



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I665204 B

(45) 公告日：中華民國 108 (2019) 年 07 月 11 日

(21) 申請案號：103136467

(22) 申請日：中華民國 103 (2014) 年 10 月 22 日

(51) Int. Cl. : C07D519/00 (2006.01)

C08G61/12 (2006.01)

H01L51/42 (2006.01)

(30) 優先權：2013/10/28 南韓

10-2013-0128237

(71) 申請人：L G 化學股份有限公司 (南韓) LG CHEM, LTD. (KR)

南韓

(72) 發明人：曹根 CHO, KEUN (KR)；李載澈 LEE, JAECHOL (KR)；裴在順 BAE, JAESOOON (KR)；李志永 LEE, JIYOUNG (KR)；金填碩 KIM, JINSECK (KR)；崔斗煥 CHOI, DOO WHAN (KR)

(74) 代理人：林志剛

(56) 參考文獻：

WO 2013/030325A1

Yuki Suna et. al., "Ambipolar Behavior of Hydrogen-Bonded Diketopyrrolopyrrole-Thiophene Co-oligomers Formed from Their Soluble Precursors", Organic Letters, 2012, Vol. 14, page 3356-3359

審查人員：官速貞

申請專利範圍項數：9 項 圖式數：38 共 129 頁

(54) 名稱

單分子及包含彼之有機太陽能電池

UNIMOLECULAR AND ORGANIC SOLAR CELL COMPRISING THE SAME

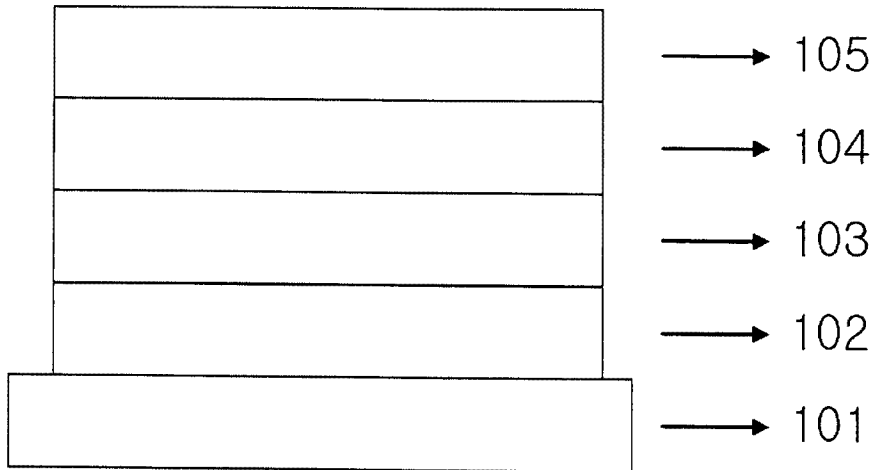
(57) 摘要

本案係提供單分子以及包含彼之有機太陽能電池。

The present specification provides a unimolecule and an organic solar cell including the same.

指定代表圖：

圖 38



符號簡單說明：

101 . . . 基板

102 . . . 第一電極

103 . . . 電洞傳輸層

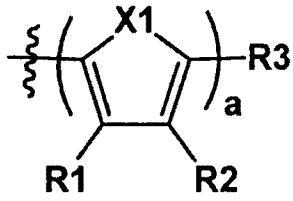
104 . . . 光活性層

105 . . . 第二電極

特徵化學式：

化學式 1

[化學式 1]



# 發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

## 【發明名稱】(中文/英文)

單分子及包含彼之有機太陽能電池

Unimolecular and organic solar cell comprising the same

## 【技術領域】

本案請求韓國專利申請案第 10-2013-0128237 號之優先權及權益，其係於 2013 年 10 月 28 日向韓國智慧財產局申請，其全文係以參考方式併入本文。

本揭示內容係關於單分子及包含彼之有機太陽能電池。

## 【先前技術】

有機太陽能電池為可藉由應用光伏效應(photovoltaic effect)直接將太陽能轉換為電能的裝置。太陽能電池可依構成薄膜之材料而分成無機太陽能電池及有機太陽能電池。典型太陽能電池之製造係藉由摻雜結晶矽(Si)(其為無機半導體)而利用 p-n 接面(p-n junction)。吸收光而產生的電子和電洞擴散至 p-n 接點，並藉電場加速而移動至電極。此程序之功率轉換效率(power conversion efficiency)係定義為供於外部電路之電力與置入太陽能電池之太陽能的比，在以目前標準化的虛擬太陽照射條件下測量之該比係高達 24%。然而現有之無機太陽能電池在經濟可行性及材料

供應上已有所限制，因此，易於加工、低價且具有各種功能性的有機材料半導體太陽能電池遂於作為長期替代能源上受到高度青睞。

對太陽能電池而言，重要的是提高效能以儘可能由太陽能輸出更多的電能。為了改善此太陽能電池效能，於半導體內部儘可能多產生激子(exciton)是重要的，但是，將所產生的電荷無耗損地取至外部也是重要的。電荷耗損的原因之一是所產生的電子和電洞因為復合(recombination)而消滅(dissipation)。已提出各種方法以無耗損地輸送所產生的電子或電洞，但是，大部分的方法需要額外的製程，因而可能提高製造成本。

相關技術文獻

非專利文獻

Two-layer organic photovoltaic cell(C. W. Tang , Appl. Phys. Lett. , 48 , 183(1996)) ;

Efficiencies via Network of Internal Donor-Acceptor Heterojunctions(G. Yu , J. Gao , J. C. Hummelen , F. Wudl , A. J. Heeger , Science , 270 , 1789(1995))。

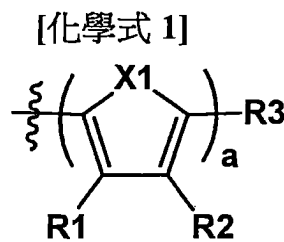
### 【發明內容】

[技術問題]

本說明書之一目的係提供單分子及包含彼之有機太陽能電池。

## [技術方案]

本說明書係提供以下列化學式 1 作為末端單元之單分子，其包括選自由下列化學式 2 所示之單元所組成之群組的二或更多單元，其中所選之二或更多單元係彼此相同或不同。



化學式 1 中，

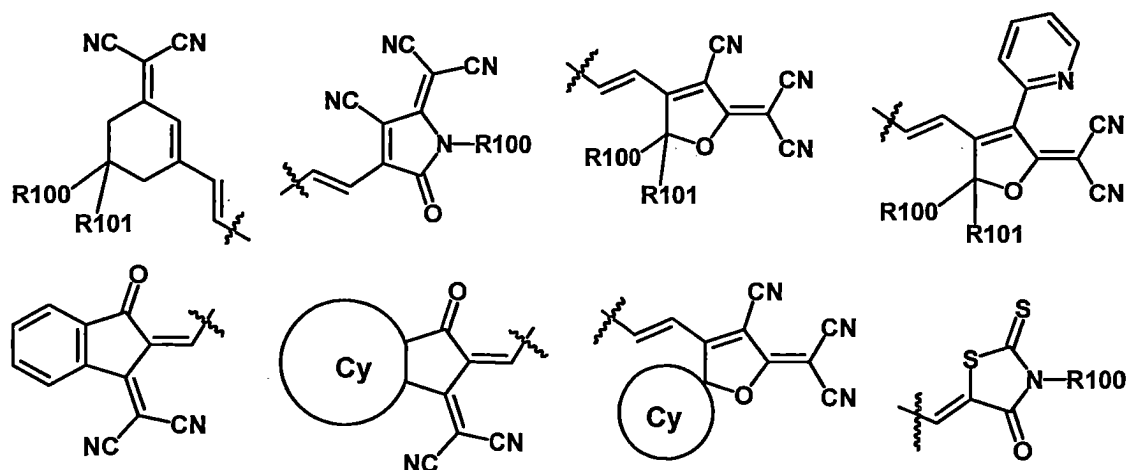
a 為 1 至 5 的整數，且當 a 為 2 至 5 的整數時，二或更多個括號中之結構係彼此相同或不同，

X1 係選自由下列所組成之群組：CRR'、NR、O、SiRR'、PR、S、GeRR'、Se 及 Te，

R1 及 R2 係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：氫；氖；鹵基 (halogen group)；腈基 (nitrile group)；硝基；醯亞胺基 (imide group)；醯胺基 (amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基 (alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基 (arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基 (alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基 (arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或

未經取代之矽基(silyl group)；經取代或未經取代之硼基(boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基(alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基(aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基(arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基(heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；以及經取代或未經取代之雜環基，

R3 為氫；經取代或未經取代之烷基；或者以下結構中之任一者，



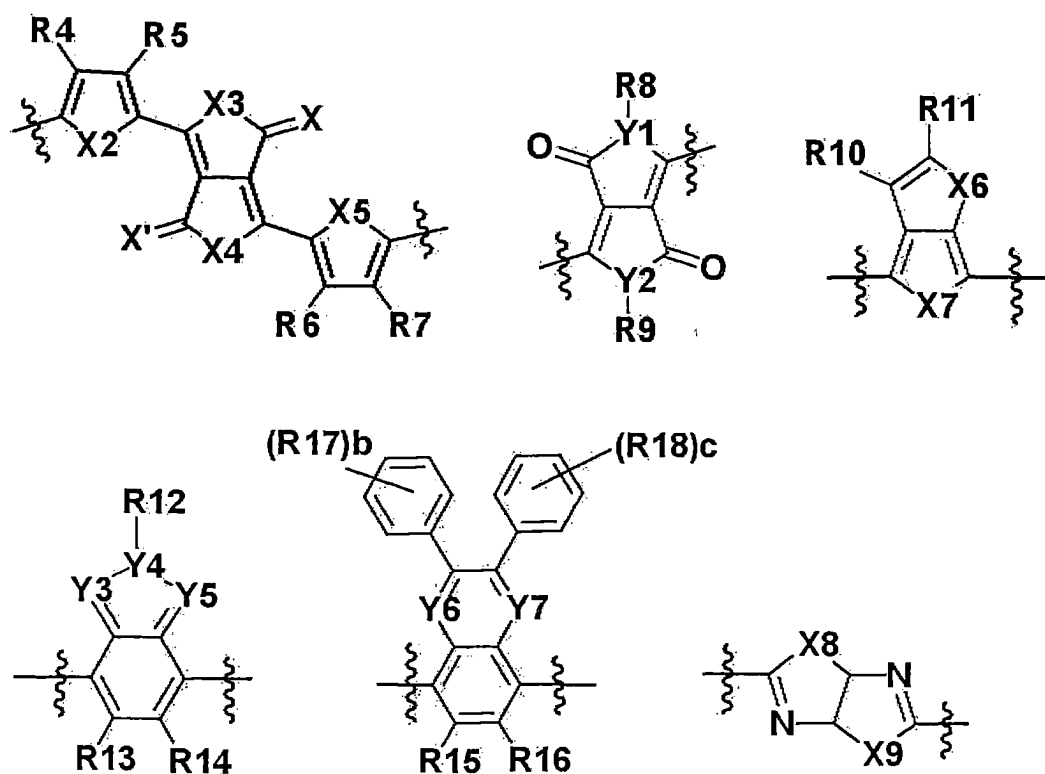
於結構中，

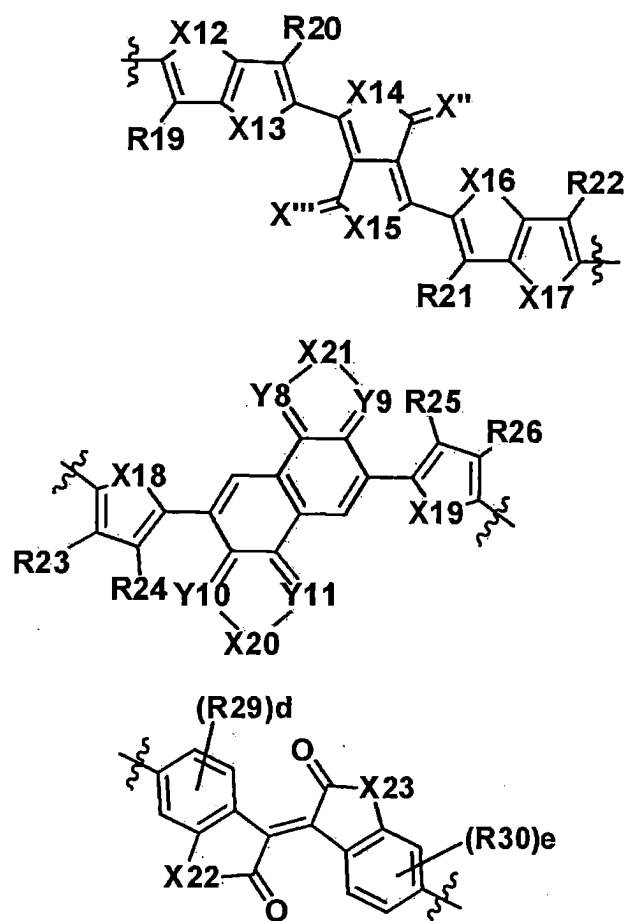
Cy 為經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之雜環基，

R100 及 R101 係彼此相同或不同，且各自獨立地為氫；氘；鹵基(halogen group)；腈基(nitrile group)；硝基；醯亞胺基(imide group)；醯胺基(amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷

基；經取代或未經取代之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基(alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基(arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基(alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基(arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之矽基(silyl group)；經取代或未經取代之硼基(boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基(alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基(aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基(arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基(heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之雜環基，

[化學式 2]





化學式 2 中，

b 及 c 係各自為 1 至 5 的整數，

d 及 e 係各自為 1 至 3 的整數，

X、X'、X''及 X'''係彼此相同或不同，且各自獨立地為 O 或 S，

X2 至 X23 係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：CRR'、NR、O、SiRR'、PR、S、GeRR'、Se 及 Te，

Y1 至 Y11 係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：CR、N、SiR、P 及 GeR，

R4 至 R30 係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由

下列所組成之群組：氫；氖；鹵基(halogen group)；腈基(nitrile group)；硝基；醯亞胺基(imide group)；醯胺基(amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基(alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基(arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基(alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基(arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之矽基(silyl group)；經取代或未經取代之硼基(boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基(alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基(aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基(arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基(heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；及經取代或未經取代之雜環基，以及

R 及 R'係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：氫；氖；鹵基(halogen group)；腈基(nitrile group)；硝基；醯亞胺基(imide group)；醯胺基(amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基(alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基(arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基

(alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基 (arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之矽基 (silyl group)；經取代或未經取代之硼基 (boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基 (alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基 (aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基 (arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基 (heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；以及經取代或未經取代之雜環基。

此外，本說明書係提供有機太陽能電池，其包括第一電極；設為相對於第一電極的第二電極；以及置於第一電極和第二電極之間、且包含光活性層的一或多層有機材料層，其中，該有機材料層之一或多層係包括上述之單分子。

#### [有利效果]

本說明書之單分子可用於作為有機太陽能電池之有機材料層的材料，使用該單分子的有機太陽能電池可於提高開路電壓 (open voltage)、提高效率等等方面展現優異性質。尤其是，根據本說明書之一實施態樣的單分子係具有低 HOMO 能階、小能隙 (band gap)、及高電荷移動率，因而可展現優異的性質。根據本說明書之一實施態樣的單分子可於有機太陽能電池中單獨使用或與其他材料混合使用，可藉由化合物之熱穩定性增進效率、及改善裝置之壽

命性質(lifespan property)。

【圖式簡單說明】

圖 1 係圖示實施例 1 所製備之單體 1 的 NMR 譜。

圖 2 係圖示實施例 2 所製備之單體 2 的 NMR 譜。

圖 3 係圖示實施例 3 所製備之單體 3' 的 NMR 譜。

圖 4 係圖示實施例 3 所製備之單體 3' 的 MS 譜。

圖 5 係圖示實施例 4 所製備之單體 4' 的 NMR 譜。

圖 6 係圖示實施例 4 所製備之單體 4' 的 MS 譜。

圖 7 係圖示實施例 5 所製備之單體 5' 的 NMR 譜。

圖 8 係圖示實施例 5 所製備之單體 5' 的 MS 譜。

圖 9 係圖示實施例 6 所製備之單體 6' 的 MS 譜。

圖 10 係圖示實施例 7 所製備之單體 7 的 NMR 譜。

圖 11 係圖示實施例 8 所製備之化合物的 NMR 譜。

圖 12 係圖示實施例 8 所製備之化合物的 MS 譜。

圖 13 係圖示實施例 9 所製備之化合物的 MS 譜。

圖 14 係圖示實施例 10 所製備之化合物的 MS 譜。

圖 15 係圖示實施例 11 所製備之化合物的 MS 譜。

圖 16 係圖示實施例 12 所製備之化合物的 MS 譜。

圖 17 係圖示根據實施例 13 所製備之化合物 E 的 NMR 譜。

圖 18 係圖示實施例 14 所製備之單分子 1 的 MS 譜。

圖 19 係圖示實施例 16 所製備之單分子 3 的 MS 譜。

圖 20 係圖示實施例 17 所製備之單分子 4 的 MS 譜。

圖 21 係圖示實施例 18 所製備之單分子 5 的 MS 譜。

圖 22 係圖示實施例 19 所製備之單分子 6 的 MS 譜。

圖 23 係圖示實施例 20 所製備之單分子 7 的 MS 譜。

圖 24 係圖示實施例 14 所製備之單分子 1 的 UV-Vis 譜。

圖 25 係圖示實施例 14 所製備之單分子 1 的電化學測量結果(循環伏安法)。

圖 26 係圖示實施例 20 所製備之化合物 7-1 的高效液相層析(HPLC)。

圖 27 係顯示實施例 20 之化合物 7-1 的 UV-Vis 吸收譜(於氯苯溶液中且為膜相(film phase)，其中氯苯溶液係經熱處理)。

圖 28 係圖示實施例 20 之化合物 7-2 的 MS 譜。

圖 29 係圖示實施例 20 之化合物 7-2 的電化學測量結果(循環伏安法)。

圖 30 係示出包含實施例 14 所製備之單分子 1 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 31 係示出包含實施例 15 所製備之單分子 2 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 32 係示出包含實施例 16 所製備之單分子 3 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 33 係示出包含實施例 17 所製備之單分子 4 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 34 係示出包含實施例 18 所製備之單分子 5 的有機

太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 35 係示出包含實施例 19 所製備之單分子 6 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 36 係示出包含實施例 20 所製備之單分子 7 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 37 係示出根據比較例 1 之有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 38 係圖示根據本說明書一實施態樣之有機太陽能電池的層合結構。

#### 【實施方式】

以下詳細描述本案。

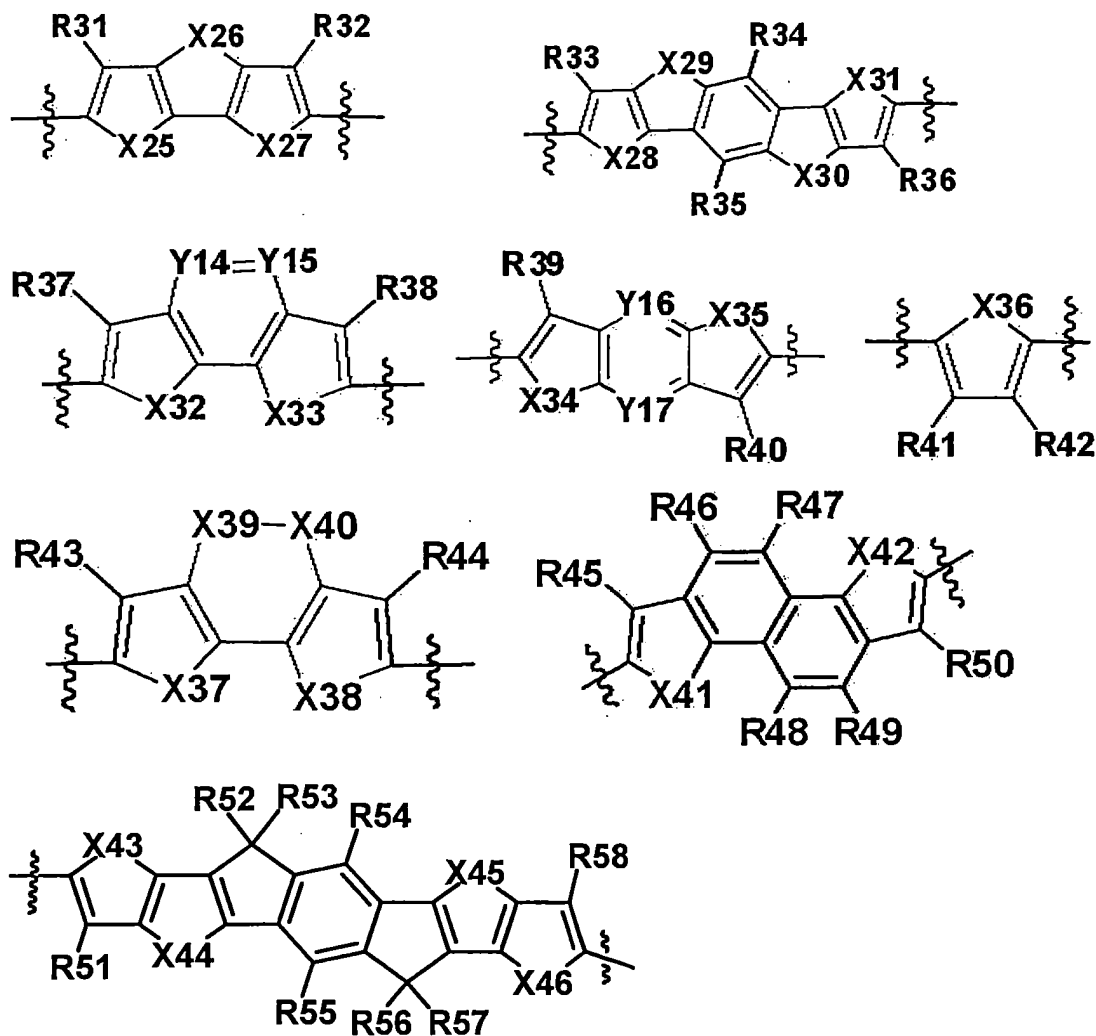
於本說明書中，‘單元’係包含於單分子中之結構，其意指單體藉由聚合而鍵結於單分子中的結構。

於本說明書中，‘包含單元’係指包含於單分子中。

取代基之實例係如後文所述，然而，取代基並不以此為限。

於本說明書之一實施態樣中，單分子係進一步包括選自由下列化學式 3 所示之單元所組成之群組的一或更多單元。

[化學式 3]



化學式 3 中，

R31 至 R58 係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：氫；氘；鹵基(halogen group)；腈基(nitrile group)；硝基；醯亞胺基(imide group)；醯胺基(amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基(alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基

(arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基 (alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基 (arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之矽基 (silyl group)；經取代或未經取代之硼基 (boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基 (alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基 (aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基 (arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基 (heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；以及經取代或未經取代之雜環基，

X25 至 X46 係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：CR<sup>n</sup>R<sup>m</sup>、NR<sup>n</sup>、O、SiR<sup>n</sup>R<sup>m</sup>、PR<sup>n</sup>、S、GeR<sup>n</sup>R<sup>m</sup>、Se 及 Te，

Y14 至 Y17 係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：CR<sup>n</sup>、N、SiR<sup>n</sup>、P 及 GeR<sup>n</sup>，以及

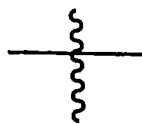
R<sup>n</sup>及 R<sup>m</sup>係彼此相同或不同，且各自獨立地選自由下列所組成之群組：氫；氖；鹵基 (halogen group)；腈基 (nitrile group)；硝基；醯亞胺基 (imide group)；醯胺基 (amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基 (alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基 (arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基 (alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基

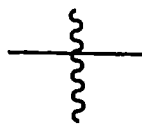
(arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之矽基(silyl group)；經取代或未經取代之硼基(boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基(alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基(aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基(arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基(heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；以及經取代或未經取代之雜環基。

於本說明書之一實施態樣中，單分子中化學式 1 之末端單元以外之單元的重覆數目為 2 至 10。

於此例中，聚合物合成之批間變異(batch to batch variation)的問題被解決，且容易地製備高純度材料。因此，在時間及/或成本上是經濟的。

於本說明書之一實施態樣中，單分子之純度為 90%至 99.99%。



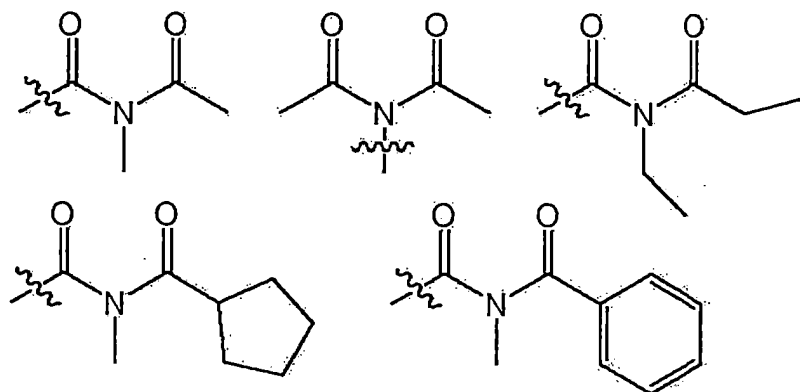
本說明書中， 係指連接至單分子主鏈之處或是連接至其他取代基之處。

本說明書中之用語“經取代或未經取代”係指經一、二或多個選自由下列所組成之群組的取代基取代：氬；鹵基；烷基；烯基；烷氧基；環烷基；矽基(silyl group)；芳基烯基；芳氧基；烷基硫基(alkylthioxy group)；烷基硫氧基(alkylsulfoxy group)；芳基硫氧基(arylsulfoxy group)；硼基(boron group)；烷基胺基(alkylamine

group)；芳烷基胺基 (aralkylamine group)；芳基胺基 (arylamine group)；雜芳基；呋啞基；芳基胺基；芳基；腈基 (nitrile group)；硝基；羥基及雜環基，或者被連接上述取代基中之二或更多取代基的取代基所取代，或者不具取代基。舉例來說，“連接二或更多取代基的取代基”可包括聯苯基 (biphenyl)。換言之，聯苯基可為芳基，或可理解為連接兩個苯基之取代基。

