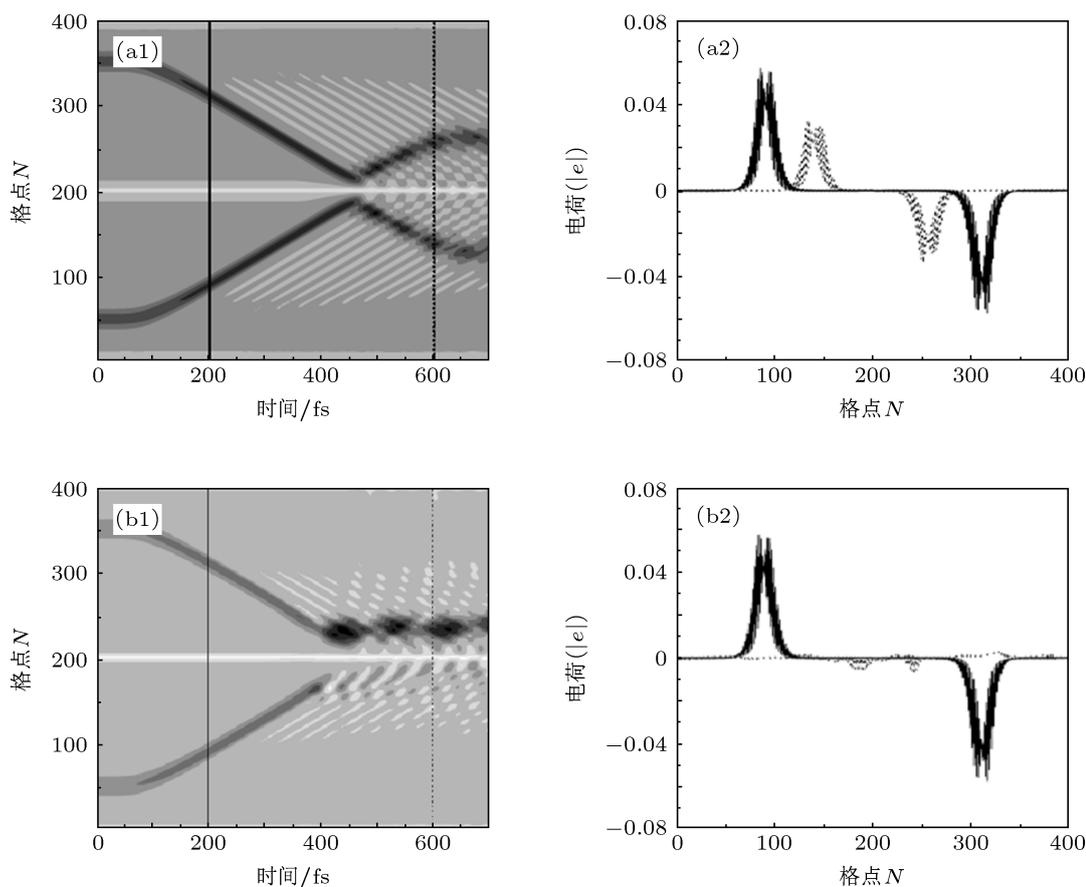


图2 相同链间耦合强度下, 链间耦合链长度 N_0 对耦合聚合物链上极化子对非弹性散射性质的影响 左边一列是交替晶格序参量 $\delta_{j,n}$ 随时间的演化过程, 右边一列是左图中所示时刻净电荷 $\rho_{j,n}(t)$ 分布; (a) $N_0 = 10$; (b) $N_0 = 50$