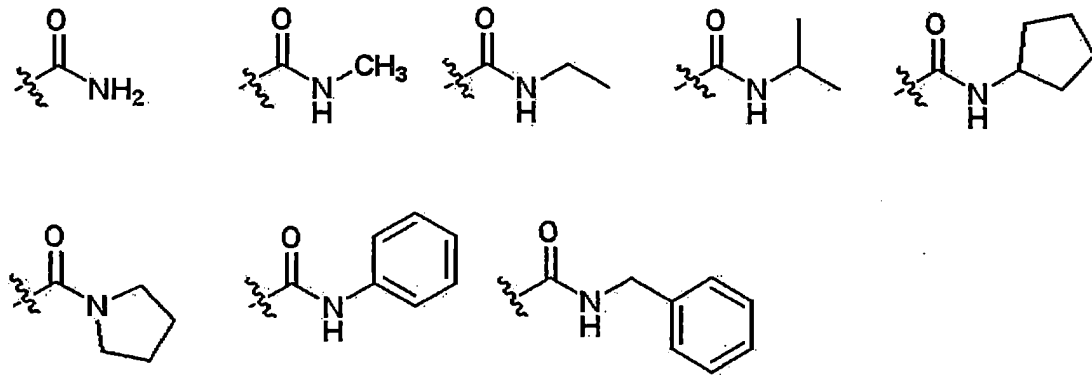
用語“取代”係指化合物中鍵結至碳原子之氫原子係改成其他取代基，取代之位置並無限制只要其為氫原子被取代的位置，即，取代基可取代的位置，即可，且當有二或更多取代基取代時，該二或更多取代基可彼此相同或不同。

本說明書中，醯亞胺基 (imide group) 之碳原子數並無特別限制，較佳為 1 至 25。具言之，可包括具下列結構之化合物，但化合物並不以此為限。



本說明書中，醯胺基 (amide group) 中，醯胺基之氮可被下列者取代一或兩次：氫，具 1 至 25 個碳原子之直

鏈、支鏈或環狀烷基，或具 6 至 25 個碳原子之芳基。具言之，可包括具下列結構式之化合物，但化合物並不以此為限。



本說明書中，烷基可為直鏈或支鏈，且碳原子數並無特別限制，較佳為 1 至 50。其具體實例包括甲基、乙基、丙基、正丙基、異丙基、丁基、正丁基、異丁基、三級丁基、二級丁基、1-甲基-丁基、1-乙基-丁基、戊基、正戊基、異戊基、新戊基、三級戊基、己基、正己基、1-甲基戊基、2-甲基戊基、4-甲基-2-戊基、3,3-二甲基丁基、2-乙基丁基、庚基、正庚基、1-甲基己基、環戊基甲基、環己基甲基、辛基、正辛基、三級辛基、1-甲基庚基、2-乙基己基、2-丙基戊基、正壬基、2,2-二甲基庚基、1-乙基-丙基、1,1-二甲基-丙基、異己基、2-甲基戊基、4-甲基己基、5-甲基己基及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，環烷基並無特別限制，較佳具有 3 至 60 個碳原子。其具體實例包括環丙基、環丁基、環戊基、3-甲基環戊基、2,3-二甲基環戊基、環己基、3-甲基

環己基、4-甲基環己基、2,3-二甲基環己基、3,4,5-三甲基環己基、4-三級丁基環己基、環庚基、環辛基及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，烷氧基可為直鏈、支鏈或環狀。烷氧基之碳原子數並無特別限定，較佳為 1 至 20。其具體實例可包括甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基 (isopropoxy)、異丙基氧基 (i-propyloxy)、正丁氧基、異丁氧基、三級丁氧基、二級丁氧基、正戊基氧基、新戊基氧基、異戊基氧基、正己氧基、3,3-二甲基丁基氧基、2-乙基丁基氧基、正辛基氧基、正壬基氧基、正癸基氧基、苄基氧基、對-甲基苄基氧基及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，烯基可為直鏈或支鏈，碳原子數並無特別限制，較佳為 2 至 40。其具體實例可包括乙烯基、1-丙烯基、異丙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、3-甲基-1-丁烯基、1,3-丁二烯基、烯丙基、1-苯基乙烯基-1-基、2-苯基乙烯基-1-基、2,2-二苯基乙烯基-1-基、2-苯基-2-(萘基-1-基)乙烯基-1-基、2,2-雙(二苯基-1-基)乙烯基-1-基、均二苯乙烯基 (stilbenyl group)、苯乙烯基 (styrenyl group) 及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，芳基可為單環芳基或為多環芳基，且包括其中具 1 至 25 個碳原子之烷基或具 1 至 25 個碳原子之烷氧基係取代的情況。此外，本說明書中之芳基可指芳族

環。

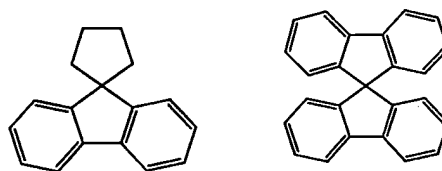
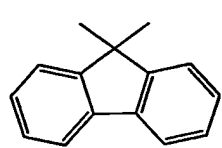
芳基為單環芳基時，碳原子數並無特別限制，較佳為 6 至 25。單環芳基的具體實例可包括苯基、聯苯基、聯三苯基(terphenyl)及其類似者，但並不以此為限。

芳基為多環芳基時，碳原子數並無特別限制，較佳為 10 至 24。多環芳基的具體實例可包括萘基、蒽基(anthracenyl group)、菲基(phenanthryl group)、芘基(pyrenyl group)、芘基(perylene group)、茛基(crycenyl group)、蒽基及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，蒽基可具有兩環狀有機化合物透過一原子而連接的結構。

本說明書中，蒽基可經取代，且相鄰取代基可彼此鍵結以形成環。

蒽基係經取代時，係可包括



及其類似者。但其結構並不以此為限。

本說明書中，矽基(silyl group)係具體包括三甲基矽基、三乙基矽基、三級丁基二甲基矽基、乙烯基二甲基矽基、丙基二甲基矽基、三苯基矽基、二苯基矽基、苯基矽基及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，胺基之碳原子數並無特別限定，較佳為

1 至 30。胺基的具體實例包括甲基胺基、二甲基胺基、乙基胺基、二乙基胺基、苯基胺基、萘基胺基、聯苯基胺基、蔥基胺基 (anthracenylamine group)、9-甲基-蔥基胺基、二苯基胺基、苯基萘基胺基、二甲苯基胺基、苯基甲苯基胺基、三苯基胺基及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，芳基胺基 (arylamine group) 的實例包括經取代或未經取代之單芳基胺基 (monoarylamine group)、經取代或未經取代之二芳基胺基 (diarylamine group) 或者經取代或未經取代之三芳基胺基 (triarylamine group)。芳基胺基中的芳基可為單環芳基 (monocyclic aryl group) 或多環芳基 (multicyclic aryl group)。包含二或多個芳基之芳基胺基可包含單環芳基、多環芳基或同時包含單環芳基和多環芳基。

芳基胺基的具體實例包括苯基胺基、萘基胺基、聯苯基胺基、蔥基胺基、3-甲基-苯基胺基、4-甲基-萘基胺基、2-甲基-聯苯基胺基、9-甲基-蔥基胺基、二苯基胺基、苯基萘基胺基、二甲苯基胺基、苯基甲苯基胺基、吡啶基、三苯基胺基及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，雜環基包含一或多個非碳之原子，其為雜原子，具言之，雜原子可包括一或多個選自由 O、N、Se、S 及其類似者所組成之群組的原子。雜環基之碳原子數並無特別限制，較佳為 2 至 60。雜環基的實例包括噻吩基 (thiophene group)、呋喃基 (furan group)、吡咯基 (pyrrole group)、咪唑基 (imidazole group)、噻唑基

(thiazole group)、噁唑基(oxazole group)、噁二唑基(oxadiazole group)、三唑基(triazole group)、吡啶基(pyridyl group)、聯吡啶基(bipyridyl group)、嘧啶基(pyrimidyl group)、三嗪基(triazine group)、三唑基(triazole group)、吡啶基(acridyl group)、嗒嗪基(pyridazine group)、吡嗪基(pyrazinyl group)、喹啉基(quinolinyl group)、喹唑啉基(quinazoline group)、喹噁啉基(quinoxalinylyl group)、呋嗪基(phthalazinyl group)、吡啶并嘧啶基(pyridopyrimidinyl group)、吡啶并吡嗪基(pyridopyrazinyl group)、吡嗪并吡嗪基(pyrazinopyrazinyl group)、異喹啉基(isoquinoline group)、吲哚基(indole group)、咔唑基(carbazole group)、苯并噁唑基(benzoxazole group)、苯并咪唑基(benzimidazole group)、苯并噻唑基(benzothiazole group)、苯并咔唑基(benzocarbazole group)、苯并噻吩基(benzo thiophene group)、二苯并噻吩基(dibenzothiophene group)、苯并呋喃基(benzofuranyl group)、菲啉基(phenanthroline group)、噻唑基(thiazolyl group)、異噁唑基(isoxazolyl group)、噁二唑基(oxadiazolyl group)、噻二唑基(thiadiazolyl group)、苯并噻唑基(benzothiazolyl group)、啡噻嗪基(phenothiazinyl group)、二苯并呋喃基(dibenzofuranyl group)及其類似者，但並不以此為限。

本說明書中，芳氧基、芳基硫基(arylthioxy group)、芳基硫氧基(arylsulfoxy group)及芳烷基胺基(aralkylamine

group)中的芳基係與上述芳基的實例相同。芳氧基的具體實例包括苯氧基、對-甲苯基氧基、間-甲苯基氧基、3,5-二甲基-苯氧基、2,4,6-三甲基苯氧基、對-三級丁基苯氧基、3-聯苯基氧基、4-聯苯基氧基、1-萘基氧基、2-萘基氧基、4-甲基-1-萘基氧基、5-甲基-2-萘基氧基、1-蒽基氧基(1-anthryloxy)、2-蒽基氧基、9-蒽基氧基、1-菲基氧基、3-菲基氧基、9-菲基氧基及其類似者，芳基硫基(arylthioxy group)的實例包括苯基硫基、2-甲基苯基硫基、4-三級丁基苯基硫基及其類似者，芳基硫氧基(arylsulfoxy group)的實例包括苯硫氧基(benzenesulfoxy group)、對-甲苯硫氧基(p-toluenesulfoxy group)及其類似者，但其實例並不以此為限。

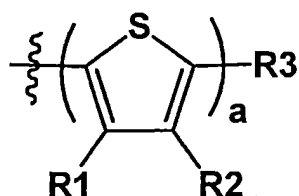
本說明書中，雜芳基胺基(heteroarylamine group)中的雜芳基可選自於上述雜環基之實例。

本說明書中，烷基硫基(alkylthioxy group)及烷基硫氧基(alkylsulfoxy group)中的烷基係與上述烷基之實例相同。烷基硫基(alkylthioxy group)的具體實例包括甲基硫基(methylthioxy group)、乙基硫基(ethylthioxy group)、三級丁基硫基(tert-butylthioxy group)、己基硫基(hexylthioxy group)、辛基硫基(octylthioxy group)及其類似者，而烷基硫氧基(alkylsulfoxy group)的實例包括甲磺醯基(mesyl group)、乙基硫氧基(ethylsulfoxy group)、丙基硫氧基(propylsulfoxy group)、丁基硫氧基(butylsulfoxy group)及其類似者，但其實例並不以此為限。

於本說明書之一實施態樣中，X1 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，化學式 1 係如下列化學式 1-1 所示。

[化學式 1-1]

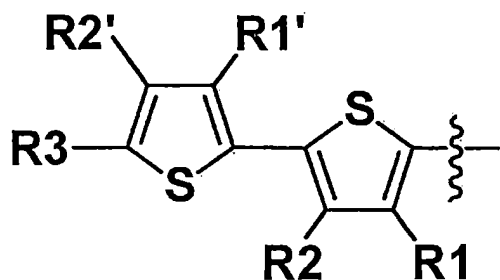


化學式 1-1 中，

A 以及 R1 至 R3 係如同前文所定義者。

於本說明書之一實施態樣中，a 為 2。

於本說明書之一實施態樣中，化學式 1 可如下列化學式所示。



R1 至 R3 係如同前文所定義者，

R1' 及 R2' 係彼此相同或不同，且各自獨立地具有與 R1 及 R2 相同之定義。

於本說明書之一實施態樣中，R3 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R3 為具 1 至 30 個碳原子的經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R3 為己基。

於本說明書之一實施態樣中，R1 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R2 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，X2 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X5 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X3 為 NR。

於本說明書之一實施態樣中，X4 為 NR。

於本說明書之一實施態樣中，X 為 O。

於本說明書之一實施態樣中，X' 為 O。

於本說明書之一實施態樣中，Y1 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，Y2 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，Y3 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，Y4 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，Y5 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，X8 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X9 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X12 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X13 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X14 為 NR。

於本說明書之一實施態樣中，X15 為 NR。

於本說明書之一實施態樣中，X16 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X17 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X 為 O。

於本說明書之一實施態樣中，X' 為 O。

於本說明書之一實施態樣中，X”為 O。

於本說明書之一實施態樣中，X'”為 O。

於本說明書之一實施態樣中，X18 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X19 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X20 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X21 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，Y8 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，Y9 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，Y10 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，Y11 為 N。

於本說明書之一實施態樣中，X22 為 NR。

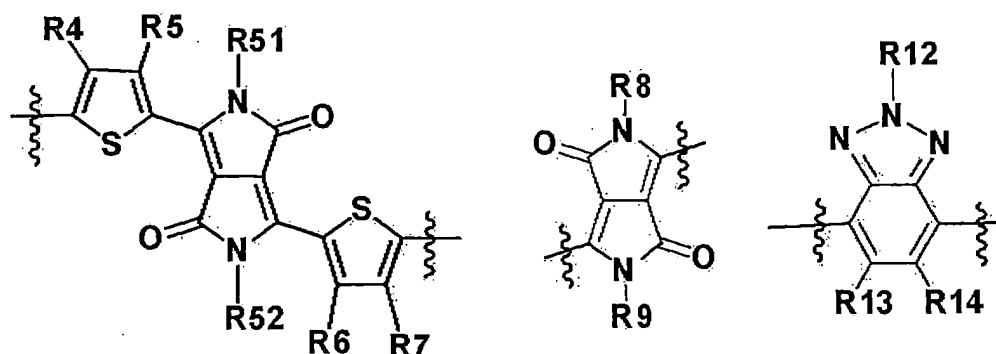
於本說明書之一實施態樣中，X23 為 NR。

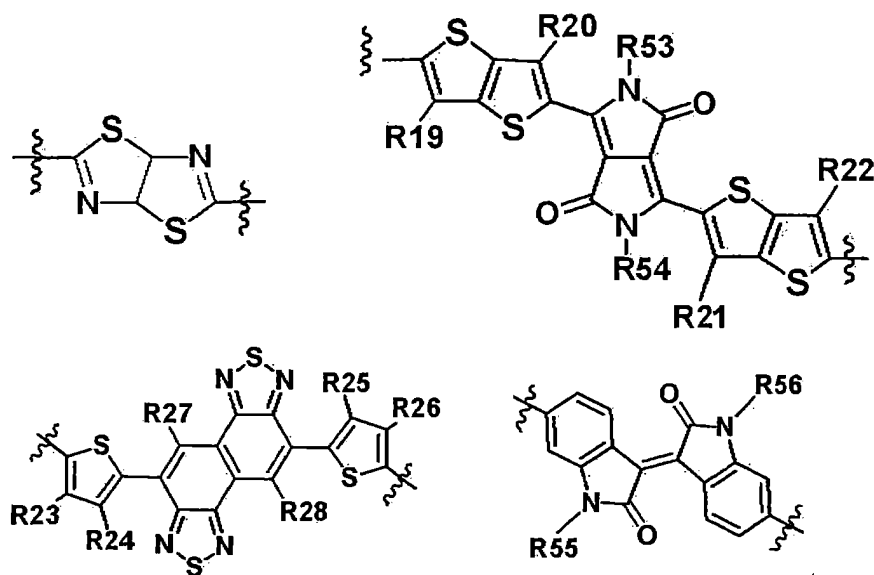
於本說明書之一實施態樣中，R29 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R30 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，化學式 2 所示之單元係  
選自下列化學式 2-1 所示之單元。

[化學式 2-1]





化學式 2-1 中，

R4 至 R9、R12 至 R14、以及 R19 至 R26 係如同前文所定義者，

R51 至 R56 係彼此相同或不同，且各自獨立地具有如同上述 R 之定義。

於本說明書之一實施態樣中，R40 至 R43 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R4 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R5 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R6 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R7 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R51 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R51 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R52 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R52 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R53 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R53 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R54 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R54 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R8 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R8 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R9 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R9 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R13 為鹵基。

於本說明書之一實施態樣中，R13 為氟基。

於本說明書之一實施態樣中，R14 為鹵基。

於本說明書之一實施態樣中，R14 為氟基。

於本說明書之一實施態樣中，R12 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R12 為 2-丁基辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R19 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R20 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R21 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R22 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R23 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R24 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R25 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R26 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R 及 R'係彼此相同或不同，且各自獨立地為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基；經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷氧基；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之雜環基。

於本說明書之一實施態樣中，X36 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X34 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X35 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，Y16 為 CR''。

於本說明書之一實施態樣中，Y17 為 CR''。

於本說明書之一實施態樣中，X37 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X38 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X39 為 CR''R''。

於本說明書之一實施態樣中，X40 為 O。

於本說明書之一實施態樣中，X25 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X27 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X26 為 SiR''R''。

於本說明書之一實施態樣中，X26 為 GeR''R''。

於本說明書之一實施態樣中，X26 為 NR''。

於本說明書之一實施態樣中，X28 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X29 為 SiR''R''。

於本說明書之一實施態樣中，X29 為 CR”R””。

於本說明書之一實施態樣中，X30 為 SiR”R””。

於本說明書之一實施態樣中，X30 為 CR”R””。

於本說明書之一實施態樣中，X31 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X32 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X33 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，Y14 為 CR”。

於本說明書之一實施態樣中，Y15 為 CR”。

於本說明書之一實施態樣中，X41 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，X42 為 S。

於本說明書之一實施態樣中，R 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R 為 3,7-二甲基辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R”為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷氧基。

於本說明書之一實施態樣中，R”為 2-乙基己氧基。

於本說明書之一實施態樣中，R”為辛氧基。

於本說明書之一實施態樣中，R”為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R”為 3,7-二甲基辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R”為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R””為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為 3,7-二甲基辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經取代或未經取代之烷氧基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經取代或未經取代之雜環基，其含有 N、O 及 S 原子之一或多者。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經取代或未經取代之噻吩基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經烷基取代之噻吩基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經己基取代之噻吩基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經 2-乙基己基取代之噻吩基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經取代或未經取代之芳基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經取代或未經取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經烷基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經己基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R''為經取代或未經取

代之芳基。

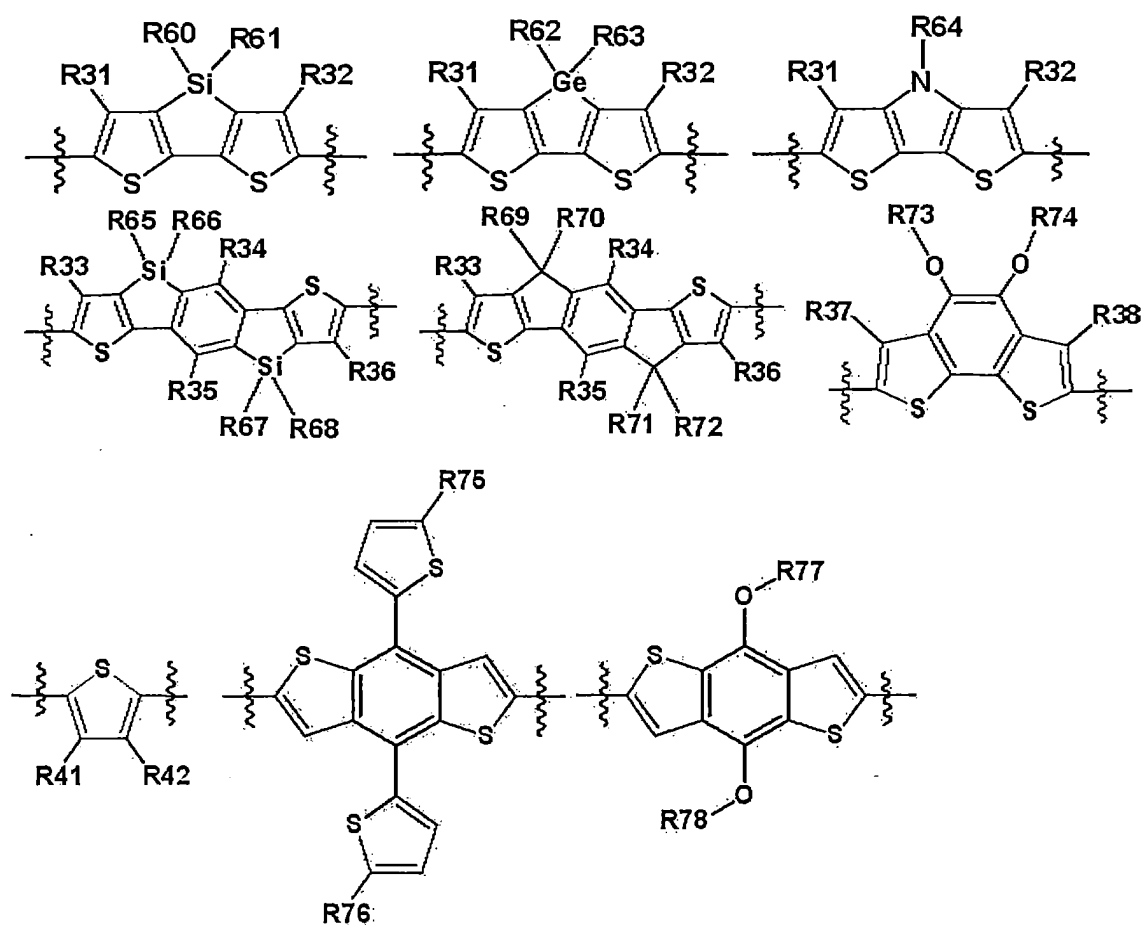
於本說明書之一實施態樣中，R'”為經取代或未經取代之苯基。

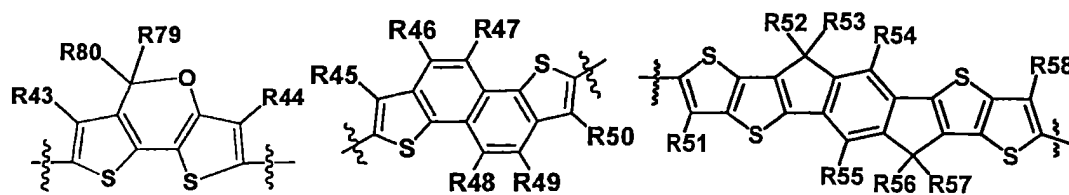
於本說明書之一實施態樣中，R'”為經烷基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R'”為經己基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，化學式 3 所示之單元係選自下列化學式 3-1 所示之單元。

[化學式 3-1]





化學式 3-1 中，

R31 至 R38 以及 R41 至 R58 係如申請專利範圍第 2 項中所定義者，

R60 至 R80 係彼此相同或不同，且各自獨立地為氫；氘；鹵基(halogen group)；腈基(nitrile group)；硝基；醯亞胺基(imide group)；醯胺基(amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基(alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基(arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基(alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基(arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之矽基(silyl group)；經取代或未經取代之硼基(boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基(alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基(aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基(arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基(heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之雜環基。

於本說明書之一實施態樣中，R41 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R42 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R75 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R75 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R75 為己基。

於本說明書之一實施態樣中，R76 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R76 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R76 為己基。

於本說明書之一實施態樣中，R77 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R77 為辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R77 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R78 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R78 為辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R78 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R79 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R79 為 3,7-二甲基辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R80 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R80 為 3,7-二甲基辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R60 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R60 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R61 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R61 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R62 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R62 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R63 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R63 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R64 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R64 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R65 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R65 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R66 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R66 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R67 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R67 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R68 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R68 為 2-乙基己基。

於本說明書之一實施態樣中，R69 為經取代或未經取代之芳基。

於本說明書之一實施態樣中，R69 為經取代或未經取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R69 為經烷基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R69 為經己基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R70 為經取代或未經取代之芳基。

於本說明書之一實施態樣中，R70 為經取代或未經取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R70 為經烷基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R70 為經己基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R71 為經取代或未經取代之芳基。

於本說明書之一實施態樣中，R71 為經取代或未經取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R71 為經烷基取代之苯

基。

於本說明書之一實施態樣中，R71 為經己基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R72 為經取代或未經取代之芳基。

於本說明書之一實施態樣中，R72 為經取代或未經取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R72 為經烷基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R72 為經己基取代之苯基。

於本說明書之一實施態樣中，R73 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R73 為辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R74 為經取代或未經取代之直鏈或支鏈烷基。

於本說明書之一實施態樣中，R74 為辛基。

於本說明書之一實施態樣中，R43 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R44 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R31 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R32 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R33 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R34 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R35 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R36 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R37 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，R38 為氫。

於本說明書之一實施態樣中，單分子係如下列化學式 4 至化學式 6 中任一者所示。

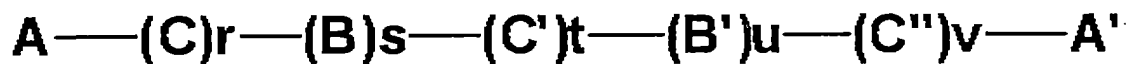
[化學式 4]



[化學式 5]



[化學式 6]



化學式 4 至 6 中，

A 及 A' 係彼此相同或不同，且各自獨立地為化學式 1 所示之末端單元，

B 及 B' 係彼此相同或不同，且各自獨立地為化學式 2 所示之單元，

C、C' 及 C'' 係彼此相同或不同，且各自獨立地為化學式 3 所示之單元，

l 為單元之重覆數目，且  $0 \leq l \leq 10$ ，

m 為單元之重覆數目，且  $0 \leq m \leq 10$ ，

n 為單元之重覆數目，且  $0 \leq n \leq 10$ ，

$l+n \geq 2$ ，

$2 \leq l+m+n \leq 10$ ，

$o$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq o \leq 10$ ，

$p$  為單元之重覆數目，且  $2 \leq p \leq 10$ ，

$q$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq q \leq 10$ ，

$2 \leq o+p+q \leq 10$ ，

$r$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq r \leq 10$ ，

$s$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq s \leq 10$ ，

$t$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq t \leq 10$ ，

$u$  為單元之重覆數目，且  $2 \leq u \leq 10$ ，

$v$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq v \leq 10$ ，

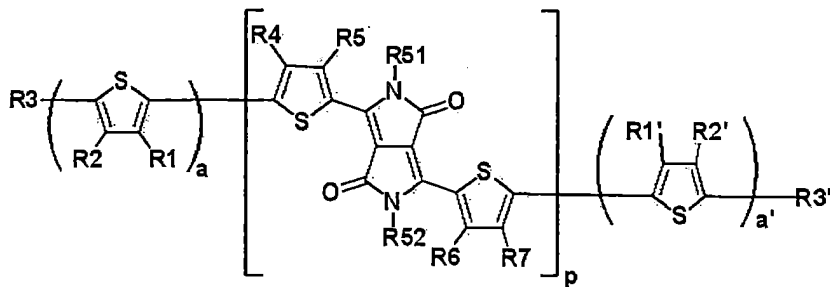
$s+u \geq 2$ ，

$2 \leq r+s+t+u+v \leq 10$ ，以及

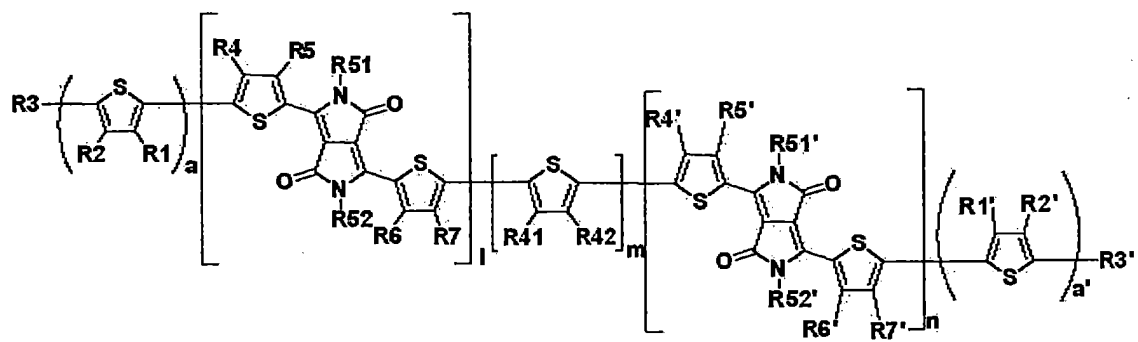
當  $l$ 、 $m$ 、 $n$ 、 $o$ 、 $p$ 、 $q$ 、 $r$ 、 $s$ 、 $t$ 、 $u$  及  $v$  各自為二或更多時，二或更多  $B$ 、 $B'$ 、 $C$ 、 $C'$  及  $C''$  係彼此相同或不同。

於本說明書之一實施態樣中，單分子係如下列化學式 7 至下列化學式 21 中任一者所示。

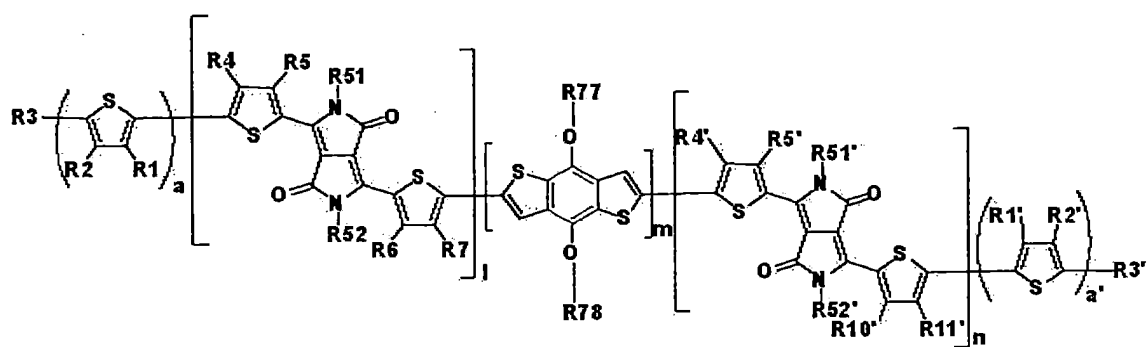
[化學式 7]



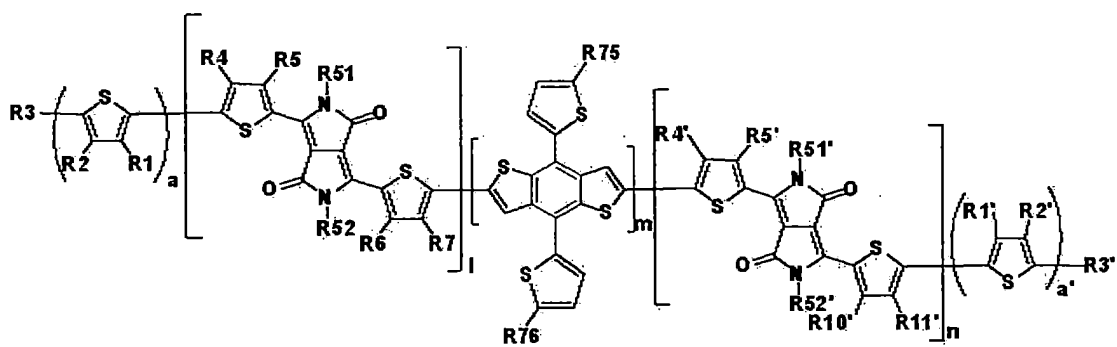
[化學式 8]



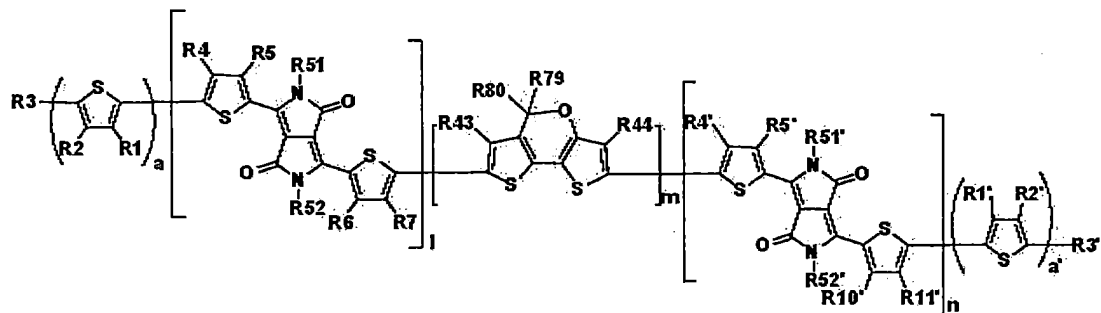
[化學式 9]



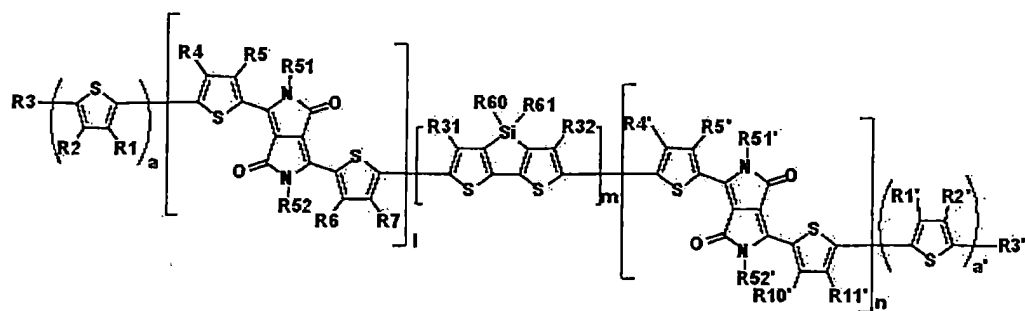
[化學式 10]



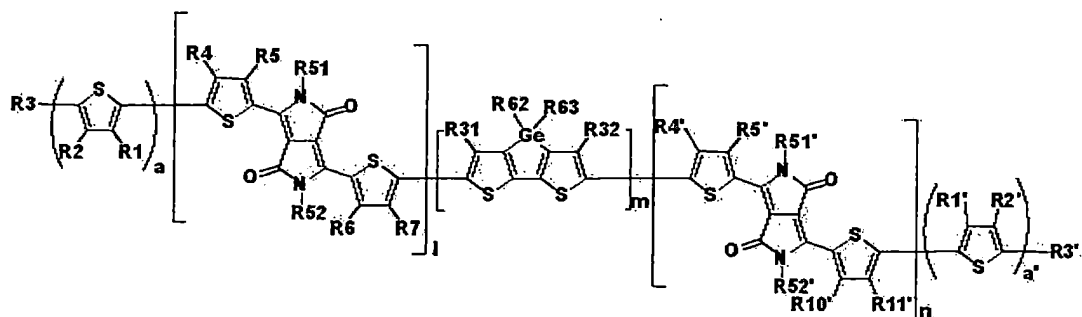
[化學式 11]



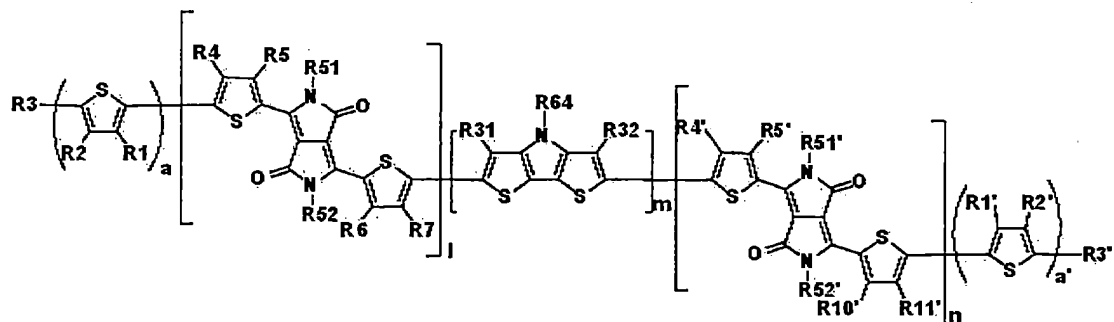
[化學式 12]



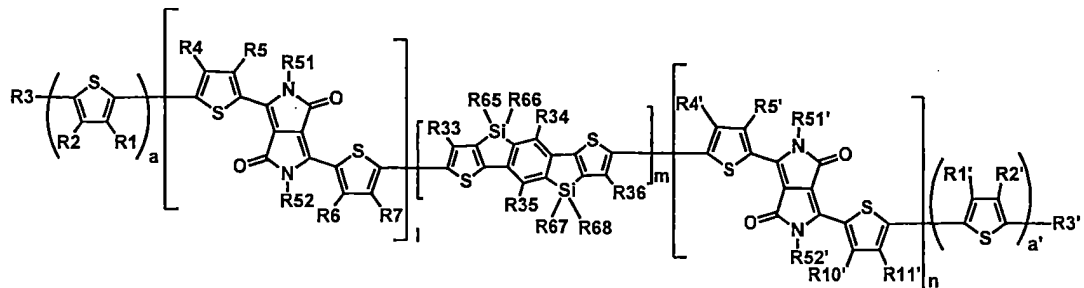
[化學式 13]



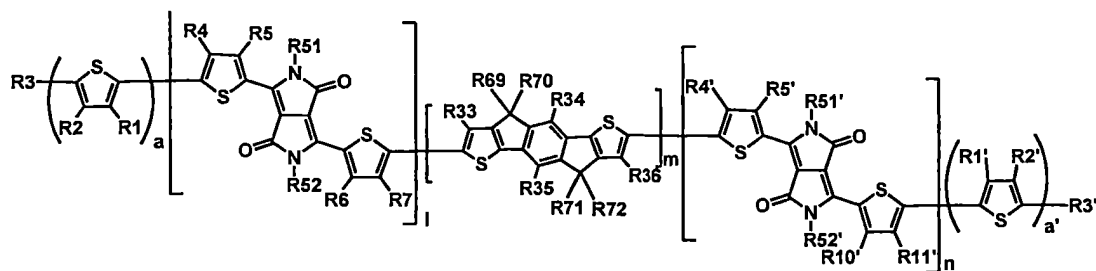
[化學式 14]



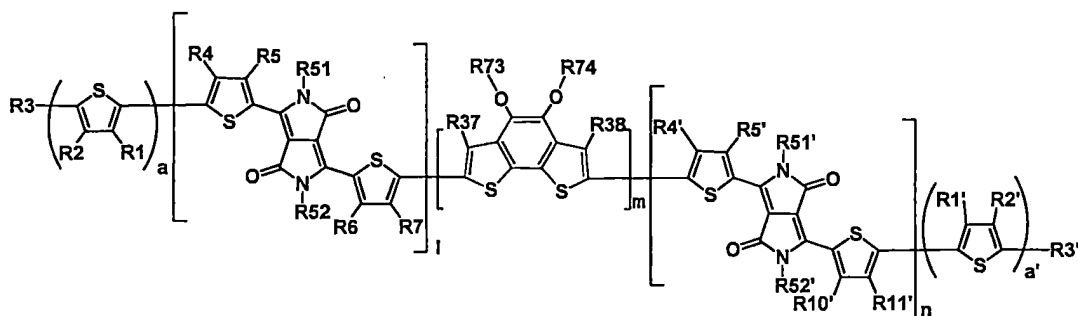
[化學式 15]



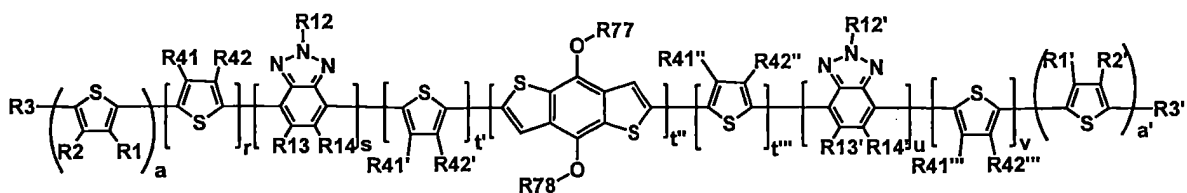
[化學式 16]



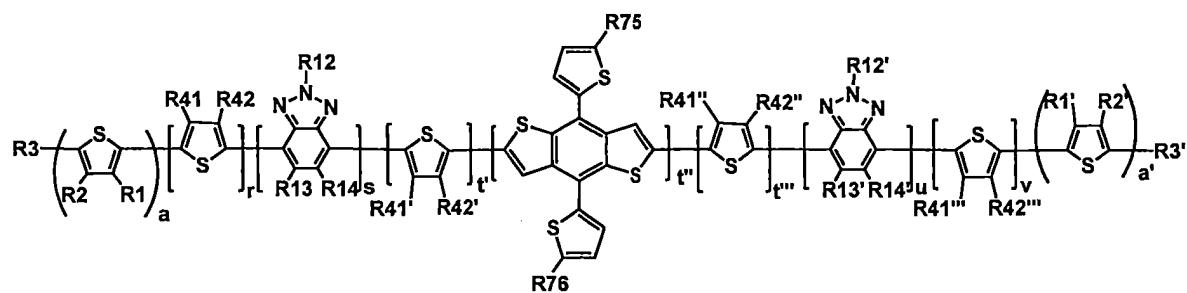
[化學式 17]



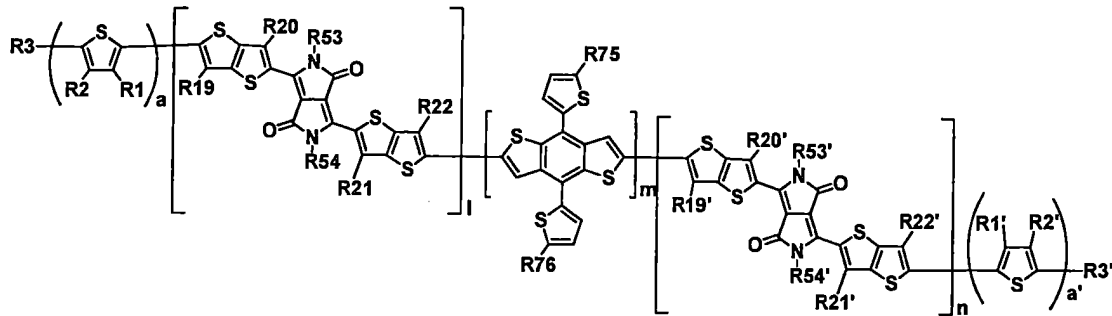
[化學式 18]



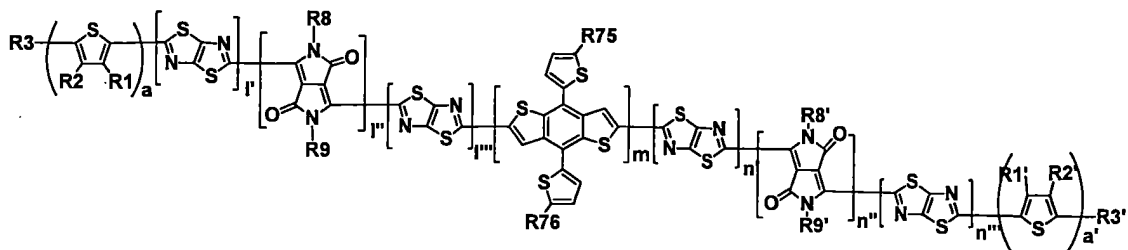
[化學式 19]



[化學式 20]



[化學式 21]



化學式 7 至 21 中，

a、R1 至 R9、R12 至 R14、以及 R19 至 R22 係如同前文所定義者，

a'係具有如同 a 之定義，

R1'至 R9'、R12'至 R14'、以及 R19'至 R22'係彼此相同或不同，且各自獨立地具有如同 R1 至 R9、R12 至 R14、以及 R19 至 R22 之定義，

R31 至 R44、R41'、R42'、R41''、R42''、R41'''、R42'''、R51、R52、R51'、R52'、以及 R60 至 R80 係彼此相同或不同，且各自獨立地為氫；氘；鹵基 (halogen group)；腈基 (nitrile group)；硝基；醯亞胺基 (imide group)；醯胺基 (amide group)；羥基；經取代或未經取代之烷基；經取代或未經取代之環烷基；經取代或未經取代

之烷氧基；經取代或未經取代之芳氧基；經取代或未經取代之烷基硫基(alkylthioxy group)；經取代或未經取代之芳基硫基(arylthioxy group)；經取代或未經取代之烷基硫氧基(alkylsulfoxy group)；經取代或未經取代之芳基硫氧基(arylsulfoxy group)；經取代或未經取代之烯基；經取代或未經取代之矽基(silyl group)；經取代或未經取代之硼基(boron group)；經取代或未經取代之烷基胺基(alkylamine group)；經取代或未經取代之芳烷基胺基(aralkylamine group)；經取代或未經取代之芳基胺基(arylamine group)；經取代或未經取代之雜芳基胺基(heteroarylamine group)；經取代或未經取代之芳基；或經取代或未經取代之雜環基，

$l$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq l \leq 10$ ，

$m$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq m \leq 10$ ，

$n$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq n \leq 10$ ，

$l+n \geq 2$ ，

$2 \leq l+m+n \leq 10$ ，

$l' + l'' + l''' = l$ ，

$n' + n'' + n''' = n$ ，

$p$  為單元之重覆數目，且  $2 \leq p \leq 10$ ，

$r$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq r \leq 10$ ，

$s$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq s \leq 10$ ，

$t$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq t \leq 10$ ，

$u$  為單元之重覆數目，且  $2 \leq u \leq 10$ ，

$v$  為單元之重覆數目，且  $0 \leq v \leq 10$ ，

$s+u \geq 2$ ，

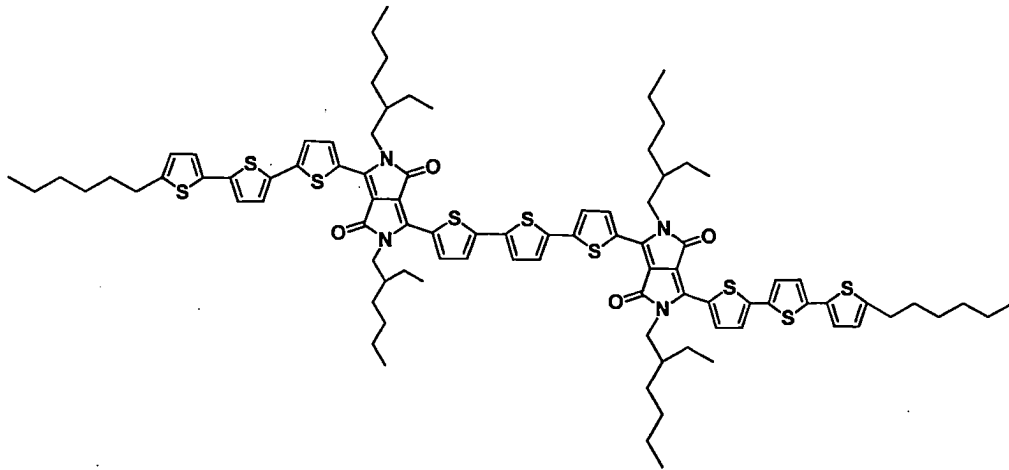
$2 \leq r+s+t+u+v \leq 10$ ，

$t'+t''+t'''=t$ ，以及

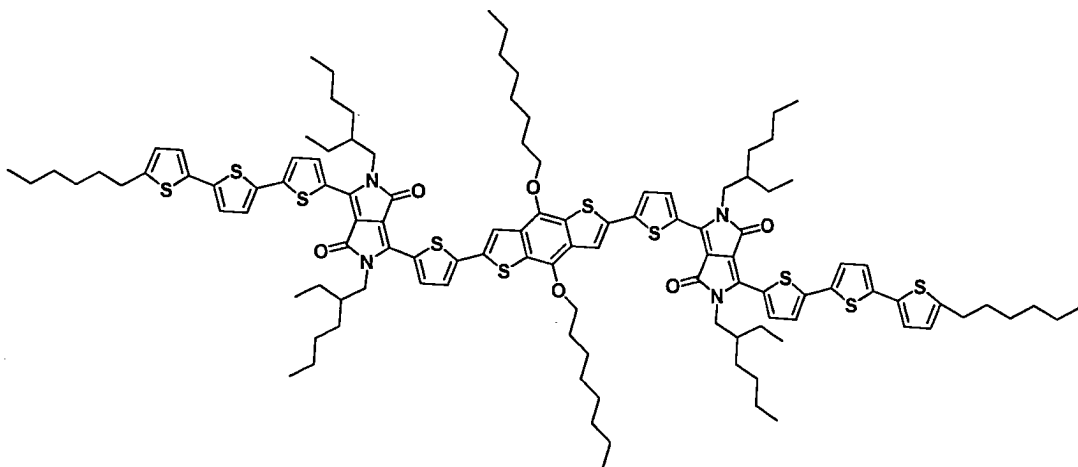
當  $l$ 、 $m$ 、 $n$ 、 $p$ 、 $r$ 、 $s$ 、 $t$ 、 $u$  及  $v$  係各為 2 或更多時，二或更多 [ ] 之結構係彼此相同或不同。

於本說明書之一實施態樣中，單分子可為下列單分子中之任一者。

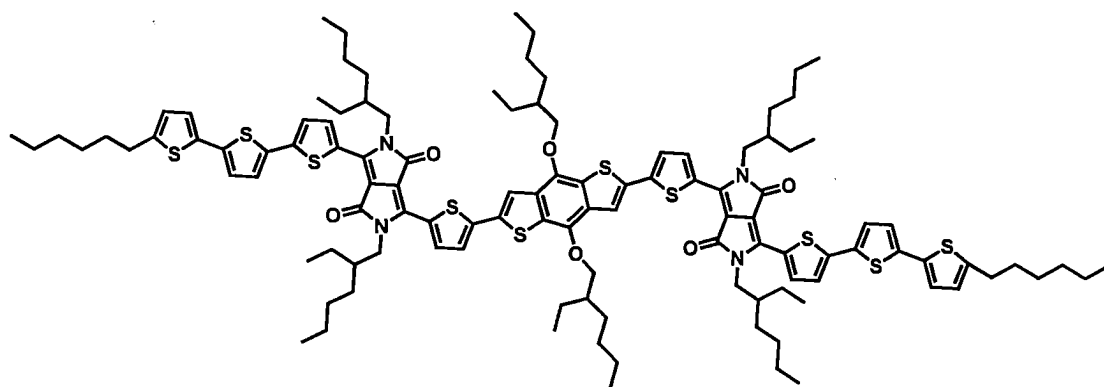
[單分子 1]



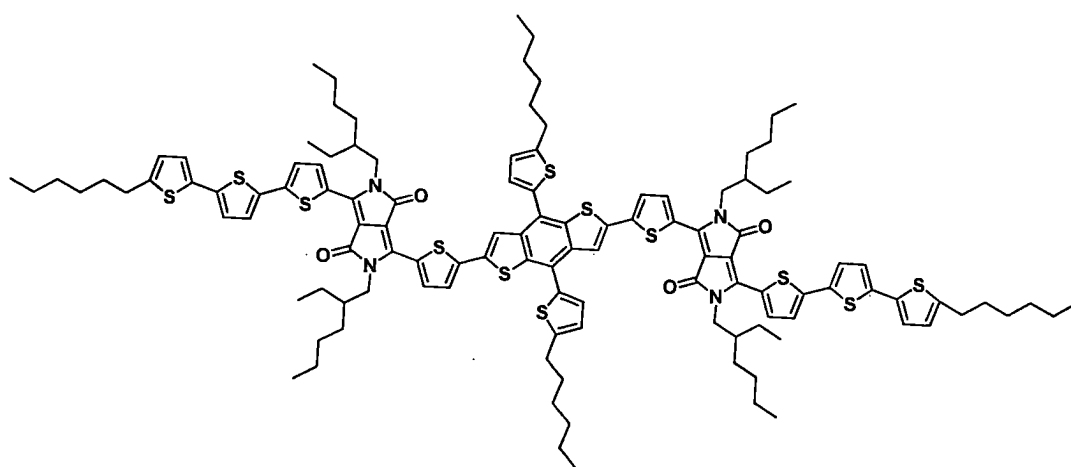
[單分子 2]



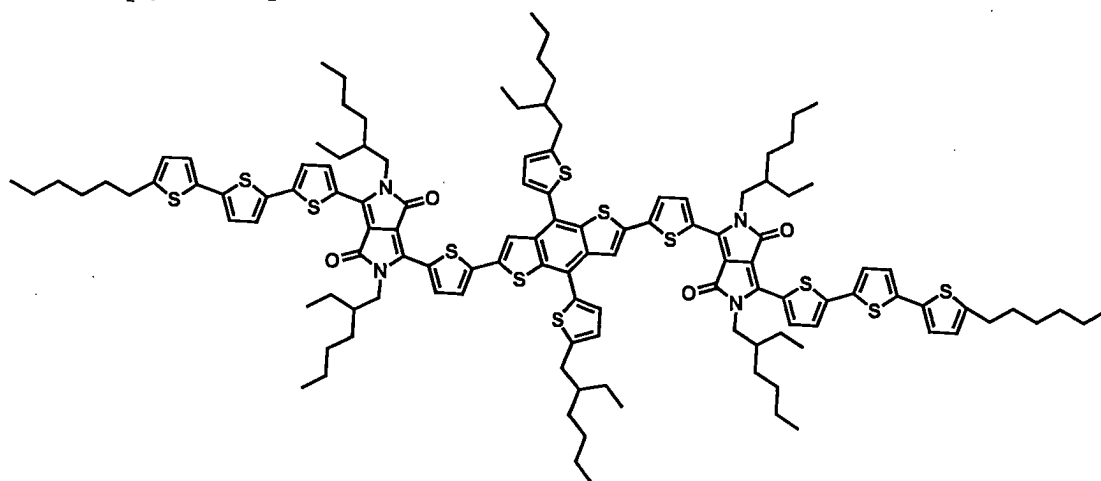
[單分子 3]