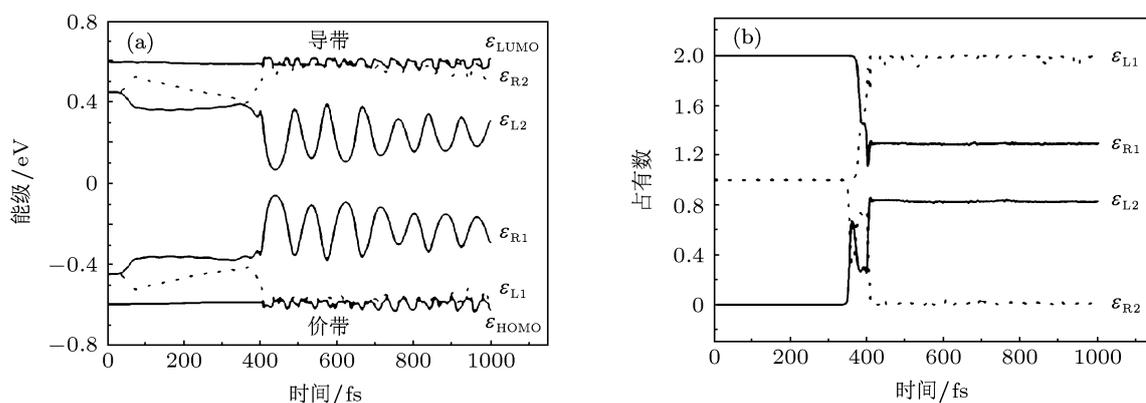


图3 对应图 2(b) 表示的正负极化子对的非弹性散射过程, 禁带中的局域电子态 (a) 及其对应的占据数 (b) 随时间的演化

图 4 表示激子产率与链间耦合区域的变化关系. 研究发现, 激子产率随着链间耦合区域的增加而增加, 当耦合区域增加到某一数值后 (约为 30 格点), 随着耦合区域的增加, 激子的产率开始下降.

这是因为链间耦合区域可以影响正负极化子对波函数的交叠程度, 当链间耦合区域接近极化子宽度时, 此时正负极化子对波函数的交叠耦合最充分、耦合最强, 电荷跃迁更容易, 因此激子产率最高.

4 结论

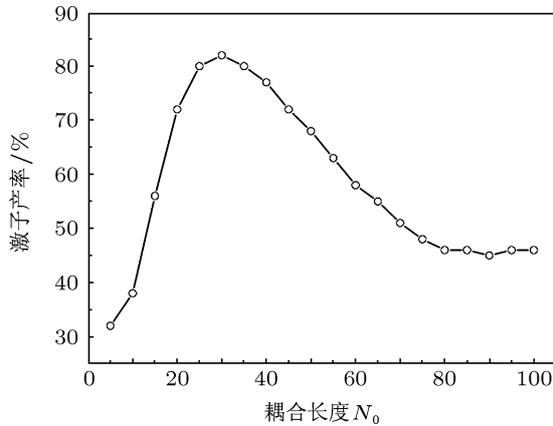


图4 激子产率与链间耦合区域长度的变化关系

基于一维紧束缚 SSH 模型, 采用非绝热分子动力学方法, 研究了链间耦合对聚合物结构中正负极化子对非弹性散射的动力学性质的影响. 发现链间耦合强度对散射过程中电荷分布以及晶格缺陷有明显影响, 散射过程依赖于链间耦合强度; 当链间耦合强度较弱时, 正负极化子碰撞后分别在两条链上形成极化子激子和极化子的混合态; 当链间耦合强度增加时, 强的链间耦合使得电子波函数交叠增大, 有利于激子产率的提高; 激子产率随链间耦合区域增大而增加, 当链间耦合区域接近极化子的宽度时, 正负极化子对波函数的耦合最充分, 电荷跃迁更容易, 激子产率最高.