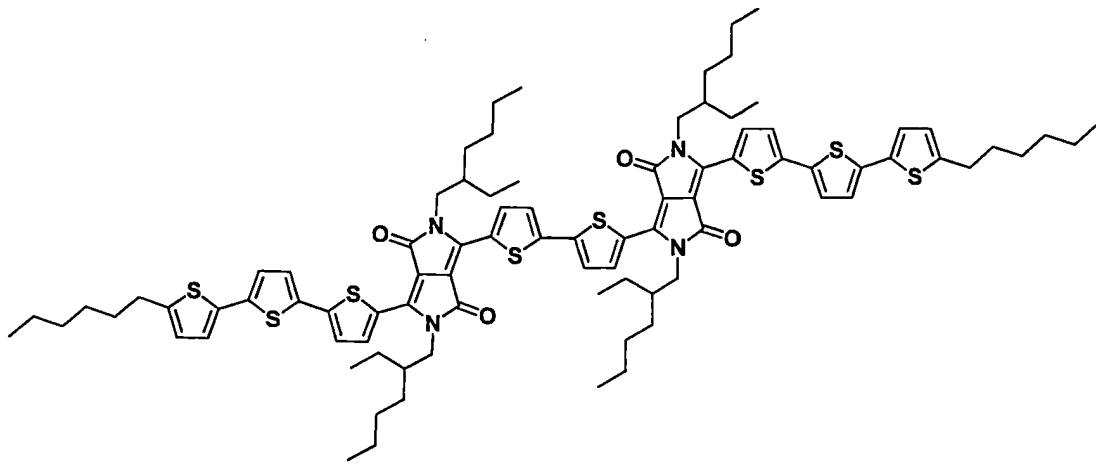
[單分子 4]



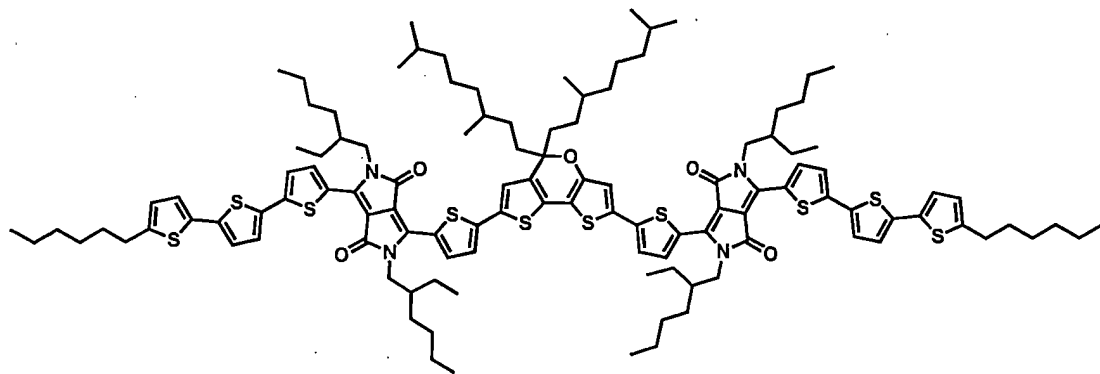
[單分子 5]



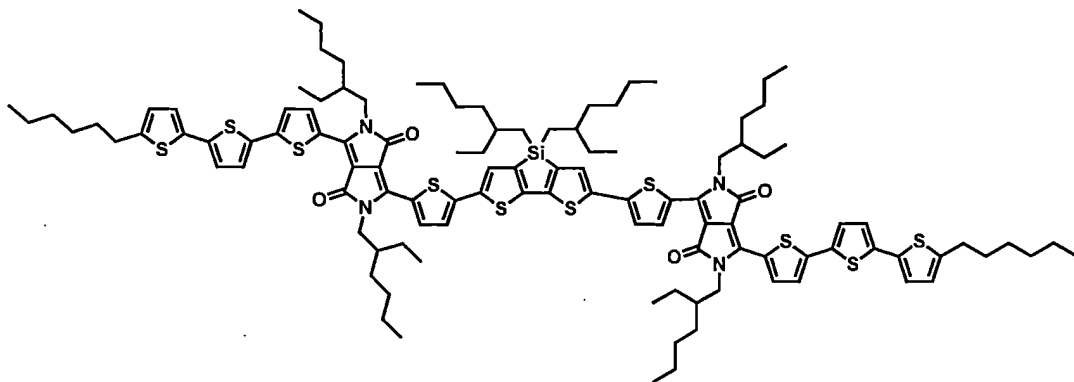
[單分子 6]



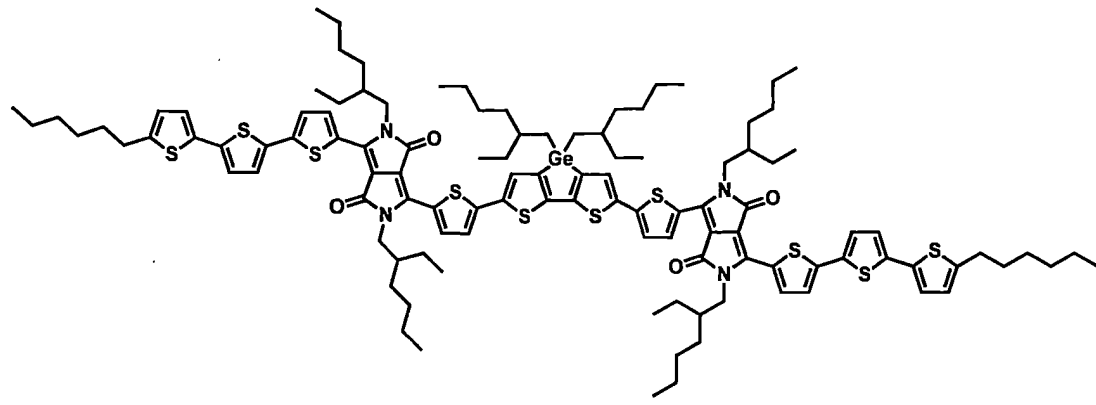
[單分子 7]



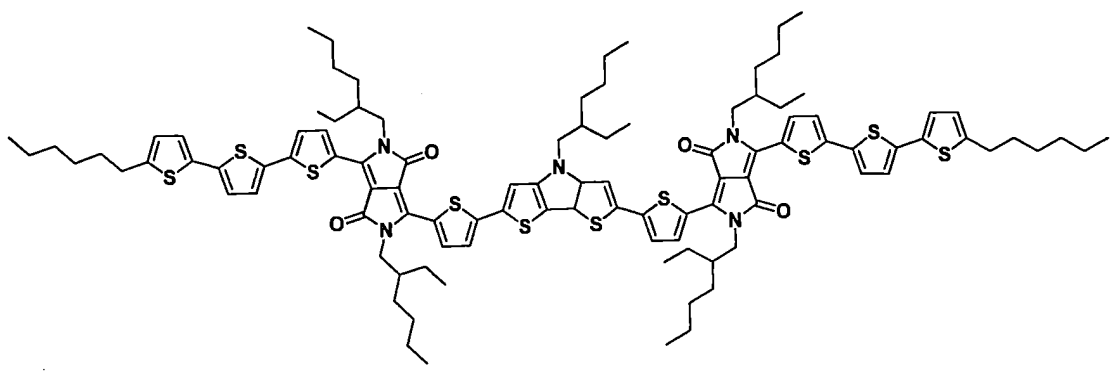
[單分子 8]



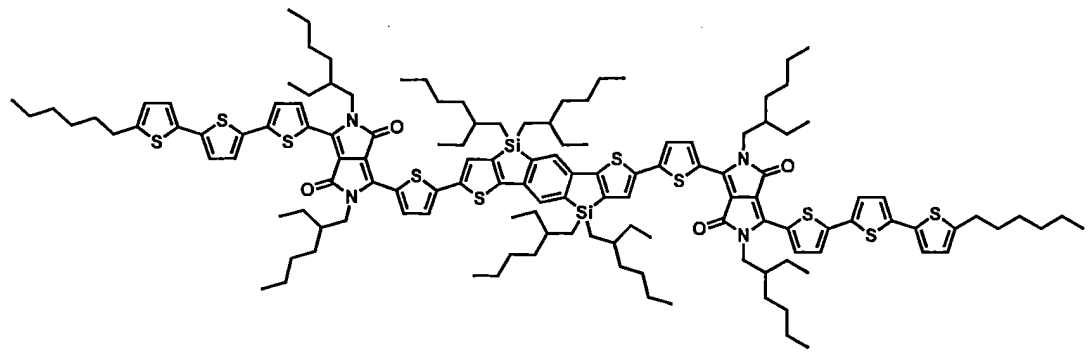
[單分子 9]



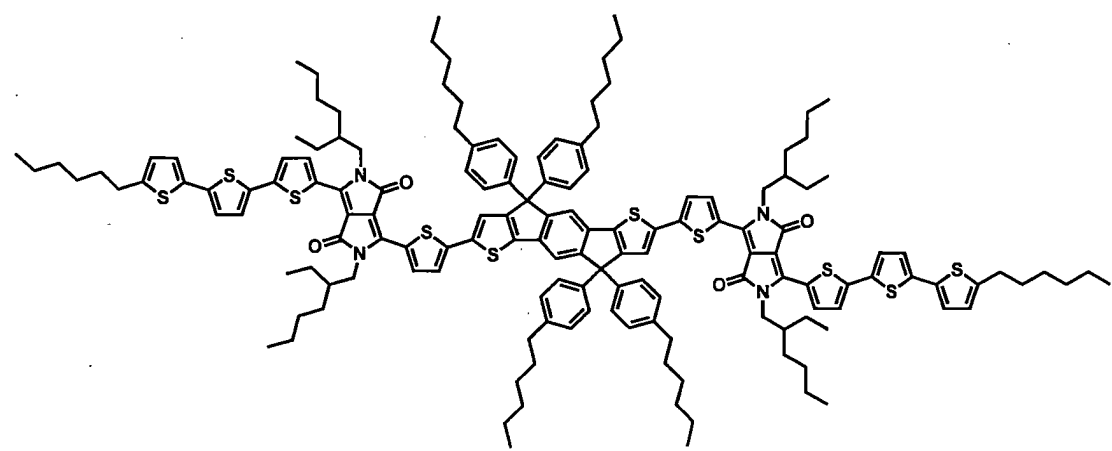
[單分子 10]



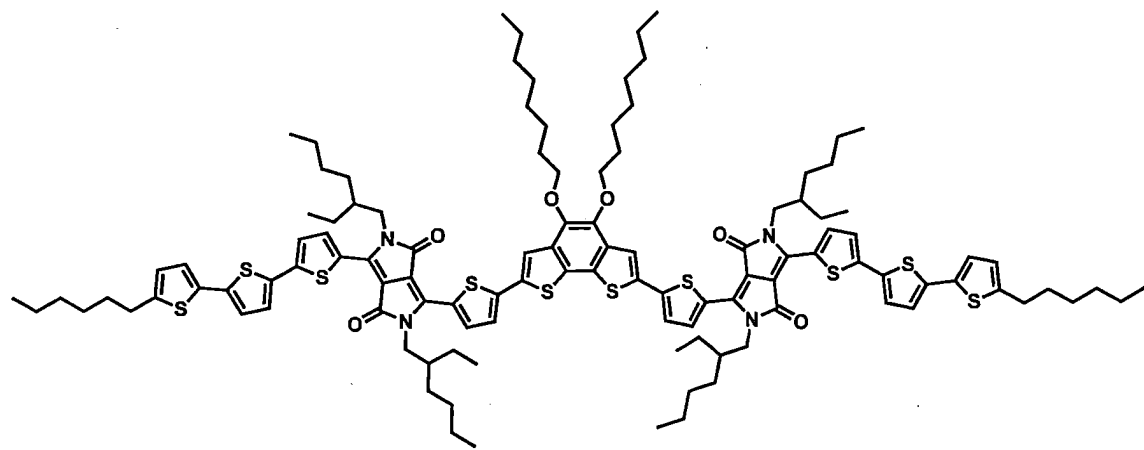
[單分子 11]



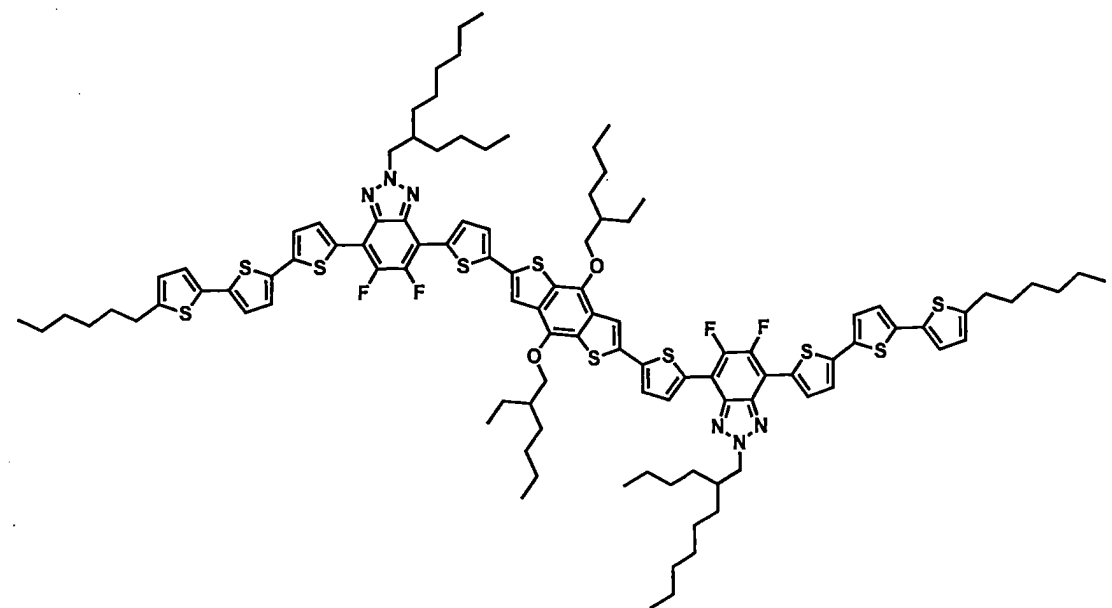
[單分子 12]



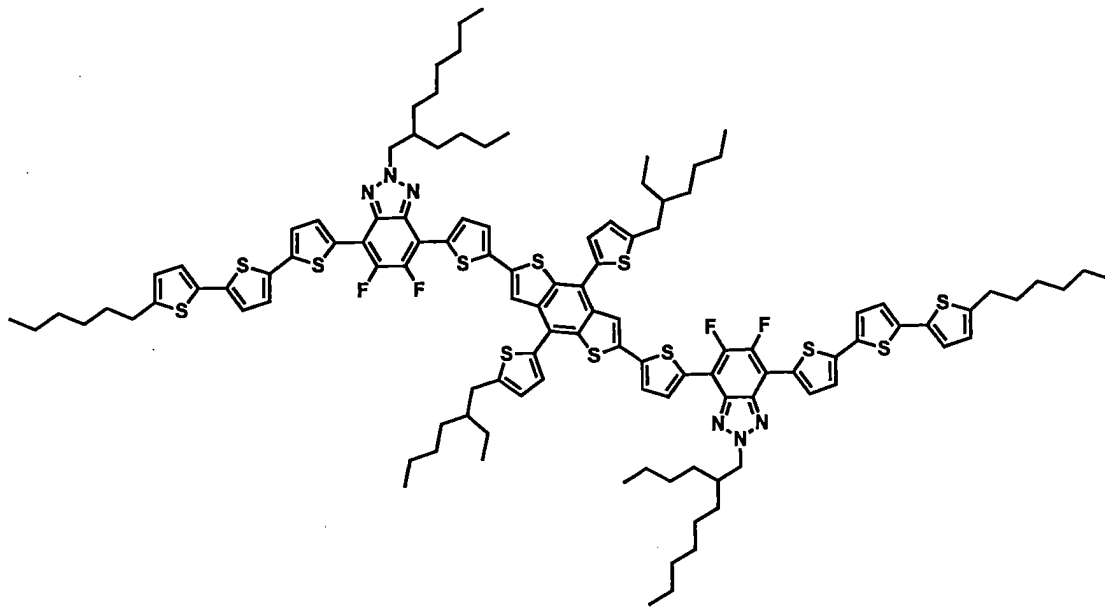
[單分子 13]



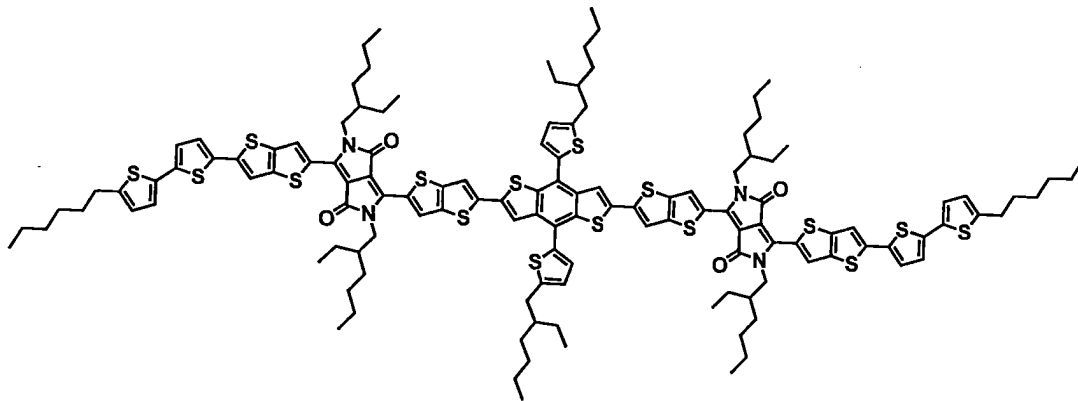
[單分子 14]



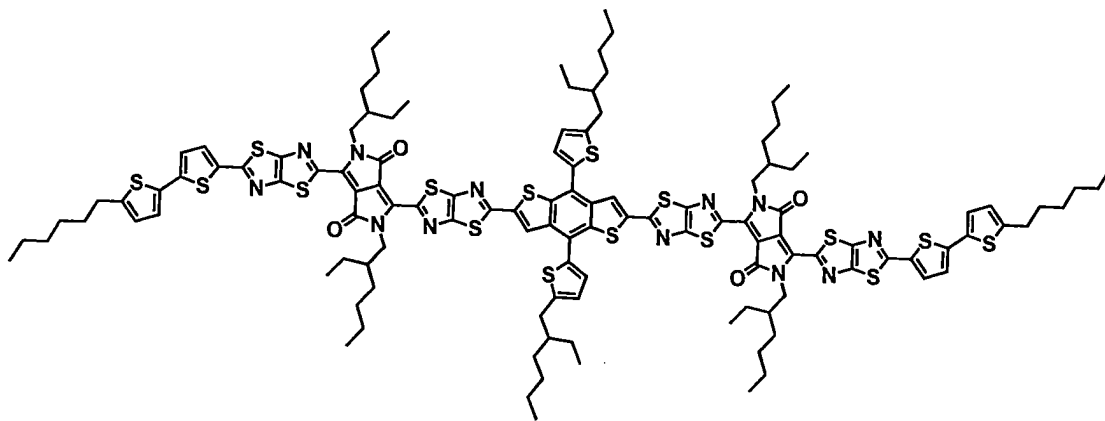
[單分子 15]



[單分子 16]



[單分子 17]



於本說明書之一實施態樣中，單分子的分子量為 100 g/mol 至 20,000 g/mol。於另一實施態樣中，單分子的分子量為 500 g/mol 至 10,000 g/mol。

可依後文所述之製備例以製備單分子。

本說明書中，化學式 1 所示之末端單元係藉由將環含若干 X1 之一端以反應基取代，且將另一端以末端基團取代而製備。根據本說明書之一實施態樣的單分子可藉由再以化學式 2 所示之單元、或者化學式 2 所示之單元及化學式 3 所示之單元取代所製備之兩末端單元間之空間而製備。

根據本說明書之一實施態樣，單分子 1 至 17 以外的單分子可藉由於需要時改變化學式 2 及化學式 3 所示之單元及其取代基而製備。

根據本說明書之單分子可利用多步驟化學反應製備。在透過烷化反應 (alkylation reaction)、格任亞反應 (Grignard reaction)、鈴木偶合反應 (Suzuki coupling reaction)、史帝勒偶合反應 (Stille coupling reaction) 等等來製備單體後，可透過碳-碳偶合反應 (carbon-carbon coupling reaction) 如史帝勒偶合反應來製備最終單分子。當欲引入之取代基是硼酸或硼酸酯化合物時，可使用鈴木偶合反應，而當欲引入的取代基是三丁基錫化合物時，可使用史帝勒偶合反應，但其方法並不以此為限。

本說明書之一實施態樣係提供有機太陽能電池，其包括：第一電極；設為相對於第一電極的第二電極；以及設

於第一電極和第二電極之間且包含光活性層的一或多層有機材料層，有機材料層之一或多層係包含該單分子。

根據本發明一實施態樣之有機太陽能電池係包括第一電極、光活性層以及第二電極。有機太陽能電池可進一步包括基板、電洞傳輸層及/或電子傳輸層。

於本說明書之一實施態樣中，當有機太陽能電池自外部光源接受光子 (photon) 時，係在電子供體 (electron donor) 和電子受體 (electron acceptor) 之間產生電子和電洞。所產生的電洞經由電子供體層傳輸至陽極。

於本說明書之一實施態樣中，有機材料層係包含電洞傳輸層、電洞注入層、或同時執行電洞傳輸及電洞注入的層，且電洞傳輸層、電洞注入層、或同時執行電洞傳輸及電洞注入的層係包含該單分子。

於另一實施態樣中，該有機材料層係包括電子注入層、電子傳輸層、或同時執行電子注入及電子傳輸的層，且電子注入層、電子傳輸層、或同時執行電子注入及電子傳輸的層係包含該單分子。

圖 38 係圖示根據本說明書一實施態樣之有機太陽能電池的層合結構。

於本說明書之一實施態樣中，當有機太陽能電池自外部光源接受光子時，係在電子供體和電子受體之間產生電子和電洞。所產生的電洞經由電子供體層傳輸至陽極。

於本說明書之一實施態樣中，有機太陽能電池可進一步包括另外的有機材料層。有機太陽能電池可藉由使用同

時具各種功能的有機材料而降低有機材料層的數目。

於本說明書之一實施態樣中，第一電極為陽極，第二電極為陰極。於另一實施態樣中，第一電極為陰極，第二電極為陽極。

於本說明書之一實施態樣中，有機太陽能電池可具有依序設置陰極、光活性層及陽極的結構，或者可具有依序設置陽極、光活性層及陰極的結構，但其結構並不以此為限。

於另一實施態樣中，有機太陽能電池可具有依序設置陽極、電洞傳輸層、光活性層、電子傳輸層及陰極的結構，或者可具有依序設置陰極、電子傳輸層、光活性層、電洞傳輸層及陽極的結構，但其結構並不以此為限。

於本說明書之一實施態樣中，有機太陽能電池係具有正結構(normal structure)。

於本說明書之一實施態樣中，有機太陽能電池係具有反結構(inverted structure)。

於本說明書之一實施態樣中，有機太陽能電池係具有串疊結構(tandem structure)。

根據本發明之一實施態樣之有機太陽能電池可具有一、二或更多光活性層。

於另一實施態樣中，可於光活性層和電洞傳輸層之間、或於光活性層和電子傳輸層之間，設置緩衝層。此處，電洞傳輸層可進一步設置於陽極和電洞傳輸層之間。此外，電子傳輸層可進一步設置於陰極和電子傳輸層之

間。

於本說明書之一實施態樣中，光活性層係包含選自由電子供體及電子受體所組成之群組之一、二或更多者，且電子供體材料係包含該單分子。

於本說明書之一實施態樣中，電子受體材料可選自由下列所組成之群組：富勒烯(fullerene)，富勒烯衍生物，浴銅靈(bathocuproine)，半導體元素(semiconductor element)，半導體化合物，及該等之組合。具言之，可包括選自由下列所組成之群組之一、二或更多者：富勒烯(fullerene)，富勒烯衍生物((6,6)-苯基-C<sub>61</sub>-丁酸-甲基酯(PCBM)或(6,6)-苯基-C<sub>61</sub>-丁酸-膽甾酯(PCBCR)，芘(perylene)，聚苯并咪唑(PBI)，以及3,4,9,10-芘-四甲酸雙-苯并咪唑(3,4,9,10-perylene-tetracarboxylic bis-benzimidazole)(PTCBI)，但電子受體材料並不以此為限。

於本說明書之一實施態樣中，該電子供體及該電子受體形成塊材異質界面(bulk heterojunction)(BHJ)。電子供體材料及電子受體材料之混合比例(w/w)為1:10至10:1。

塊材異質界面意指電子供體材料及電子受體材料係於光活性層中混合在一起。

於本說明書之一實施態樣中，該光活性層係具有包含n-型有機材料層及p-型有機材料層之雙層結構，且該p-型有機材料層係包含該單分子。

本說明書中的基板可包括玻璃基板或透明塑料基板，

其具有優異的透明度(transparency)、表面平滑度(surface smoothness)、易處理性(handling easiness)及防水性(water resistance)，但並不以此為限，且可使用典型用於有機太陽能電池的基板而無限制。其具體實例包括玻璃、聚對苯二甲酸乙二酯(polyethylene terephthalate)(PET)、聚萘二甲酸乙二醇酯(polyethylene naphthalate)(PEN)、聚丙烯(PP)、聚醯亞胺(PI)、三醋酸纖維素(triacetyl cellulose)(TAC)及其類似者，但並不以此為限。

陽極可包括為透明的且具優異傳導性之材料，但其材料並不以此為限。陽極材料的實例包括金屬諸如鈦，鉻，銅，鋅或金，或其合金；金屬氧化物諸如氧化鋅，氧化銦，銦錫氧化物(ITO)，或銦鋅氧化物(IZO)；以及，金屬和氧化物的組合，諸如 ZnO : Al 或 SnO<sub>2</sub> : Sb；導電聚合物，諸如聚(3-甲基噻吩)(poly(3-methylthiophene))、聚[3,4-(伸乙基-1,2-二氧基)噻吩](PEDOT)，聚吡咯及聚苯胺，及其類似者，但並不以此為限。

形成陽極的方法並無特別限制，但陽極之形成可藉由利用如濺射(sputtering)、電子束(E-beam)、熱沉積(thermal deposition)、旋塗(spin coating)、網板印刷(screen printing)、噴墨印刷(ink jet printing)、刮刀塗佈(doctor blade)或凹版印刷(gravure printing)之方法施於基板之一表面或以膜形式塗覆。

當陽極係形成於基板時，所得者可進行下列製程：清潔(cleaning)、脫水(dehydrating)及改質成親水性。

舉例來說，在圖案化 ITO 基板連續以清潔劑、丙酮及異丙醇(IPA)清潔後，ITO 基板係在加熱板上於 100 至 150°C 乾燥 1 至 30 分鐘，較佳於 120°C 乾燥 10 分鐘，以移除濕氣，基板完全清潔後，基板的表面係改質成親水性。

透過上述表面改質(surface modification)，接合表面電位(junctional surface potential)可維持在適於光活性層之表面電位(surface potential)的水平。此外，表面經改質時，可易於陽極形成聚合物薄膜，且薄膜品質亦可增進。

陽極之預處理技術係包括 a)利用平行板放電(parallel plate discharge)的表面氧化法(surface oxidation method)，b)於真空中透過由 UV 射線所產生的臭氧來氧化表面的方法，以及 c)利用電漿(plasma)產生的氧自由基(oxygen radical)之氧化方法。

可根據陽極或基板的狀態選擇上述方法之一。然而，無論使用何種方法，通常較佳為避免陽極或基板之表面的氧離開、且盡可能壓抑殘留濕氣及有機材料。於此情況，可極大化預處理之實質效果。

作為一具體實例，可使用透過由 UV 射線所產生的臭氧來氧化表面的方法。此處，圖案化 ITO 基板可藉由於超音波清潔(ultrasonic clean)後在熱板上烘烤圖案化 ITO 基板而充分乾燥，且將圖案化 ITO 基板引入腔室中，然後可藉由使用 UV 燈使氧氣與 UV 光反應所產生的臭氧來清潔。

然而，本說明書中之圖案化 ITO 基板之表面改質方法並未特別限定，亦可使用任何氧化基板的方法。

陰極可包含具小功函數(work function)的金屬，但不以此為限。其具體實例可包括金屬諸如鎂，鈣，鈉，鉀，鈦，銻，鉍，鋰，釷，鋁，銀，錫及鉛，或該等之合金；或多層結構材料諸如 LiF/Al、LiO<sub>2</sub>/Al、LiF/Fe、Al:Li、Al:BaF<sub>2</sub> 以及 Al:BaF<sub>2</sub>:Ba，但並不以此為限。

陰極可藉由沉積於真空度為  $5 \times 10^{-7}$  托耳(torr)或以下之熱沉積器(thermal depositor)內而形成，但其形成不限於此方法。

電洞傳輸層及/或電子傳輸層材料係用於將光活性層中分離的電子與電洞有效傳輸至電極，該材料並無特別限制。

電洞傳輸層材料可包括 PEDOT:PSS(摻雜聚(苯乙烯磺酸))(poly(styrenesulfonic acid))之聚(3,4-二氧乙基噻吩)(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene))，鉬氧化物(MoO<sub>x</sub>)；釩氧化物(V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)；鎳氧化物(NiO)；鎢氧化物(WO<sub>x</sub>)，及其類似者，但並不以此為限。

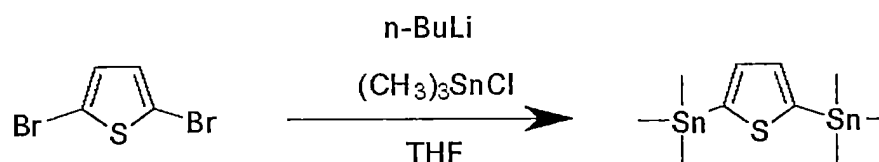
電子傳輸層材料可包括電子汲取(electron-extracting)金屬氧化物，可具體地包括 8-羥喹啉(8-hydroxyquinoline)之金屬錯合物；含有 Alq<sub>3</sub> 之錯合物；金屬錯合物含有 Liq；LiF；Ca；鈦氧化物(TiO<sub>x</sub>)；鋅氧化物(ZnO)；碳酸銫(Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>)，及其類似者，但並不以此為限。

光活性層之形成可藉由將光活性材料諸如電子供體及

/或電子受體溶於有機溶劑中，然後利用諸如旋塗 (spin coating)、浸塗 (dip coating)、網板印刷 (screen printing)、噴塗 (spray coating)、刮刀塗佈 (doctor blade) 及刷塗 (brush painting) 之方法施用該溶液，但其方法並不限於此。

以下參照下列製備例和實施例詳述單分子之製備方法及包含該單分子之有機太陽能電池之製造方法。然而，以下實施例係僅用於說明，本說明書之範疇並不以此為限。

#### 實施例 1. 單體合成 -1

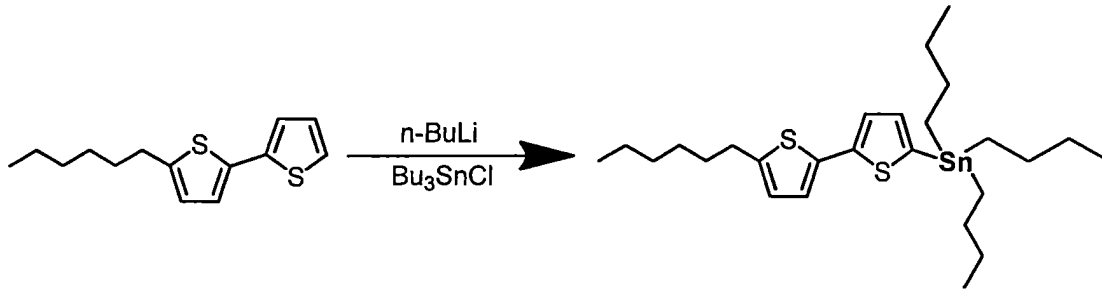


將 2,5-二溴噻吩 (9.68 g, 40.0 mmol) 置入並溶於 200 ml 之四氫呋喃 (THF) 後，溫度降至 -78°C。於此溫度緩慢加入於己烷中之 1.6 M 正丁基鋰 (n-BuLi) (55 ml, 88 mmol)，所得者攪拌 1 小時。之後，一次性加入 1 M 的於 THF 之 氯化三甲錫 (trimethyltinchloride) (100 ml, 100 mmol)，溫度升至室溫，所得者攪拌 12 小時。此溶液係投入冰，以二乙醚 (diethyl ether) 萃取三次，以水洗三次，以硫酸鎂 (MgSO<sub>4</sub>) 移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，並以甲醇再結晶以獲得白色固體。

產率：73.1%

圖 1 係圖示實施例 1 所得之化合物的 NMR 譜。

實施例 2. 單體合成 -2(合成 5-(三正丁基錫烷基)-5'-己基-2,2'-聯噻吩)

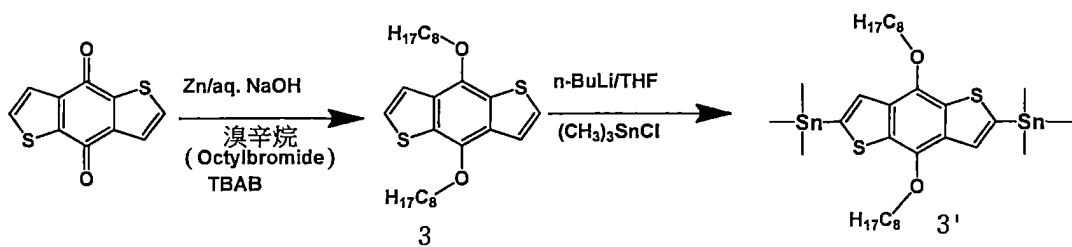


利用 Journal of Polymer Science Part A : Polymer Chemistry, 49, 1155-1162(2011)中所述之方法合成單體 2。

圖 2 係圖示實施例 2 所得之化合物的 NMR 譜。

實施例 3. 單體合成 -3'

(合成 2,6-雙(三甲錫)-4,8-二辛氧基苯并[1,2-b:4,5-b']二噻吩)



3. 將 4,8-去氫苯并[1,2-b:4,5-b']二噻吩-4,8-二酮 (4.0 g, 18.1 mmol)及 Zn 粉(2.6 g, 39.8 mmol)置入 60 ml 之 DI 水(H<sub>2</sub>O)後，攪拌混合物，並加入氫氧化鈉(NaOH, 12 g)，所得者係攪拌且回流 1 小時。反應期間，溶液顏色從黃色經紅色變成橙色。1-溴辛烷(10.4 g, 54.3 mmol)及

溴化四丁銨(tetrabutylammonium bromide)(作為催化劑)係添加至此溶液，所得者係攪拌/回流 2 小時。當溶液顏色為紅色或深紅色時，再添加鋅粉，所得者係攪拌/回流 6 小時。此溶液係投入冷水，以二乙醚萃取兩次，然後以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，並以乙醇再結晶兩次以獲得無色結晶固體。

產率：89.7%

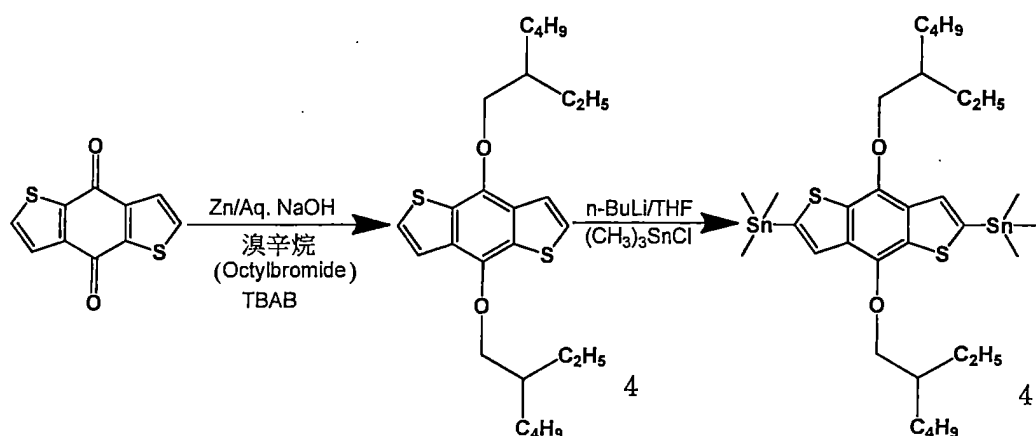
3'. 將 3(2.0 g, 4.45 mmol)置入並溶於 50 ml 之四氫呋喃(THF)，溫度降至 -78°C。於此溫度緩慢加入於己烷中之 1.6 M 正丁基鋰(n-BuLi)(6.12 ml, 9.80 mmol)，所得者攪拌 30 分鐘。之後，溫度升至 0°C，所得者於此狀況攪拌 1 小時。而後，溫度再次降至 -78°C，一次性加入 1 M 的於四氫呋喃(THF)之氯化三甲錫(10.2 ml, 10.25 mmol)，溫度升至室溫，所得者攪拌 12 小時。此溶液係投入冰，以二乙醚(diethyl ether)萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，並以乙醇再結晶以獲得無色結晶固體。

產率：57%

圖 3 係圖示實施例 3 所得之化合物的 NMR 譜。

圖 4 係圖示實施例 3 所得之化合物的 MS 譜。

實施例 4. 單體合成 -4'(合成 2,6-雙(三甲錫)-4,8-二(2-乙基己氧基)苯并[1,2-b:4,5-b']二噻吩)



4. 將 4,8-去氫苯并[1,2-b : 4,5-b']二噻吩-4,8-二酮 (8.0 g, 36.2 mmol)及 Zn 粉(5.2 g, 79.6 mmol)置入 60 ml 之 DI 水(H<sub>2</sub>O)後，攪拌混合物，並加入氫氧化鈉(NaOH, 24 g)，所得者係攪拌且回流 1 小時。反應期間，溶液顏色從黃色經紅色變成橙色。2-乙基-溴己烷(2-Ethylhexylbromide)(21.0 g, 108.9 mmol)及溴化四丁銻(作為催化劑)係添加至此溶液，所得者係攪拌/回流 2 小時。當溶液顏色為紅色或深紅色時，再添加鋅粉，所得者係攪拌/回流 6 小時。此溶液係投入冷水，以二乙醚(diethyl ether)萃取兩次，以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；石油醚(Pet ether)：MC=9：1)獲得無色液體。

產率：64.9%

4'. 將 4(10.3 g, 23.1 mmol)置入並溶於 50 ml 之四氫呋喃(THF)，溫度降至 -78°C。於此溫度緩慢加入於己烷中之 1.6 M 正丁基鋰(n-BuLi)(31.7 ml, 50.8 mmol)，所得者攪拌 30 分鐘。之後，溫度升至 0°C，所得者於此狀況攪

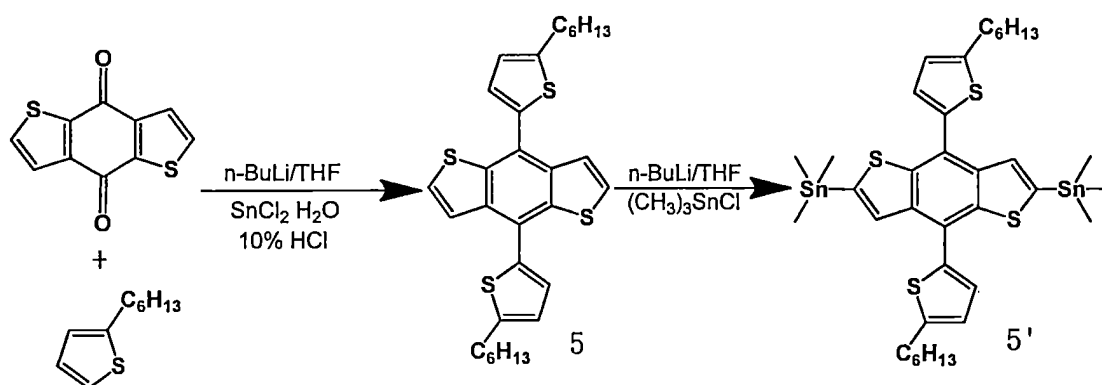
拌 1 小時。而後，溫度再次降至  $-78^{\circ}\text{C}$ ，一次性加入 1 M 的於四氫呋喃(THF)之氯化三甲錫(53.1 ml, 53.1 mmol)，溫度升至室溫，所得者攪拌 12 小時。此溶液係投入冰，以二乙醚(diethyl ether)萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂( $\text{MgSO}_4$ )移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，並以乙醇再結晶以獲得無色結晶固體。

產率：71.4%

圖 5 係圖示實施例 4 所得之化合物的 NMR 譜。

圖 6 係圖示實施例 4 所得之化合物的 MS 譜。

實施例 5. 單體合成 -5'(合成 2,6-雙(三甲錫)-4,8-雙(5-(2-己基)噻吩-2-基)苯并[1,2-b:4,5-b']二噻吩)



5. 將 2-己基噻吩(10.0 g, 59.4 mmol)置入並溶於 500 ml 之四氫呋喃(THF)，溫度降至  $-78^{\circ}\text{C}$ 。於此溫度緩慢加入於己烷中之 2.5 M 正丁基鋰( $n\text{-BuLi}$ )(24.0 ml, 59.4 mmol)，所得者攪拌 30 分鐘。之後，溫度升至  $0^{\circ}\text{C}$ ，所得者於此狀況攪拌 1 小時，而後一次性加入 4,8-去氫苯并[1,2-b:4,5-b']二噻吩-4,8-二酮(3.3 g, 14.8 mmol)，所得

者於 50°C 攪拌 3 小時。使此溶液冷卻至室溫，加入氯化亞錫(II)二水合物( $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ )(26 g)及 10% HCl(56 ml)，所得者再攪拌 3 小時。冰係投入此溶液，所得者以二乙醚(diethyl ether)萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂( $\text{MgSO}_4$ )移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；石油)獲得高密度黃色液體。

產率：64%

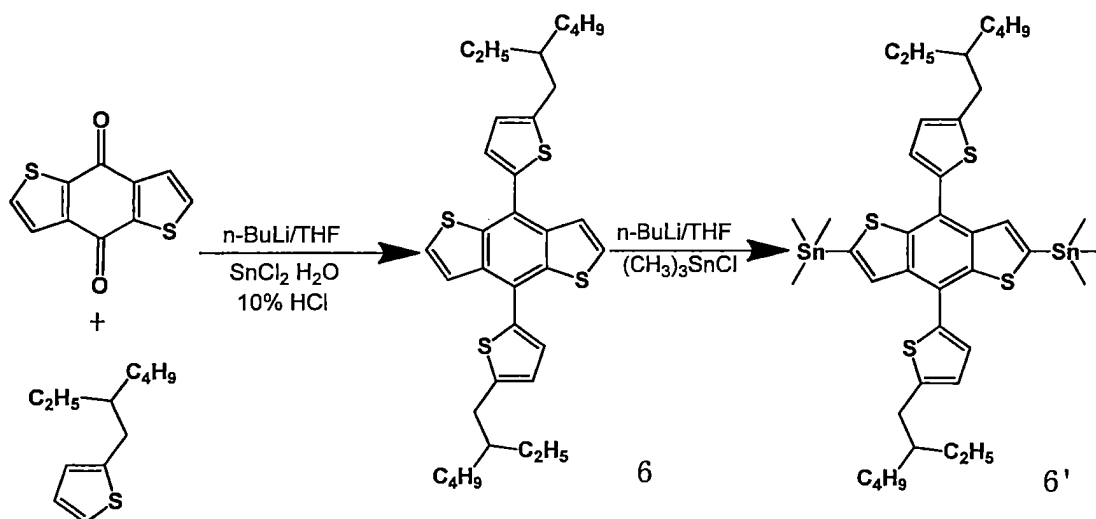
5'. 將 5(3.9 g, 7.59 mmol)置入並溶於 100 ml 之四氫呋喃(THF)，溫度降至 0°C。於此溫度緩慢加入於己烷中之 1.6 M 正丁基鋰(n-BuLi)(10.4 ml, 16.7 mmol)，所得者於室溫攪拌 1 小時。對此溶液一次性添加於 THF 中之 1 M 氯化三甲錫(22.7 ml, 22.7 mmol)，所得者攪拌 2 小時。水係投入此溶液，以二乙醚(diethyl ether)萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂( $\text{MgSO}_4$ )移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，並以乙醇再結晶以獲得淡黃色結晶固體。

產率：87%

圖 7 係圖示實施例 5 所得之化合物的 NMR 譜。

圖 8 係圖示實施例 5 所得之化合物的 MS 譜。

實施例 6. 單體合成 -6'(合成 2,6-雙(三甲錫)-4,8-雙(5-(2-乙基己基)噻吩-2-基)苯并[1,2-b:4,5-b']二噻吩)



6. 將 2-(2-乙基己基)噻吩 (10.0 g, 59.4 mmol) 置入並溶於 500 ml 之四氫呋喃 (THF)，溫度降至  $-78^{\circ}\text{C}$ 。於此溫度緩慢加入於己烷中之 2.5 M 正丁基鋰 (n-BuLi) 己烷 (24.0 ml, 59.4 mmol)，所得者攪拌 30 分鐘。之後，溫度升至  $0^{\circ}\text{C}$ ，所得者於此狀況攪拌 1 小時，而後一次性加入 4,8-去氫苯并 [1,2-b : 4,5-b'] 二噻吩 -4,8-二酮 (3.3 g, 14.8 mmol)，所得者於  $50^{\circ}\text{C}$  攪拌 3 小時。使此溶液冷卻至室溫，加入氯化亞錫 (II) 二水合物 ( $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) (26 g) 及 10% HCl (56 ml)，所得者再攪拌 3 小時。冰係投入此溶液，所得者以二乙醚 (diethyl ether) 萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂 ( $\text{MgSO}_4$ ) 移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱 (silica column) (洗提液；石油) 獲得高密度黃色液體。

產率：64%

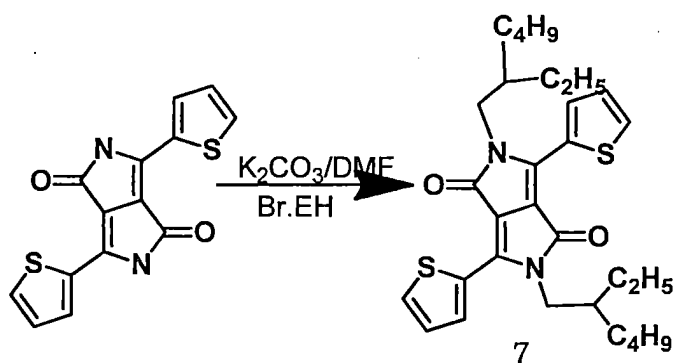
6'. 將 6 (3.9 g, 7.59 mmol) 置入並溶於 100 ml 之四氫呋喃 (THF)，溫度降至  $0^{\circ}\text{C}$ 。於此溫度緩慢加入於己烷中

之 1.6 M 正丁基鋰 (*n*-BuLi) (10.4 ml, 16.7 mmol), 所得者於室溫攪拌 1 小時。對此溶液一次性添加於四氫呋喃 (THF) 中之 1 M 氯化三甲錫 (22.7 ml, 22.7 mmol), 所得者攪拌 2 小時。水係投入此溶液, 所得者以二乙醚 (diethyl ether) 萃取兩次, 以水洗兩次, 以硫酸鎂 ( $MgSO_4$ ) 移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑, 並以乙醇再結晶以獲得淡黃色結晶固體。

產率: 87%

圖 9 係圖示實施例 6 所得之化合物的 NMR 譜。

實施例 7. 單體合成 -7 (合成 2,5-二乙基己基-3,6-二噻吩-2-基吡咯并 [3,4-*c*] 吡咯-1,4-二酮)



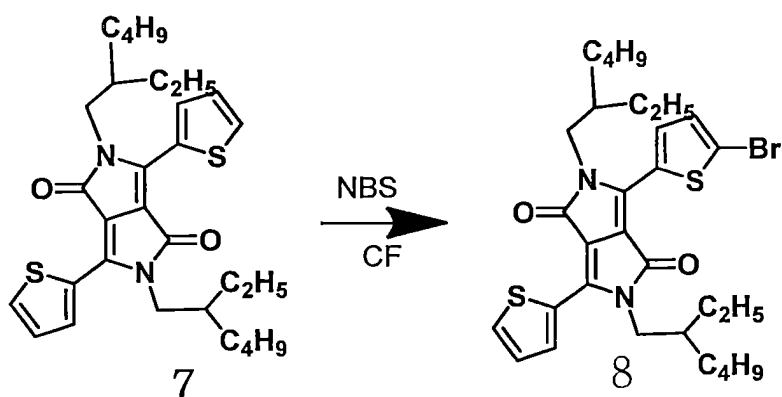
將 3,6-二噻吩-2-基-2,5-二氫吡咯并 [3,4-*c*] 吡咯-1,4-二酮 (13.0 g, 43.3 mmol) 及碳酸鉀 ( $K_2CO_3$ , 24.0 g) 置入 250 ml 之二甲基甲醯胺 (DMF) 並於 145°C 加熱以充分溶解。利用注射器於此溶液一次性加入 2-乙基-溴己烷 (2-Ethylhexylbromide) (38.6 g, 200 mmol)。所得者於 145°C 攪拌 15 小時或更久後, 溫度降至室溫。所得者係投入

500 ml 或更多的冷水、攪拌、而後以水及醇清洗數次並過濾。乾燥後，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷：二氯甲烷=1：10)獲得深紫色固體粉末。

產率：87.4%

圖 10 係圖示實施例 7 所得之 2,5-二乙基己基-3,6-二噻吩-2-基吡咯并[3,4-c]吡咯-1,4-二酮的 NMR 譜。

實施例 8. 單體合成-8(合成 3-(5-溴化噻吩-2-基)-2,5-雙(2-乙基己基)-6-(噻吩-2-基)吡咯并[3,4-c]吡咯-1,4-二酮)



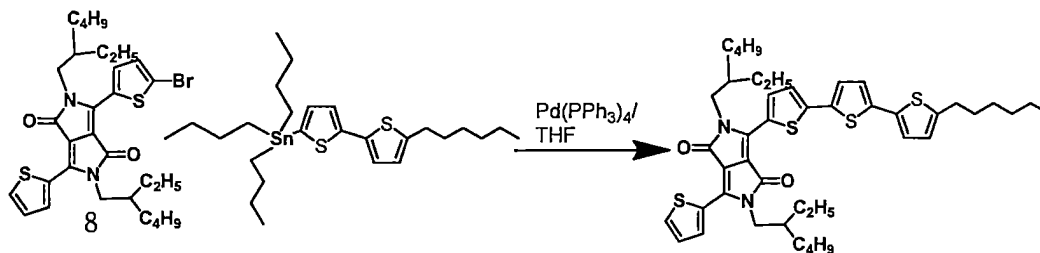
將 2,5-乙基己基-3,6-二噻吩-2-基吡咯并[3,4-c]吡咯-1,4-二酮 (5.0 g, 9.25 mmol) 及 N-溴琥珀醯亞胺 (N-bromosuccinimide)(NBS, 1.60 g, 9.99 mmol) 置入 600 ml 之氯仿，並於室溫、遮光下、充分攪拌混合物。以薄層層析法(thin-layer chromatography)檢查反應後，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷：二氯甲烷=1：10)獲得深紫色固體粉末。

產率：59.7%

圖 11 係圖示實施例 8 所製備之化合物的 NMR 譜。

圖 12 係圖示實施例 8 所製備之化合物的 MS 譜。

### 實施例 9. 單體合成 9

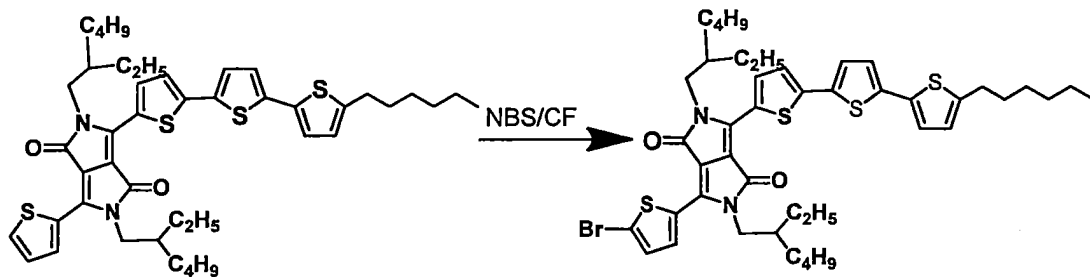


將 3-(5-溴化噻吩-2-基)-2,5-雙(2-乙基己基)-6-(噻吩-2-基)吡咯并[3,4-c]吡咯-1,4-二酮(8.0 g, 13.2 mmol)、5-三正丁基錫烷基)-5'-己基-2,2'-聯噻吩(8.57 g, 15.9 mmol)及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 0.46 g)置入並溶於 300 ml 之四氫呋喃(THF)。攪拌/回流此溶液並反應 24 小時。此溶液係投入水，以二氯甲烷萃取兩次，以水洗兩次，且以硫酸鎂移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/MC=10：2)獲得卡其色細粉。