- [1] Burroughes J H, Bradley D D C, Brown A R, Mark R N, Mackay K, Friend R H, Burns P L, Holmes A B 1990 *Nature* **347** 539
- [2] Cao Y, Parker L D, Yu G, Zhang C, Heeger A J 1999 *Nature* **397** 414
- [3] Shuai Z, Beoljonne D, Silbey R J, Bredas J L 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 131
- [4] Ye A, Shuai Z, Bredas J L 2002 *Phys. Rev. B* **65** 5208
- [5] Wohlgenannt M, Tandon K, Mazumdar S, Ramasesha S, Vardeny Z V 2001 *Nature* **409** 494
- [6] Baldo M A, O'Brien D F, Thompson M E, Forrest S R 1999 *Phys. Rev. B* **60** 14422
- [7] Friend R H, Bradley D D D, Dos Santos D A, Bredas J L, Logdlund M, Salanech W R 1999 *Nature* **397** 121
- [8] Wohlgenannt M, Jiang X M, Vardeny Z V, Janssen R A 2002 *J. Phys. Rev. Lett.* **88** 197401
- [9] Sun Z, Li Y, Gao K, Liu D S, An Z, Xie S J 2010 *Organic Electron.* **11** 279
- [10] Sun Z, Li Y, Xie S J, An Z, Liu D S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 201310
- [11] Meng Y, Liu X J, Di B, An Z 2009 *J. Chem. Phys.* **131** 244502
- [12] Li S, Tong G P, George T F 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 074513
- [13] Rakhmanova S V, Conwell E M 2000 *Synthetic Metals* **110** 37
- [14] Liu W, Li Y, Qu Z, Gao K, Yin S, Liu D S 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 037101
- [15] 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]
- [16] Di B, An Z, Li Y C, Wu C Q 2007 *Eur. Phys. Lett.* **79** 17002
- [17] Di B, Meng Y, An Z, Li Y C 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 679
- [18] Wang L X, Zhang D C, Liu D S, Han S H, Xie S J 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2547 (in Chinese) [王鹿霞, 张大成, 刘德胜, 韩圣洁, 解士杰 2003 物理学报 **52** 2547]
- [19] An Z, Di B, Zhao H, Wu C Q 2008 *Eur. Phys. J. B* **63** 71
- [20] Di B, Meng Y, Wang Y D, Liu X J, An Z 2011 *J. Phys. Chem. B* **115** 964
- [21] Di B, Meng Y, Wang Y D, Liu X J, An Z 2011 *J. Phys. Chem. B* **115** 9339
- [22] Baeriswyl D, Maki K 1988 *Phys. Rev. B* **38** 8135
- [23] Blackman J A, Sabra M K 1993 *Phys. Rev. B* **47** 15437
- [24] Liu W, Li H H, Liu D S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6405 (in Chinese) [刘文, 李海宏, 刘德胜 2010 物理学报 **59** 6405]
- [25] Johansson Å, Stafström S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3602
- [26] Johansson Å, Stafström S 2002 *Phys. Rev. B* **66** 085208
- [27] Meng Y, Di B, Liu X J, An Z, Wu C Q 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 184903
- [28] Meng Y, An Z 2010 *Eur. Phys. J. B* **74** 313
- [29] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 1698
- [30] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J 1980 *Phys. Rev. B* **22** 2099
- [31] Takayama H, Lin-Liu Y R, Maki K 1980 *Phys. Rev. B* **21** 2388
- [32] Brankin R W, Gladwell I, Shampine L F *RKSUITE: Software for ODE IVPS* (www.netlib.org) [2012-12-10]
- [33] An Z, Wu C Q, Sun X 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 216407

The effect of interchain coupling on inelastic scattering of oppositely charged polarons*

Di Bing^{1)†} Wang Ya-Dong¹⁾²⁾ Zhang Ya-Lin¹⁾

1) (*College of Physics, Hebei Advanced Thin Films Laboratory, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050016, China*)

2) (*Zhangjiakou Vocational and Technical College, Zhangjiakou 075051, China*)

(Received 10 December 2012; revised manuscript received 11 January 2013)

Abstract

Within an one-dimensional tight-binding Su-Schreiffer-Heeger model, we investigate the effect of interchain coupling on inelastic scattering of oppositely charged polarons in conjugated polymer by using a nonadiabatic evolution method. It is found that the yield of the neutral exciton depends sensitively on the interchain coupling. The yield of the neutral exciton increases with the enhancement of overlapping which can make the wave functions of oppositely charged polarons more largely overlapped. The formation yield of excitons also increases with the number of overlapping sites increasing to its maximum value, where the length of overlapping sites is almost of the same order of magnitude as the width of the polaron, the reason is that the number of overlapping sites can affect the overlap of oppositely charged polaron wave functions. In turn, the charge transfer between them depends on the overlap of their wave functions. Therefore, when the size of overlapping sites is almost of the same order of magnitude as the width of the polaron, their wave functions have a largest overlap, thereby making charge transfer more easily. So the yield of excitons has the largest value.

Keywords: polymers, polarons, exciton

PACS: 72.80.Le, 71.38.-k, 71.35.Aa

DOI: 10.7498/aps.62.107202

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11074064), the Foundation for Key Program of Ministry of Education, China (Grant No. 210021), and the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. A2010000357).

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