產率：57%

圖 13 係圖示實施例 9 所得之化合物的 MS 譜。

### 實施例 10. 單體合成-10

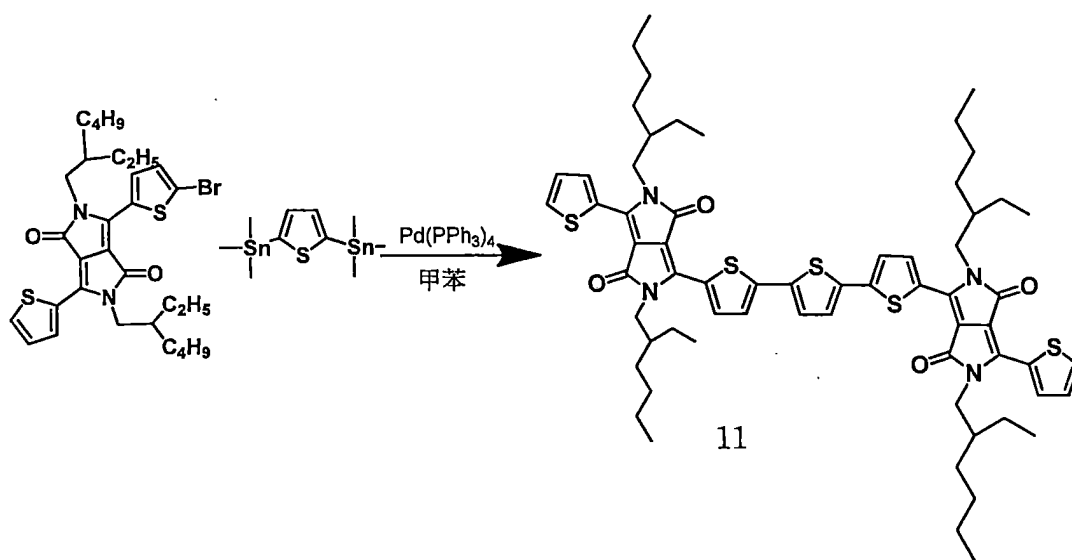


單體 9(3.0 g, 3.88 mmol)及 N-溴琥珀醯亞胺(NBS, 0.76 g, 4.26 mmol)係置入 500 ml 之氯仿，並於室溫、遮光下、攪拌混合物。以薄層層析法 (thin-layer chromatography) 檢查反應後，透過矽管柱 (silica column)(洗提液；己烷/MC=10：2)獲得深紫色固體粉末。

產率：87%

圖 14 係圖示實施例 10 所得之化合物的 MS 譜。

### 實施例 11. 單體合成 -11



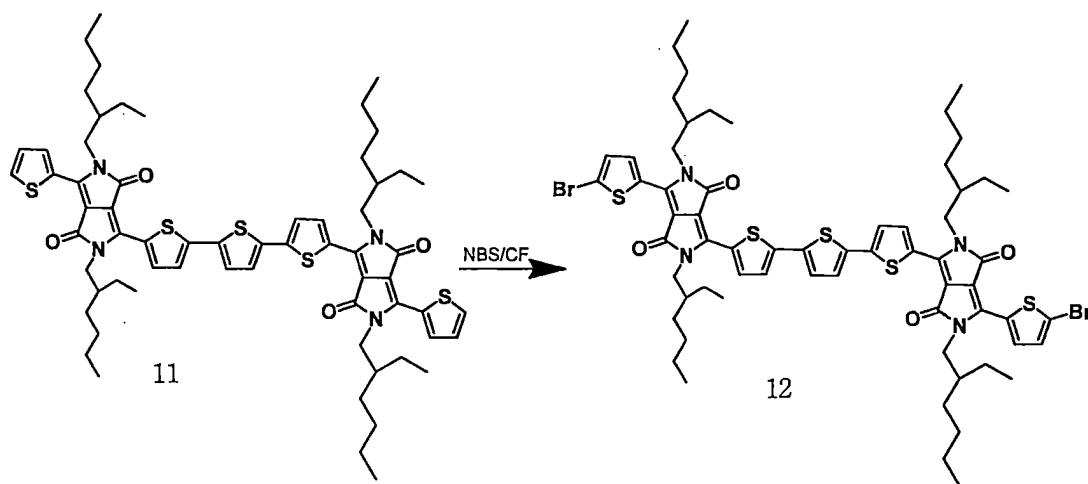
2,5-雙(三甲基錫烷基)噻吩(1.5 g, 3.66 mmol)、3-(5-

溴化噻吩-2-基)-2,5-雙(2-乙基己基)-6-(噻吩-2-基)吡咯并[3,4-c]吡咯-1,4-二酮(4.64 g, 7.68 mmol)及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)) (Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 0.27 g)係置入並溶於 120 ml 之甲苯。攪拌/回流此溶液並反應 24 小時。此溶液係投入水，以二氯甲烷萃取兩次，以水洗兩次，且以硫酸鎂移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/DC=2：1)獲得細粉。

產率：72%

圖 15 係圖示實施例 11 所得之化合物的 MS 譜。

#### 實施例 12. 單體合成-12



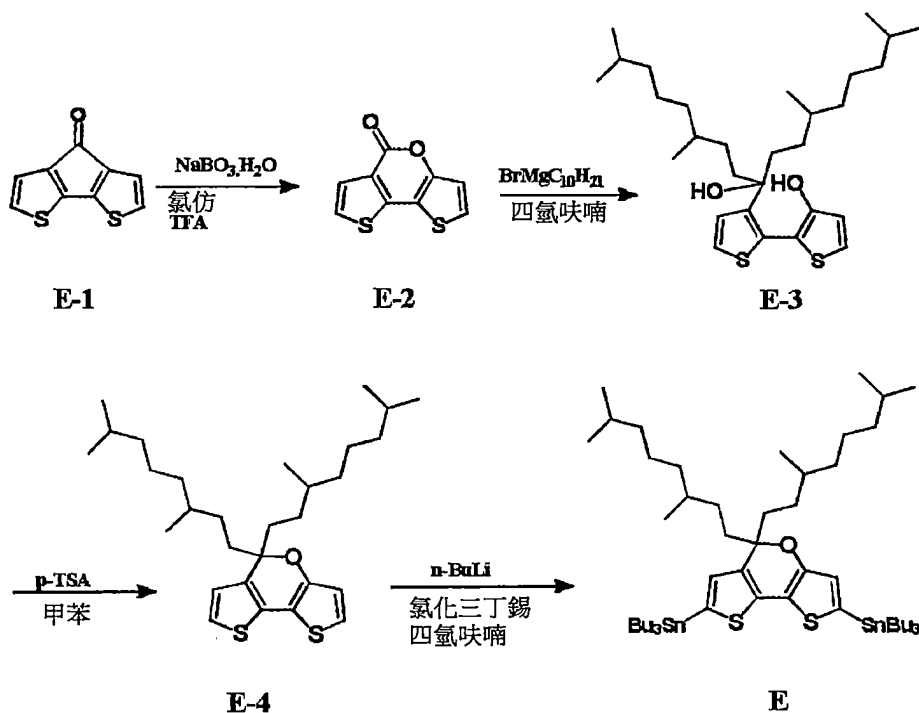
化合物 11(1.0 g, 0.88 mmol)及 N-溴琥珀醯亞胺(NBS, 0.34 g, 1.93 mmol)係置入 300 ml 之氯仿，並於室溫、遮光下、攪拌混合物。以薄層層析法(thin-layer chromatography)檢查反應後，透過矽管柱(silica

column)(洗提液；己烷/MC=4：1)獲得深紫色固體粉末。

產率：64%

圖 16 係圖示實施例 12 所得之化合物的 MS 譜。

### 實施例 13. 單體合成 -13



#### (1) 合成化學式 E-2

化合物 E-1(6.0 g, 31.2 mmol)係溶於 50 ml 氯仿 (CF)：50 ml 三氟乙酸 (TFA)。過硼酸鈉單水合物 (sodiumperborate monohydrate)(7.39 g, 72.8 mmol)係一次性添加，所得者於室溫攪拌 1 小時。此溶液係投入水，之後以氯仿萃取。真空移除溶劑，透過矽管柱 (silica column)(洗提液；Hx/MC=1/1)獲得白色固體。

產率：35%

(2)合成化學式 E-3

化合物 E-2(2.4 g, 11.4 mmol)係於氮下溶於 60 ml 之四氫呋喃(THF)。25.4 ml 之 3,7-二甲基辛基溴化鎂(3,7-dimethyloctylmagnesium bromide)(於二乙醚之 1 M 溶液)係於 -25°C 緩慢注入其中。所得者攪拌 10 小時同時升溫至室溫，反應於添加 50 ml 之水時終止。所得者使用乙酸乙酯(EA)萃取，以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。透過矽管柱(silica column)獲得淡黃色液體。

產率：93%

(3)合成化學式 E-4

化合物 E-3(4.5 g, 12.0 mmol)係於氮下溶於 100 ml 之甲苯。於其添加 300 mg 之對甲苯磺酸鈉單水合物，所得者於 120°C 反應 3 小時。

反應溶液係投入水，藉由加入甲苯而萃取。所得者以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)乾燥，之後真空移除溶劑。透過矽管柱(silica column)(洗提液；Hx)獲得黃色液體。

產率：95%

(4)合成化學式 E

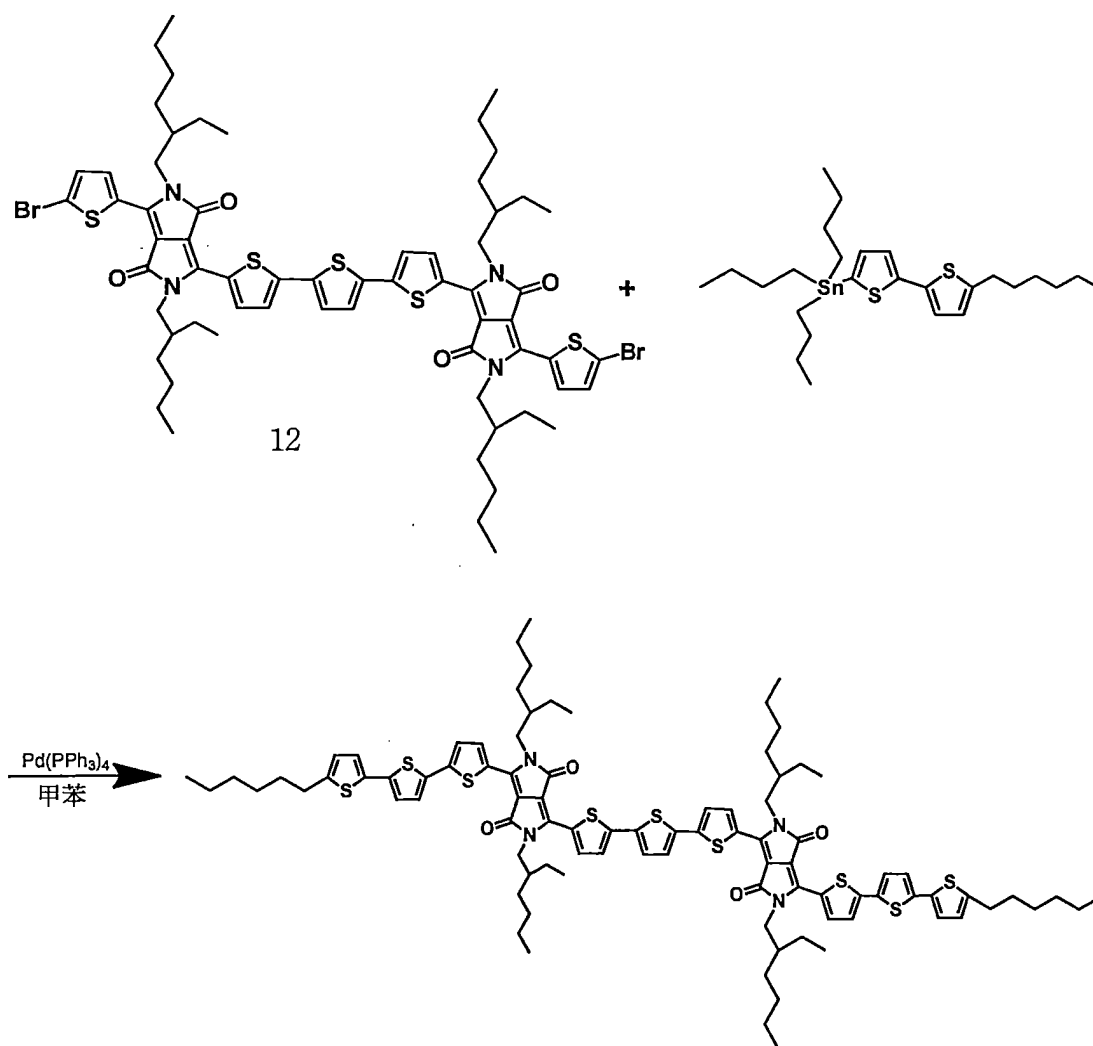
化合物 E-4(0.58 g, 1.2 mmol)係於氮下溶於 20 ml 之四氫呋喃(THF)。於 -78°C 緩慢加入正丁基鋰(1.7 ml, 1.6

M 的於己烷中之溶液)，所得者攪拌 30 分鐘，之後於室溫攪拌 2 小時。溫度再次降至  $-78^{\circ}\text{C}$ ，加入 0.92 ml 之氯化三丁錫(tributyltin chloride)溶液。溫度升至室溫，所得者攪拌 10 小時。所得者係投入水，使用己烷萃取。真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液。Hx，10% 三乙胺)獲得棕色液體。

產率：97%

圖 17 係圖示實施例 13 所得之化合物 E 的 NMR 譜。

實施例 14. 合成單分子 1



化合物 12(0.73 g, 0.56 mmol)、5-(三正丁基錫烷基)-5'-己基-2,2'-聯噻吩(0.90 g, 1.40 mmol)、四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 10 mg)及三-(鄰甲苯基)膦(20 mg)係置入並溶於 30 ml 之氯苯。此溶液於 130°C 反應 24 小時。此溶液係投入水，以氯仿萃取兩次，以水洗兩次，且以硫酸鎂移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/MC=10：4)獲得細粉。

產率：63%

圖 18 係圖示實施例 14 所製備之單分子 1 的 MS 譜。

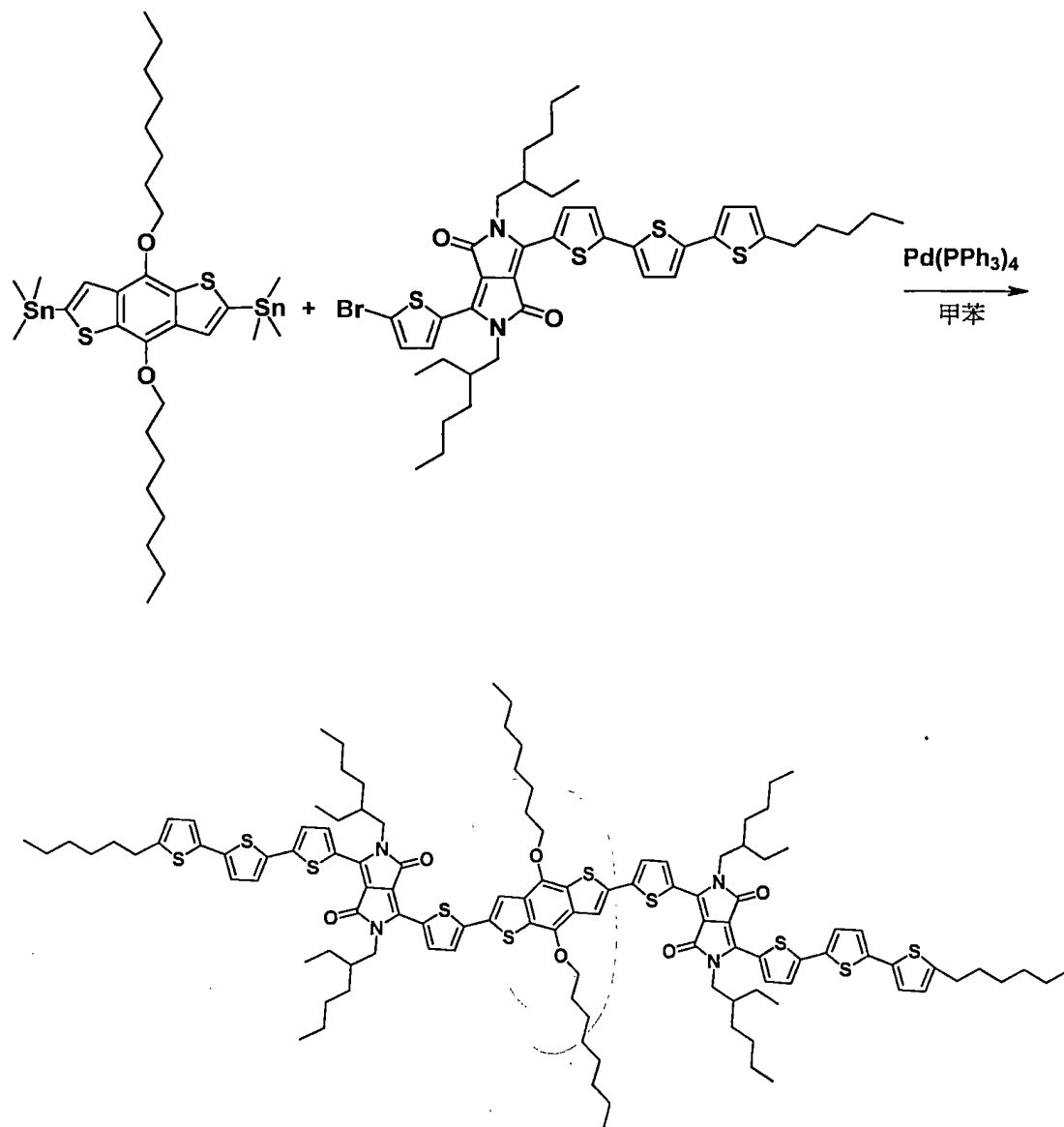
圖 24 係圖示膜相(film phase)的 UV-Vis 吸收譜，其中實施例 14 之單分子 1 的氯苯溶液係經熱處理。

圖 24 之膜相 UV 吸收譜係在將化合物溶於氯苯以具 1 wt%之濃度、將此溶液滴於玻璃基板、以 1000 rpm 旋塗(spin coating)樣品 60 秒、及於 25°C、100°C、150°C 和 170°C 熱處理所得者後，利用 UV-Vis 吸收光譜儀分析。

圖 25 係圖示實施例 14 所製備之單分子 1 的電化學測量結果(循環伏安法)。

圖 25 之電化學測量(循環伏安法)係利用三電極系統分析，其中玻璃碳工作電極、Ag/AgCl 參考電極、及 Pt 電極係置於電解質溶液(將 Bu<sub>4</sub>NBF<sub>4</sub> 溶於乙腈以具有 0.1 M 的濃度)中。化合物係利用滴塗法(drop casting method)塗於工作電極。

## 實施例 15. 合成單分子 2

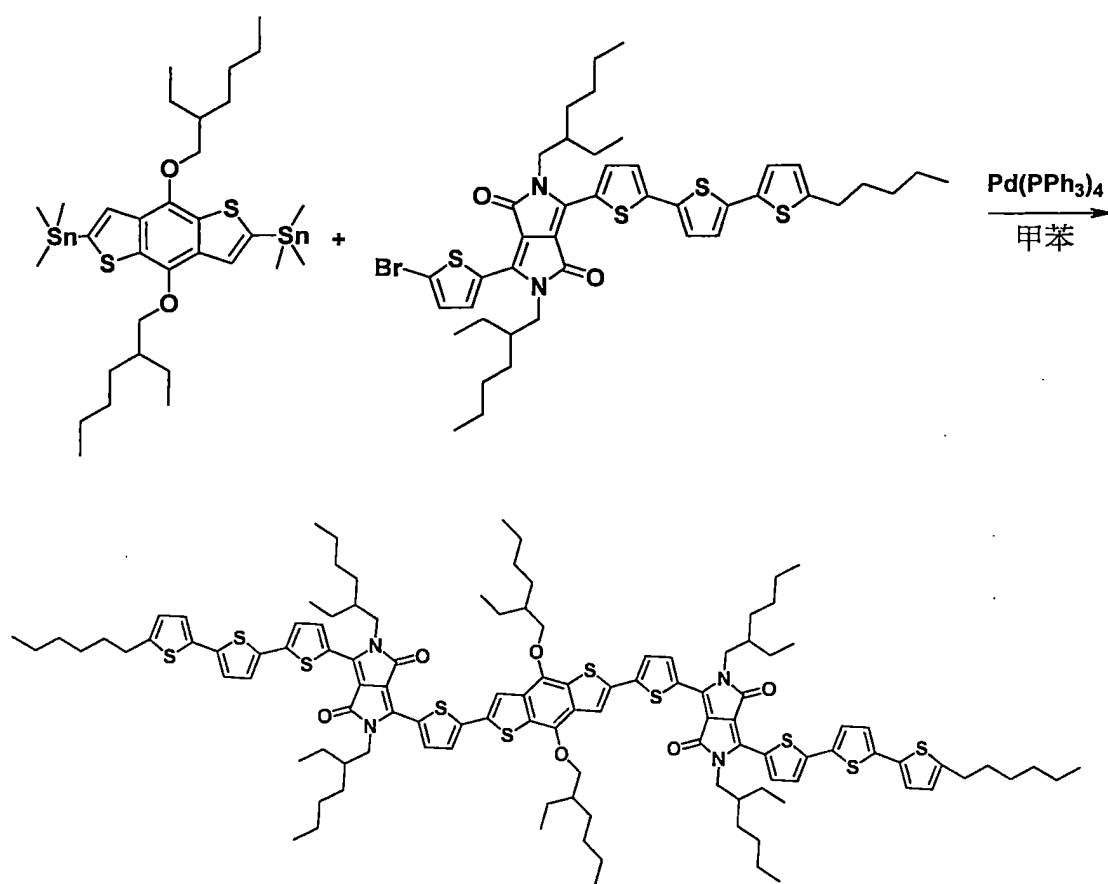


2,6-雙(三甲錫)-4,8-二辛氧基苯并[1,2-b:4,5-b']二噻吩(0.425 g, 0.50 mmol)、化合物 10(0.95 g, 1.11 mmol)及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine) palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 40 mg)係置入 100 ml 之甲苯。此溶液係於 100°C 反應 24 小時。此溶液係投入水，以氫

仿萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/MC=10：4)獲得細粉。

產率：52%

### 實施例 16. 合成單分子 3



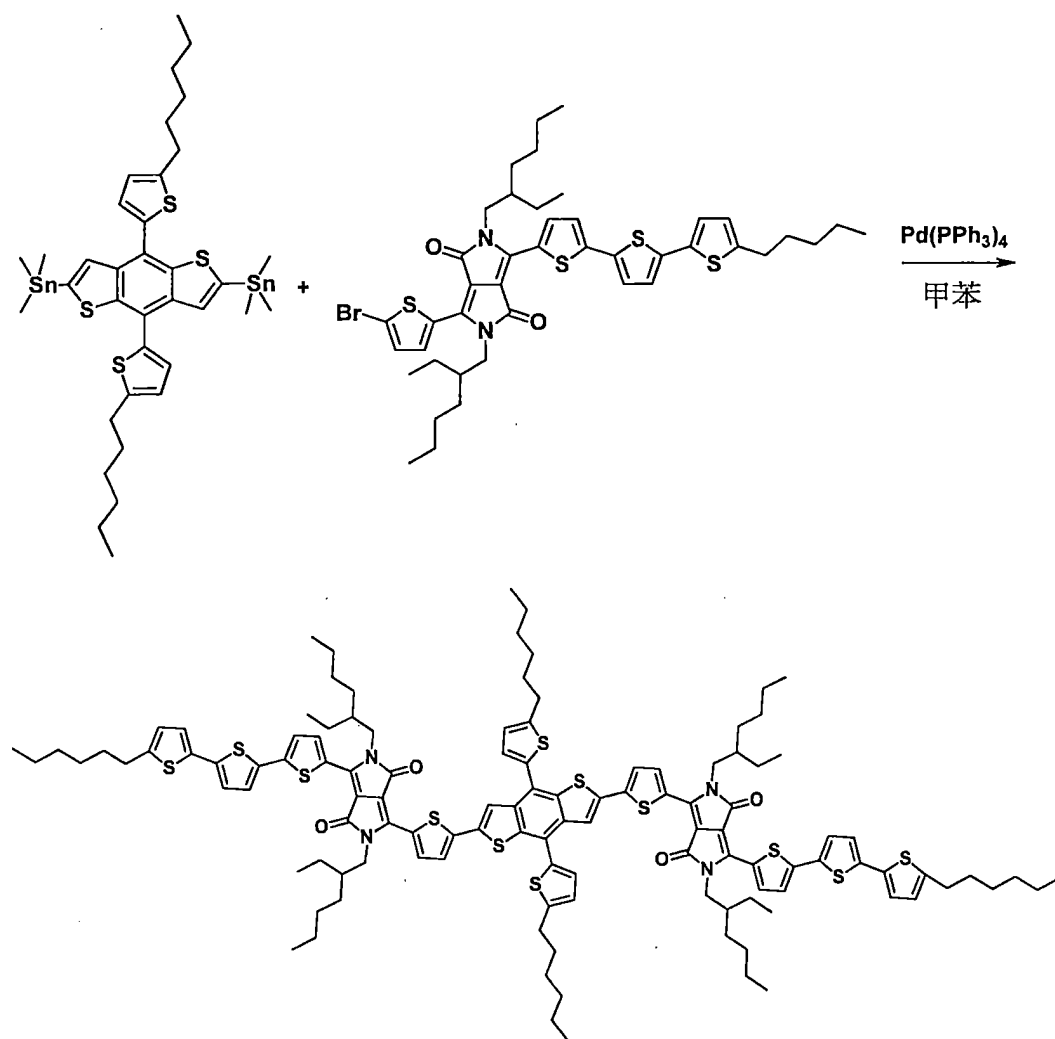
2,6-雙(三甲錫)-4,8-二(2-乙基己氧基)苯并[1,2-b：4,5-b']二噻吩(0.425 g, 0.41 mmol)、化合物 10(1.00 g, 1.17 mmol)、及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 40 mg)係置入 100 ml 之甲苯。此溶液係於 100°C 反應 24 小時。此溶

液係投入水，以氯仿萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂 (MgSO<sub>4</sub>) 移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱 (silica column) (洗提液；己烷 / MC = 10 : 4) 獲得細粉。

產率：50%

圖 19 係圖示實施例 16 所製備之單分子 3 的 MS 譜。

實施例 17. 合成單分子 4

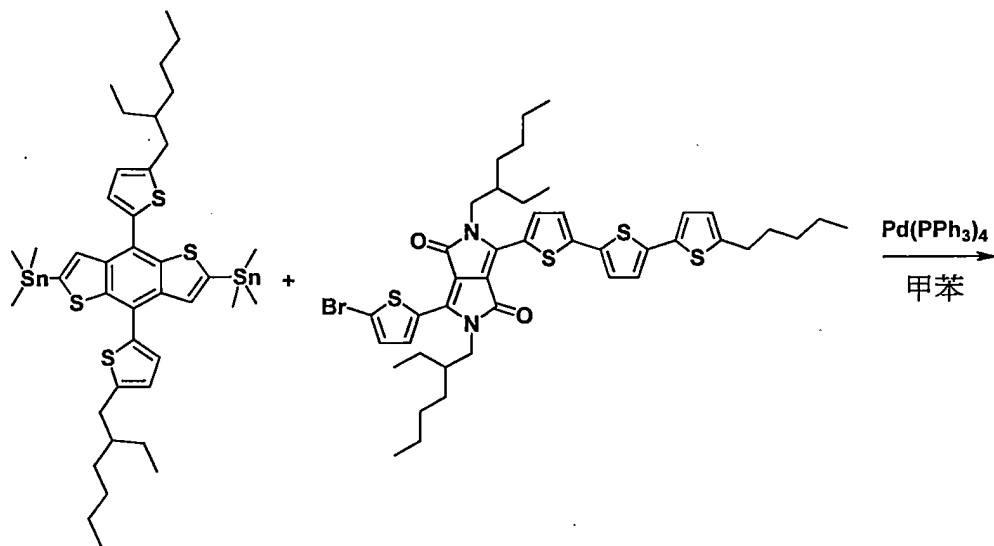


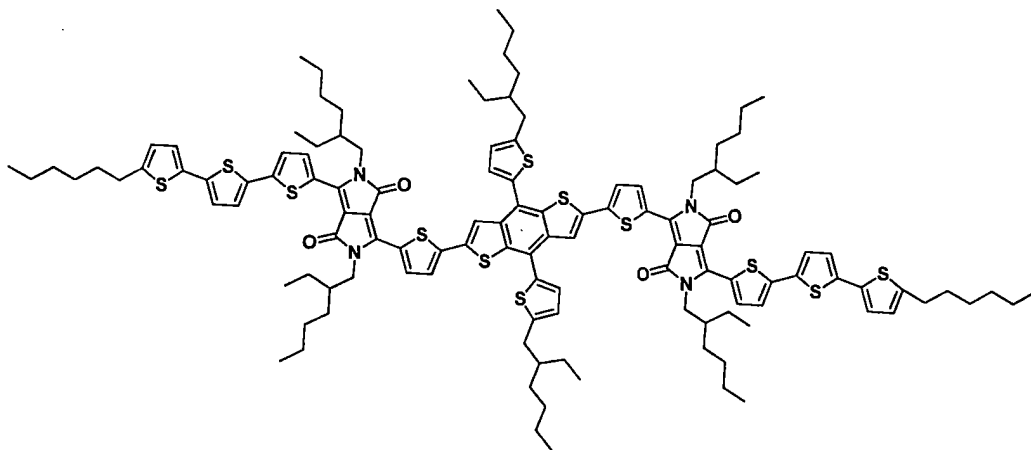
2,6-雙(三甲錫)-4,8-雙(5-(2-己基)噻吩-2-基)苯并[1,2-

b : 4,5-b']二噻吩(0.425 g, 0.41 mmol)、化合物 10(0.95 g, 1.11 mmol)、及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 40 mg)係置入 100 ml 之甲苯。此溶液係於 100°C 反應 24 小時。此溶液係投入水, 以氯仿萃取兩次, 以水洗兩次, 以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑, 透過矽管柱(silica column)(洗提液; 己烷/MC=10:4)獲得細粉。

圖 20 係圖示實施例 17 所製備之單分子 4 的 MS 譜。

實施例 18. 合成單分子 5



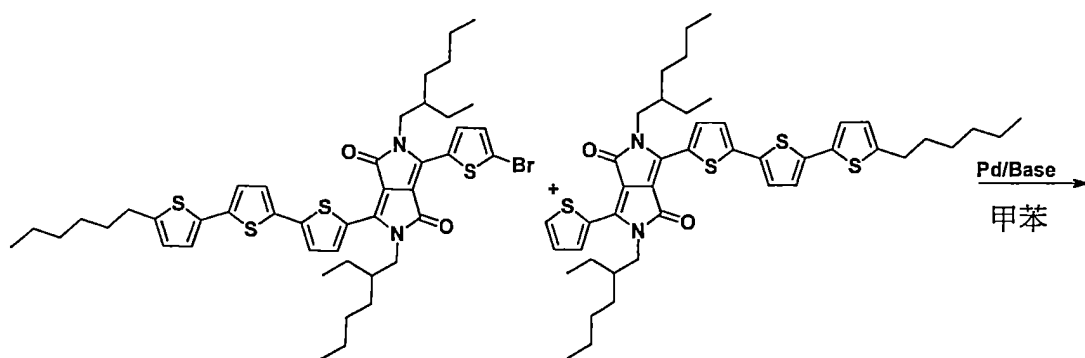


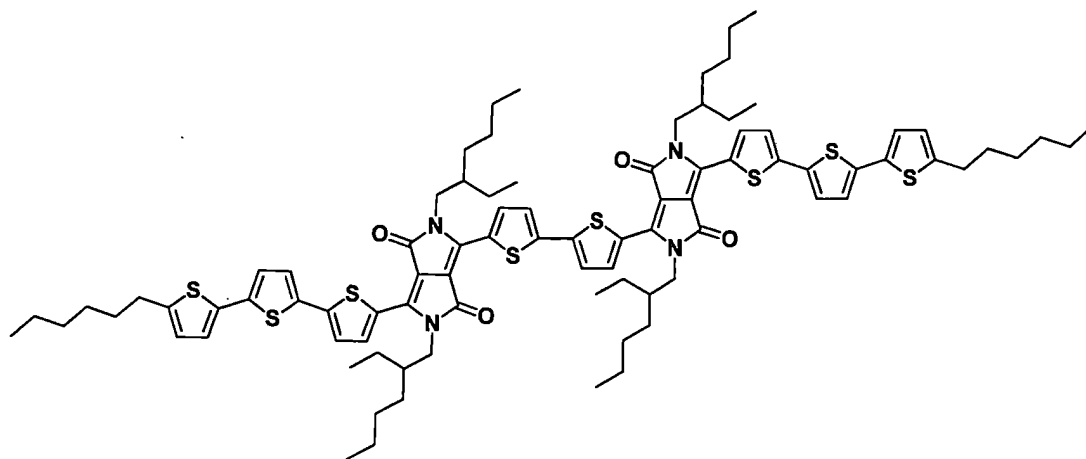
2,6-雙(三甲錫)-4,8-雙(5-(2-乙基己基)噻吩-2-基)苯并[1,2-b : 4,5-b']二噻吩 (0.53 g, 0.58 mmol)、化合物 10 (1.00 g, 1.17 mmol)、及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 40 mg)係置入 100 ml 之甲苯。此溶液係於 100°C 反應 24 小時。此溶液係投入水，以氯仿萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/MC=10：4)獲得細粉。

產率：43%

圖 21 係圖示實施例 18 所製備之單分子 5 的 MS 譜。

實施例 19. 合成單分子 6

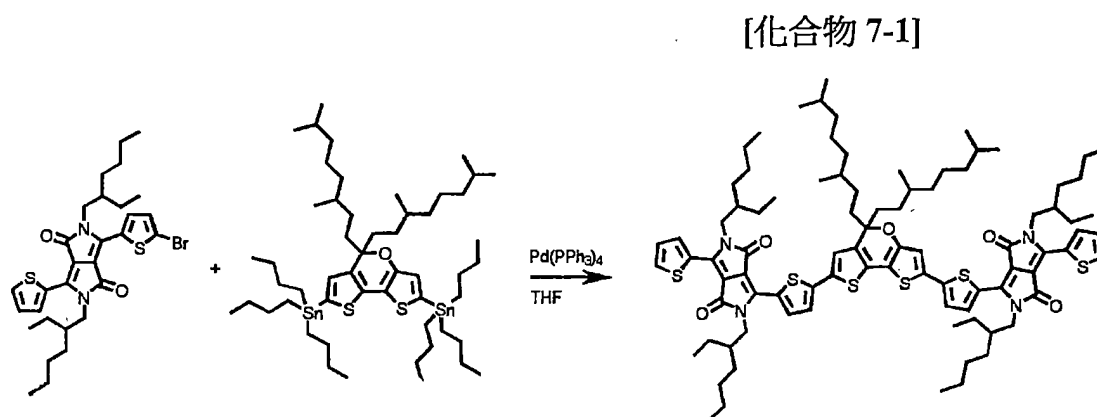




化合物 9(0.27 g, 0.35 mmol)、化合物 10(0.30 g, 0.35 mmol)、及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 10 mg)係置入 50 ml 之甲苯。此溶液係於 100°C 反應 48 小時。此溶液係投入水，以氯仿萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂(MgSO<sub>4</sub>)移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/MC=10:5)獲得細粉。

圖 22 係圖示實施例 19 所製備之單分子 6 的 MS 譜。

實施例 20. 合成單分子 7



5,5-雙(3,7-二甲基辛基)-5H-二噻吩并[3,2-b:2',3'-d]吡喃-2,7-二基)雙(三錫烷)(5,5-Bis(3,7-dimethyloctyl)-5H-dithieno[3,2-b:2',3'-d]pyran-2,7-diyl)bis(tristannane))(2.0 g, 1.8996 mmol)、3-(5-溴化噻吩-2-基)-2,5-雙(2-乙基己基)-6-(噻吩-2-基)吡咯并[3,4-c]吡咯-1,4(2H,5H)-二酮(2.30 g, 3.7991 mmol)、及四(三苯基膦)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 0.13 g)係置入並溶於 300 ml 之四氫呋喃(THF)。此溶液係於 100°C 反應 20 小時。此溶液係投入水，以二氯甲烷萃取兩次，以水洗兩次，且以硫酸鎂移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/DC=10:2)獲得棕色固體。

產率：78%

圖 23 係圖示實施例 20 所製備之化合物 7-1 的 MS 譜。

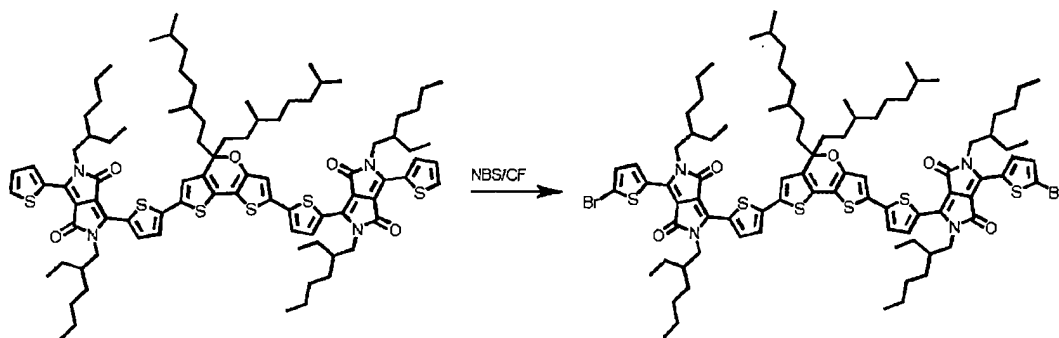
圖 26 係圖示實施例 20 所製備之化合物 7-1 的高效液相層析(HPLC)。

圖 27 係顯示實施例 20 之化合物 7-1 的 UV-Vis 吸收譜(於氯苯溶液中且為膜相(film phase)，其中氯苯溶液係經熱處理)。

圖 27 之 UV 吸收譜係利用 UV-Vis 吸收光譜儀分析，1)化合物溶於氯苯而具 1 wt%之濃度的樣品的吸收譜，及 2)在將化合物溶於氯苯以具 1 wt%之濃度、將此溶液滴於玻璃基板、以 1000 rpm 旋塗(spin coating)樣品 60 秒、及

於 80°C 熱處理所得者後之膜相 (film-phase) UV 吸收譜。

[化合物 7-2]



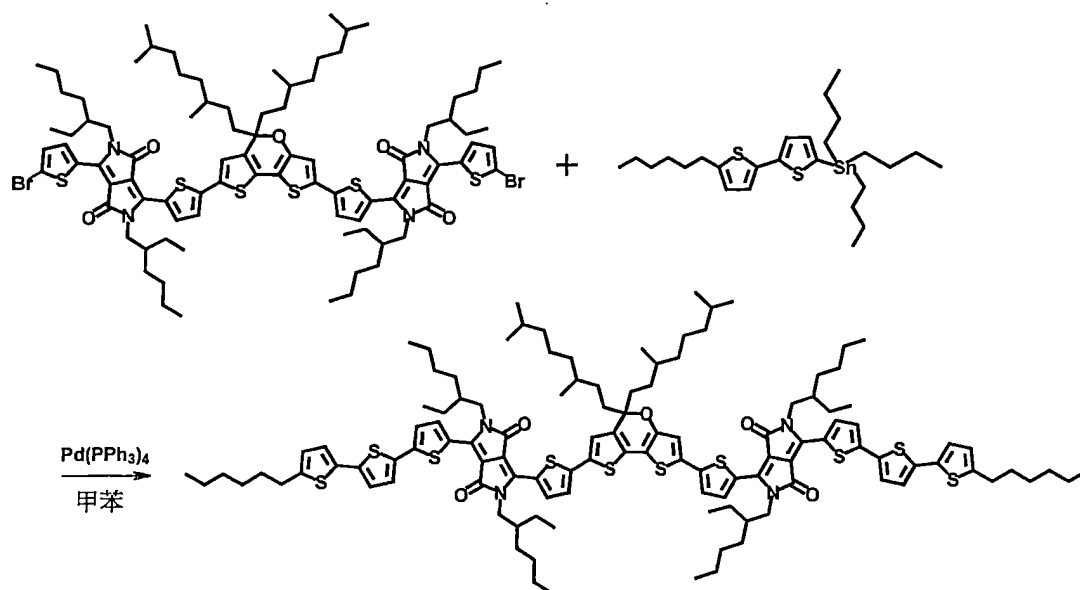
M1 (0.720 g, 0.4736 mmol) 係充分溶於 100 ml 之氯仿 (CF)。N-溴琥珀醯亞胺 (NBS) (0.17 g, 0.9613 mmol) 係加入此溶液並攪拌。所得者以蒸餾水和乙酸乙酯 (EA) 萃取，以無水硫酸鈉移除有機層之水分，藉真空過濾移除固體雜質。藉由使用管柱層析 (洗提液；MC/Hx=10:5) 分離所得者而獲得細粉。

產率：50.4%

圖 28 係圖示實施例 20 所得之化合物 7-2 的 MS 譜。

圖 29 係圖示實施例 20 所得之化合物 7-2 的電化學測量結果 (循環伏安法)。

圖 29 的電化學測量 (循環伏安法) 係利用三電極系統分析，其中玻璃碳工作電極、Ag/AgCl 參考電極、及 Pt 電極係置於電解質溶液 (將  $\text{Bu}_4\text{NBF}_4$  溶於乙腈以具有 0.1 M 的濃度) 中。化合物係利用滴塗法 (drop casting method) 塗於工作電極。



化合物 7-2(0.50 g, 0.2980 mmol)、單體 2(0.40 g, 0.7449 mmol)、及四(三苯基磷)鈀(0)(tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0))( $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ , 30 mg)係置入 100 ml 之甲苯。此溶液係於  $100^\circ\text{C}$  反應 24 小時。此溶液係投入水，以氯仿萃取兩次，以水洗兩次，以硫酸鎂( $\text{MgSO}_4$ )移除殘留水。所餘溶液係經真空移除溶劑，透過矽管柱(silica column)(洗提液；己烷/MC=10:4)獲得細粉。

產率：45%

製造有機太陽能電池及測量其性質

製備例 1. 製造有機太陽能電池-1

將實施例 14 所製備之單分子 1 以及 PCBM 以 60:40(w/w 比)之比例溶於氯苯(CB)以製備複合溶液(composite solution)。此處，濃度係調整至 2.0 wt%，且

有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT : PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇進行超音波清潔 (ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT : PSS (baytrom P) 至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，化合物-PCBM 複合溶液係使用 0.45 μm 之 PP 針筒過濾器 (PP syringe filter) 過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器 (thermal evaporator) 在  $3 \times 10^{-8}$  托耳 (torr) 真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

#### 製備例 2. 製造有機太陽能電池-2

將實施例 15 所製備之單分子 2 以及 PCBM 以 60 : 40 (w/w 比) 之比例溶於氯苯 (CB) 以製備複合溶液 (composite solution)。此處，濃度係調整至 3.0 wt%，且有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT : PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇進行超音波清潔 (ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT : PSS (baytrom P) 至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，化合物-PCBM 複合溶液係使用 0.45 μm 之 PP 針筒過濾器過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器 (thermal evaporator) 在  $3 \times 10^{-8}$  托耳 (torr) 真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

## 製備例 3. 製造有機太陽能電池-3

將實施例 16 所製備之單分子 3 以及 PCBM 以 60 : 40(w/w 比)之比例溶於氯苯 (CB) 以製備複合溶液 (composite solution)。此處，濃度係調整至 3.0 wt%，且有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT : PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇進行超音波清潔 (ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT : PSS (baytrom P) 至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，化合物-PCBM 複合溶液係使用 0.45  $\mu\text{m}$  之 PP 針筒過濾器過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器 (thermal evaporator) 在  $3 \times 10^{-8}$  托耳 (torr) 真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

## 製備例 4. 製造有機太陽能電池-4

將實施例 17 所製備之單分子 4 以及 PCBM 以 60 : 40(w/w 比)之比例溶於氯苯 (CB) 以製備複合溶液 (composite solution)。此處，濃度係調整至 3.0 wt%，且有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT : PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇進行超音波清潔 (ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT : PSS (baytrom P) 至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，化合物-PCBM 複合溶液係使用 0.45  $\mu\text{m}$  之 PP 針筒過

濾器過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器 (thermal evaporator) 在  $3 \times 10^{-8}$  托耳 (torr) 真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

#### 製備例 5. 製造有機太陽能電池 -5

將實施例 18 所製備之單分子 5 以及 PCBM 以 60 : 40 (w/w 比) 之比例溶於氯苯 (CB) 以製備複合溶液 (composite solution)。此處，濃度係調整至 3.0 wt%，且有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT : PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇進行超音波清潔 (ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT : PSS (baytrom P) 至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，化合物-PCBM 複合溶液係使用 0.45  $\mu\text{m}$  之 PP 針筒過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器 (thermal evaporator) 在  $3 \times 10^{-8}$  托耳 (torr) 真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

#### 製備例 6. 製造有機太陽能電池 -6

將實施例 19 所製備之單分子 6 以及 PCBM 以 60 : 40 (w/w 比) 之比例溶於氯苯 (CB) 以製備複合溶液 (composite solution)。此處，濃度係調整至 3.0 wt%，且有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT : PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇

進行超音波清潔 (ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT:PSS (baytrom P) 至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，化合物-PCBM 複合溶液係使用 0.45 μm 之 PP 針筒過濾器過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器 (thermal evaporator) 在  $3 \times 10^{-8}$  托耳 (torr) 真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

#### 製備例 7. 製造有機太陽能電池-7

將實施例 20 所製備之單分子 7 以及 PCBM 以 60:40 (w/w 比) 之比例溶於氯苯 (CB) 以製備複合溶液 (composite solution)。此處，濃度係調整至 3.0 wt%，且有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT:PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇進行超音波清潔 (ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT:PSS (baytrom P) 至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，化合物-PCBM 複合溶液係使用 0.45 μm 之 PP 針筒過濾器過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器 (thermal evaporator) 在  $3 \times 10^{-8}$  托耳 (torr) 真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

#### 比較例 1

將 P3HT 以及 PC<sub>61</sub>BM 以 1:1 (w/w 比) 之比例溶於氯

苯(CB)以製備複合溶液(composite solution)。此處，濃度係調整至 3.0 wt%，且有機太陽能電池係採用 ITO/PEDOT:PSS/光活性層/Al 結構。塗有 ITO 之玻璃基板係使用蒸餾水、丙酮及 2-丙醇進行超音波清潔(ultrasonic clean)，ITO 表面係以臭氧處理 10 分鐘後，表面旋塗 PEDOT:PSS(baytrom P)至厚度為 45 nm，而後於 120°C 熱處理 10 分鐘。為了塗覆光活性層，P3HT-PC<sub>61</sub>BM 複合溶液係使用 0.45 μm 之 PP 針筒過濾器過濾，然後旋塗，並使用熱蒸發器(thermal evaporator)在 3×10<sup>-8</sup> 托耳(torr)真空下沉積 Al 至厚度為 200 nm，以製造有機太陽能電池。

製備例 1 至 6 以及比較例 1 所製備之有機太陽能電池的光電轉換性質(photoelectric conversion property)係在 100 mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5)的條件下量測，結果示於下表 1。

【 表 1 】

	活性層	V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF	PCE (%)
製備例 1	單分子 1/PC <sub>61</sub> BM=60:40	0.82	12.2	59.2	5.93
製備例 2	單分子 2/PC <sub>61</sub> BM=60:40	0.82	10.6	65.7	5.78
製備例 3	單分子 3/PC <sub>61</sub> BM=60:40	0.83	12.2	65.7	6.55
製備例 4	單分子 4/PC <sub>61</sub> BM=60:40	0.84	11.6	70.3	6.90
製備例 5	單分子 5/PC <sub>61</sub> BM=60:40	0.82	13.1	67.7	7.27
製備例 6	單分子 6/PC <sub>61</sub> BM=60:40	0.66	12.9	59.7	5.05
製備例 7	單分子 7/PC <sub>61</sub> BM=60:40	0.81	11.02	58.3	5.20
比較例 1	P3HT/PC <sub>61</sub> BM=1:1	0.62	9.97	45.5	2.81

表 1 中， $V_{oc}$  表示開路電壓(open voltage)、 $J_{sc}$  表示短路電流(short-circuit current)、FF 表示填充因數(fill factor)、以及 PCE 表示能量轉換效率(energy conversion efficiency)。開路電壓及短路電流係各為電壓-電流密度曲線於第四象限之 X-軸及 Y-軸的截距，當此兩值增加時，係較佳地增進太陽能電池之效率。此外，填充因數為將曲線內可繪出之矩形的面積除以短路電流與開路電壓之乘積的值。當該三值除以所照射之光時，可得到能量轉換效率，且以較高值為佳。

圖 30 係示出包含實施例 14 所製備之單分子 1 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 31 係示出出包含實施例 15 所製備之單分子 2 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 32 係示出包含實施例 16 所製備之單分子 3 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 33 係示出包含實施例 17 所製備之單分子 4 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 34 係示出包含實施例 18 所製備之單分子 5 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 35 係示出包含實施例 19 所製備之單分子 6 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 36 係圖示包含實施例 20 所製備之單分子 7 的有機太陽能電池的電流密度-電壓圖。

圖 37 係示出根據比較例 1 之有機太陽能電池的電流

密度-電壓圖。

【符號說明】

101：基板

102：第一電極

103：電洞傳輸層

104：光活性層

105：第二電極

I665204

公 告 本

發明摘要

※申請案號：103136467

C07D 519/00 (2006.01)

※申請日：103年10月22日

※IPC分類：

C08G 61/12 (2006.01)

H01L 51/42 (2006.01)

【發明名稱】(中文/英文)

單分子及包含彼之有機太陽能電池

Unimolecular and organic solar cell comprising the same

【中文】

本案係提供單分子以及包含彼之有機太陽能電池。

【英文】

The present specification provides a unimolecule and an organic solar cell including the same.

## 【代表圖】

【本案指定代表圖】：第(38)圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

101：基板

102：第一電極

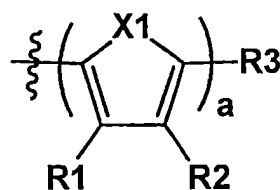
103：電洞傳輸層

104：光活性層

105：第二電極

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：化學式 1

[化學式 1]



圖式

圖 1

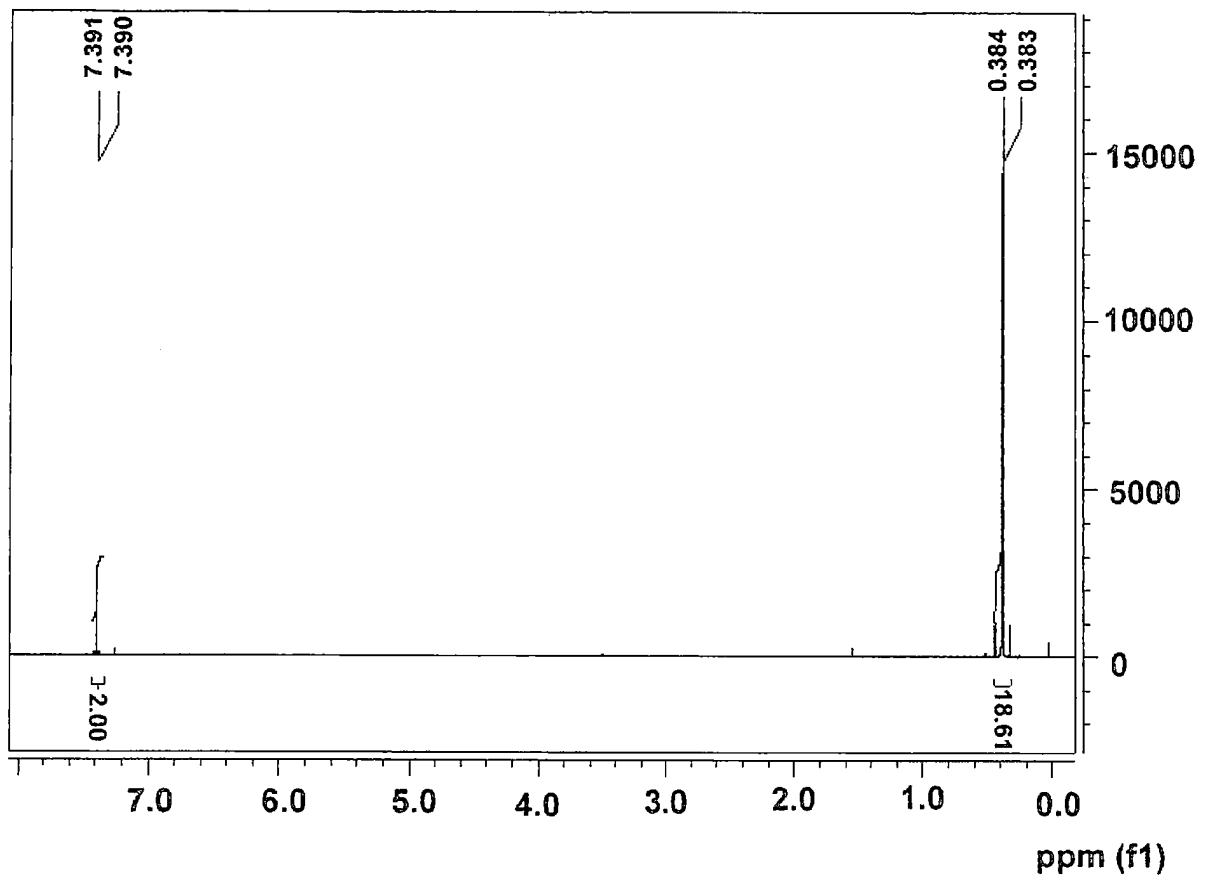


圖 2

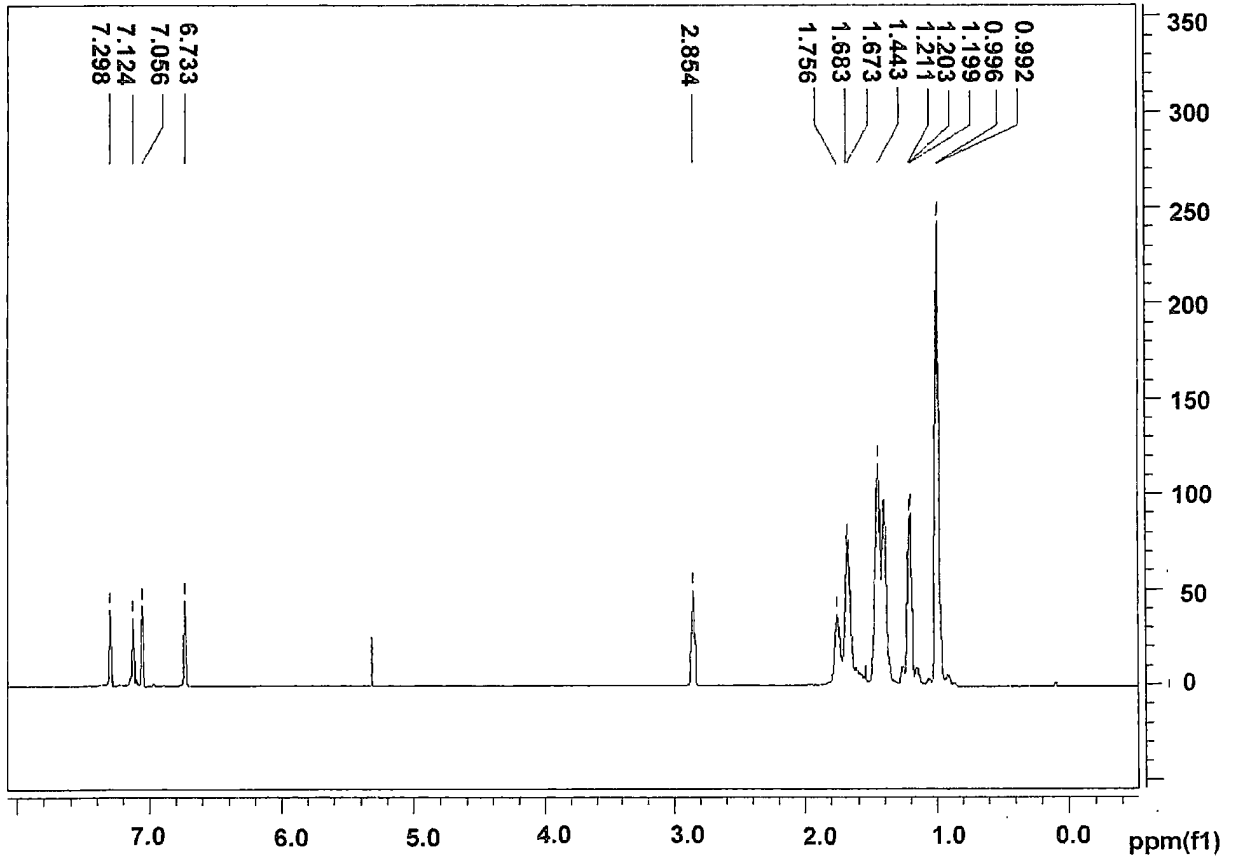


圖 3

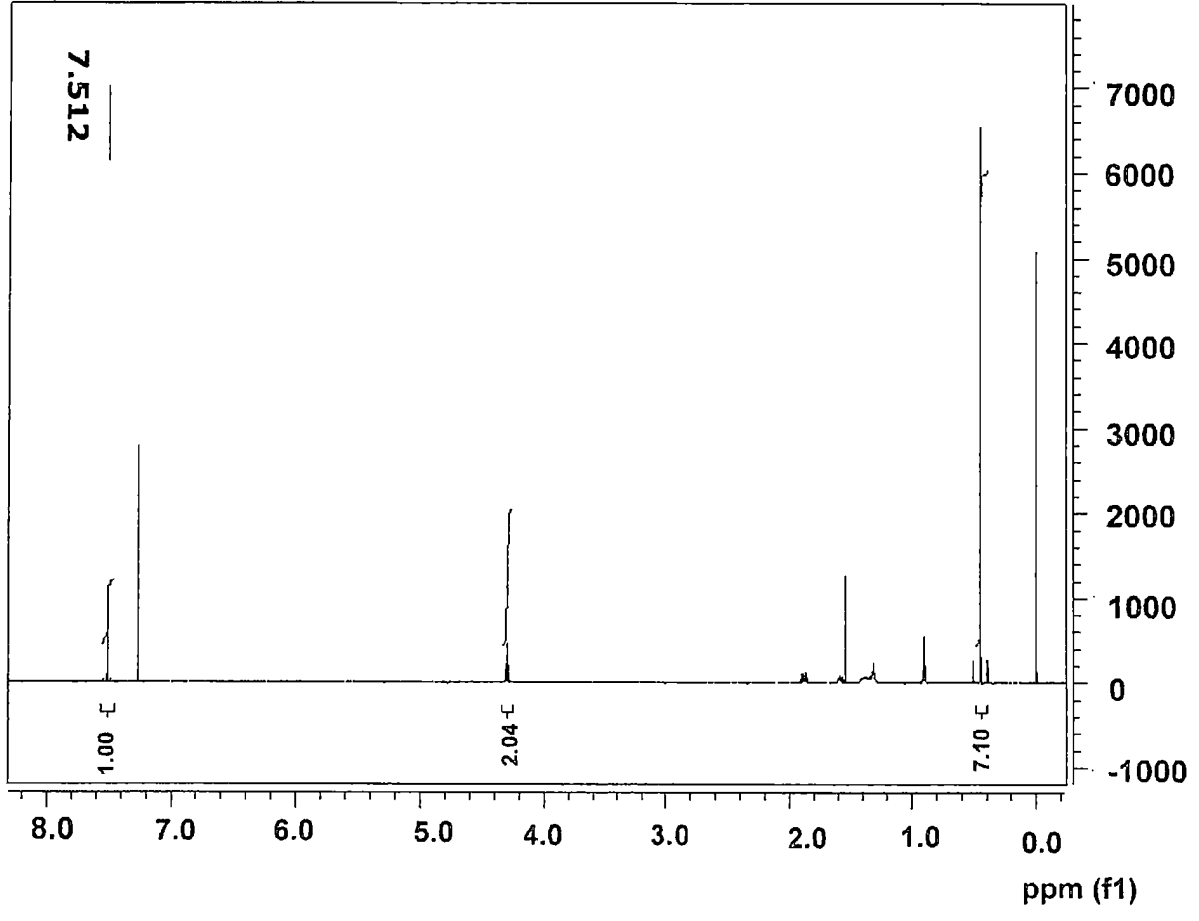


圖 4

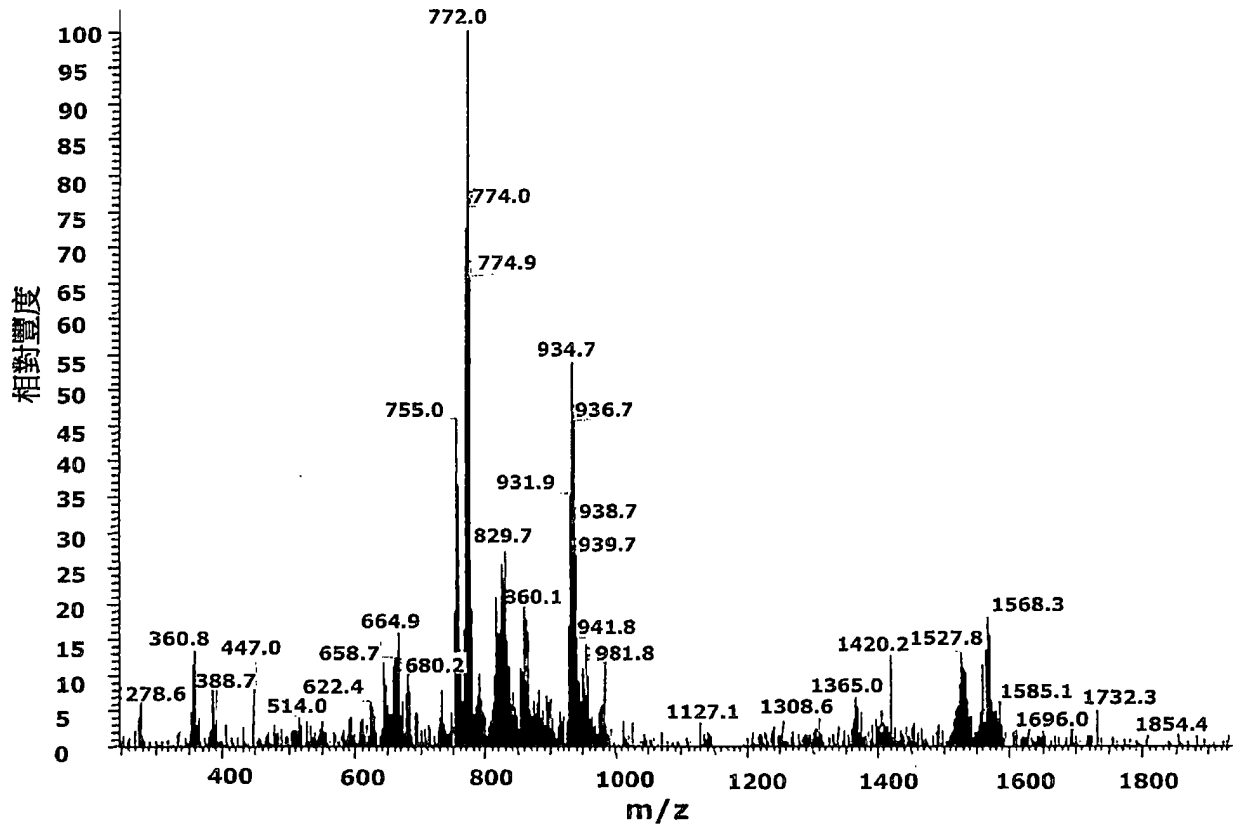


圖 5

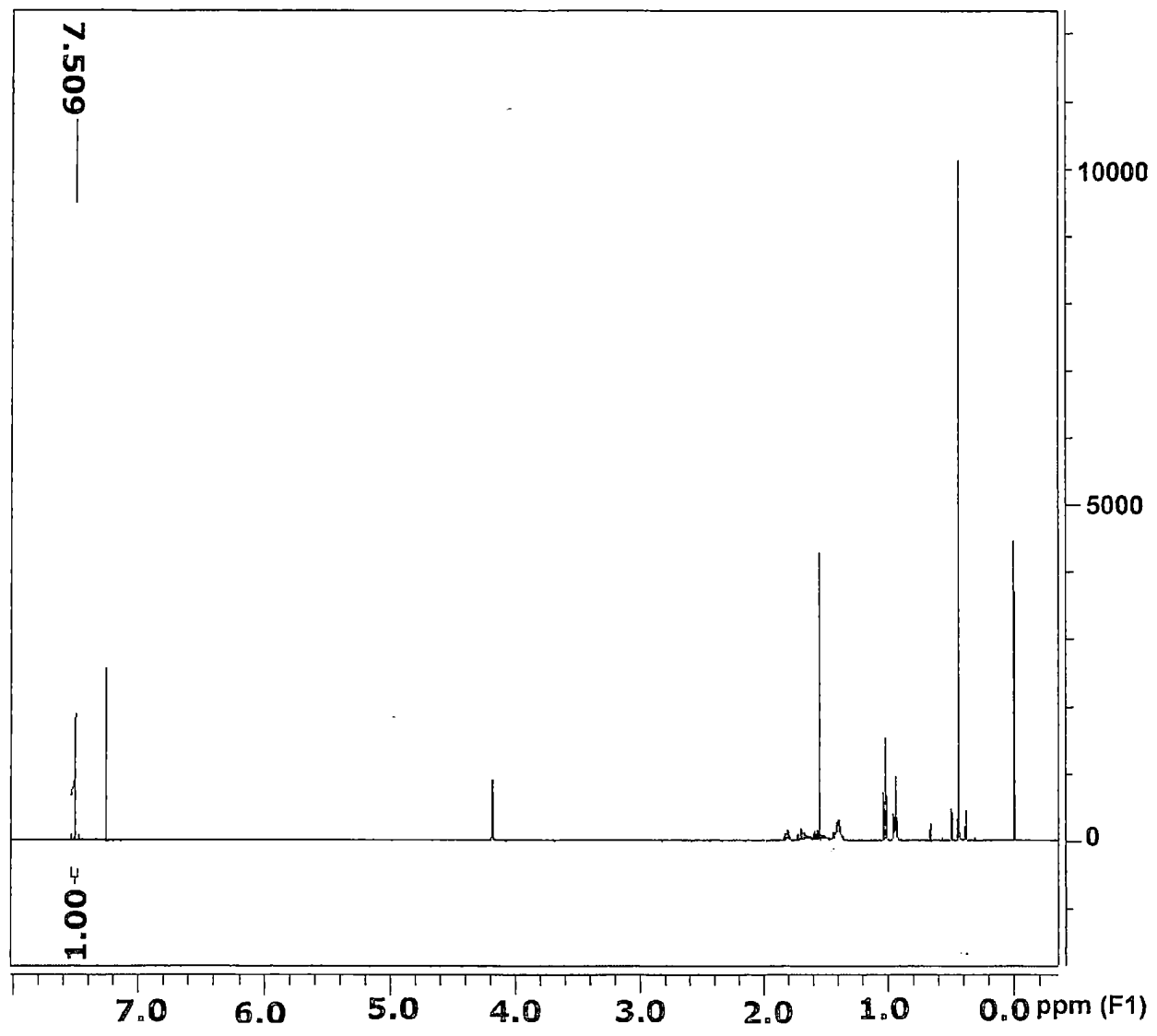


圖 6

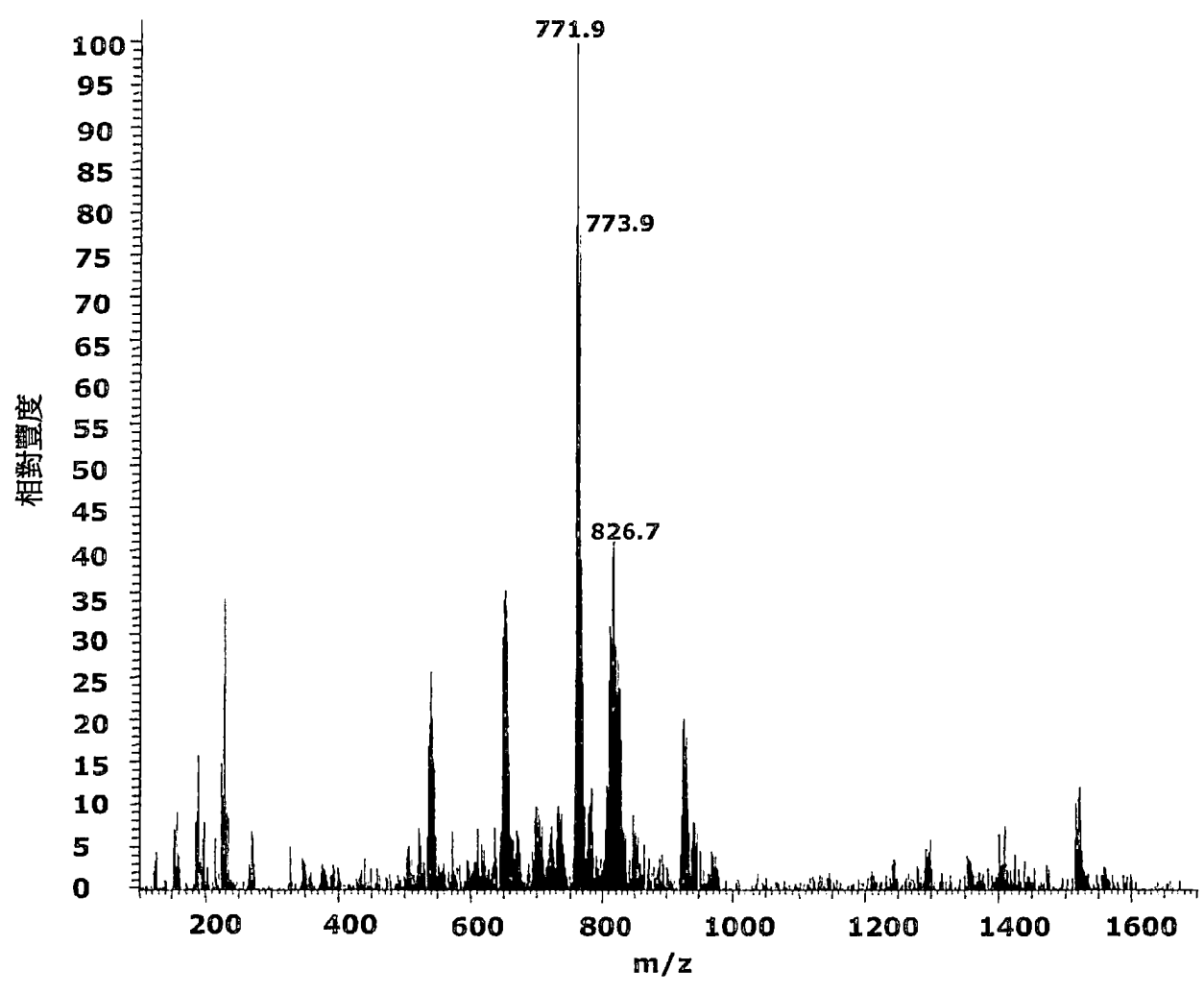


圖 7

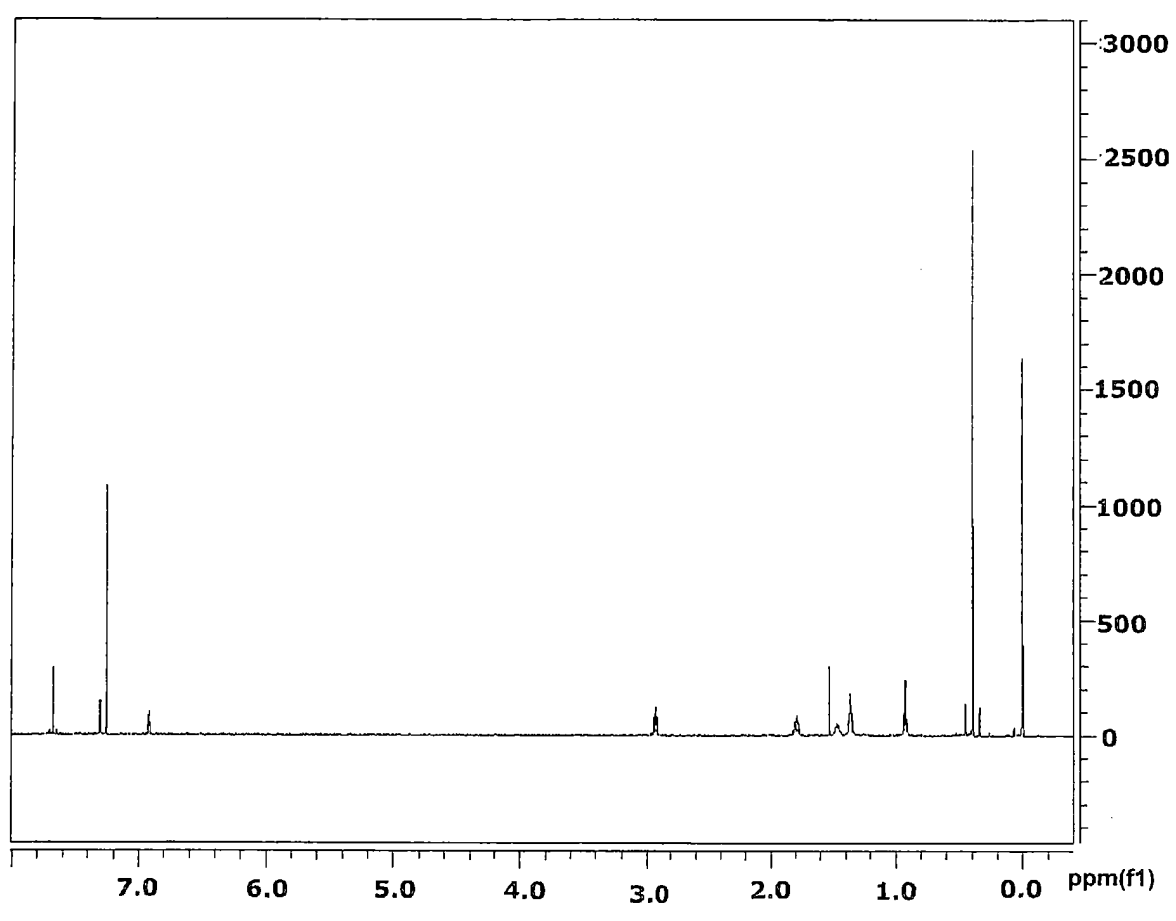


圖 8

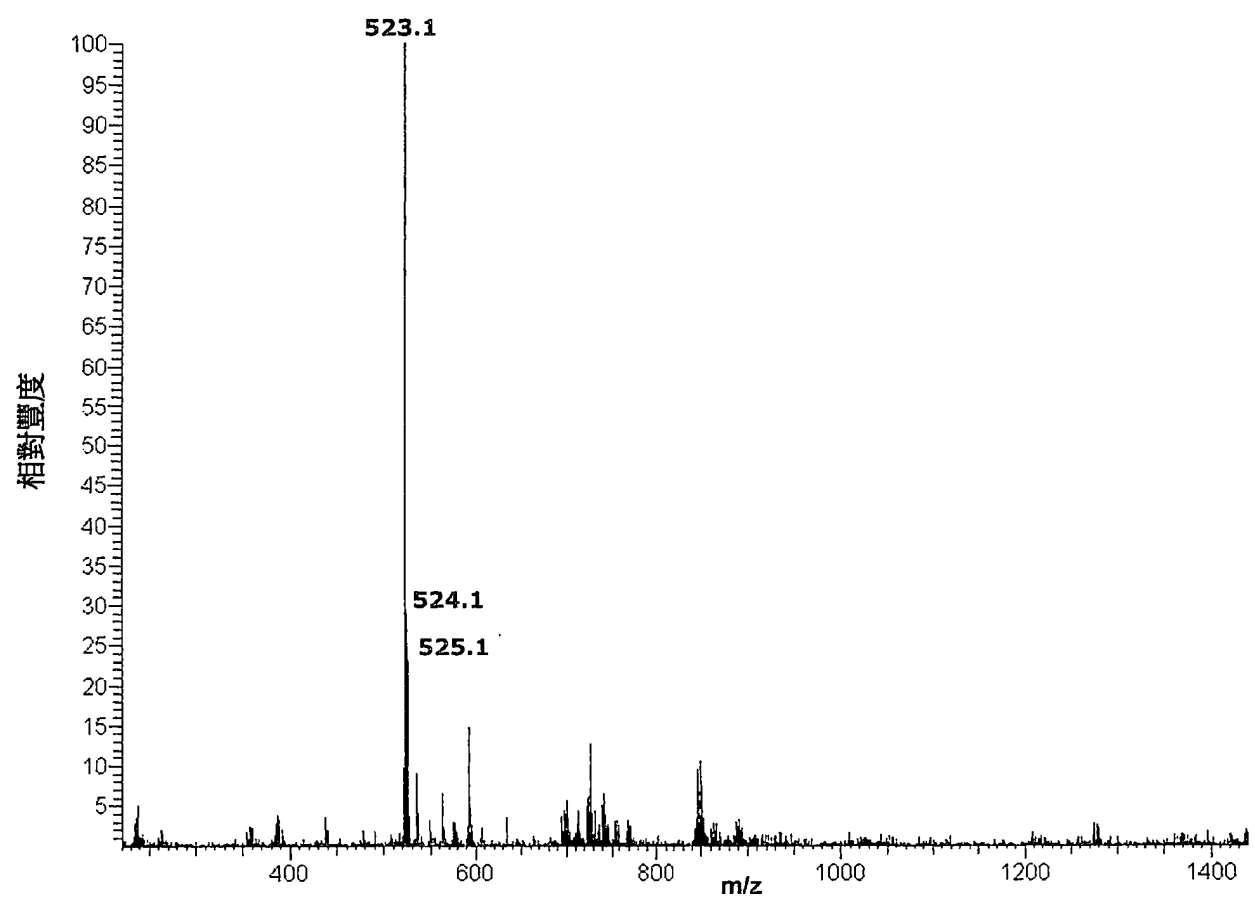


圖 9

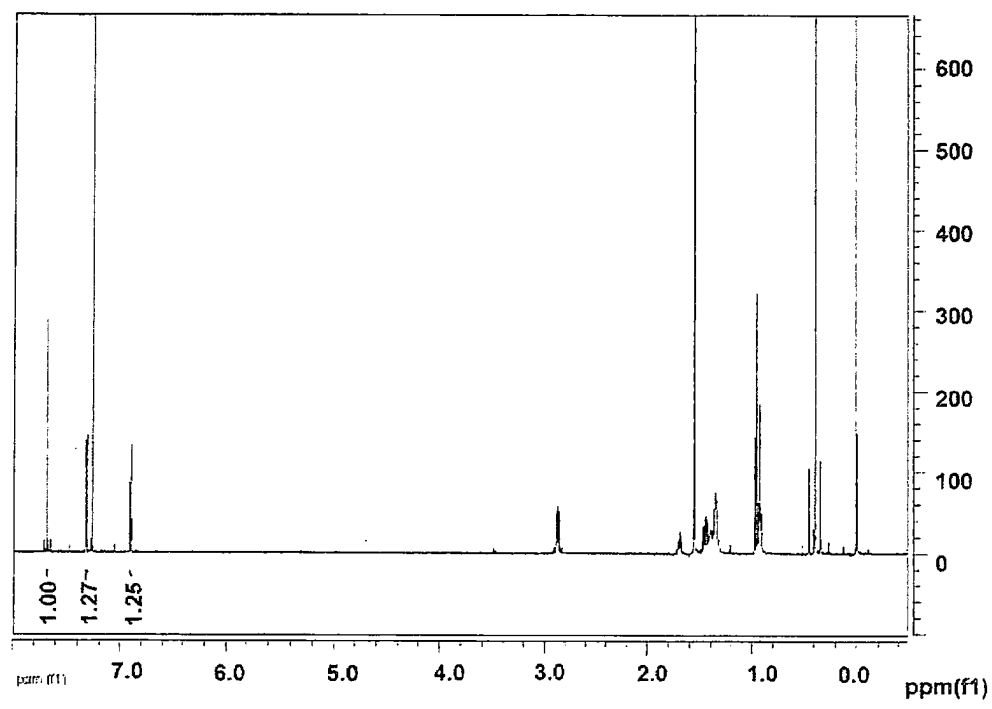


圖 10

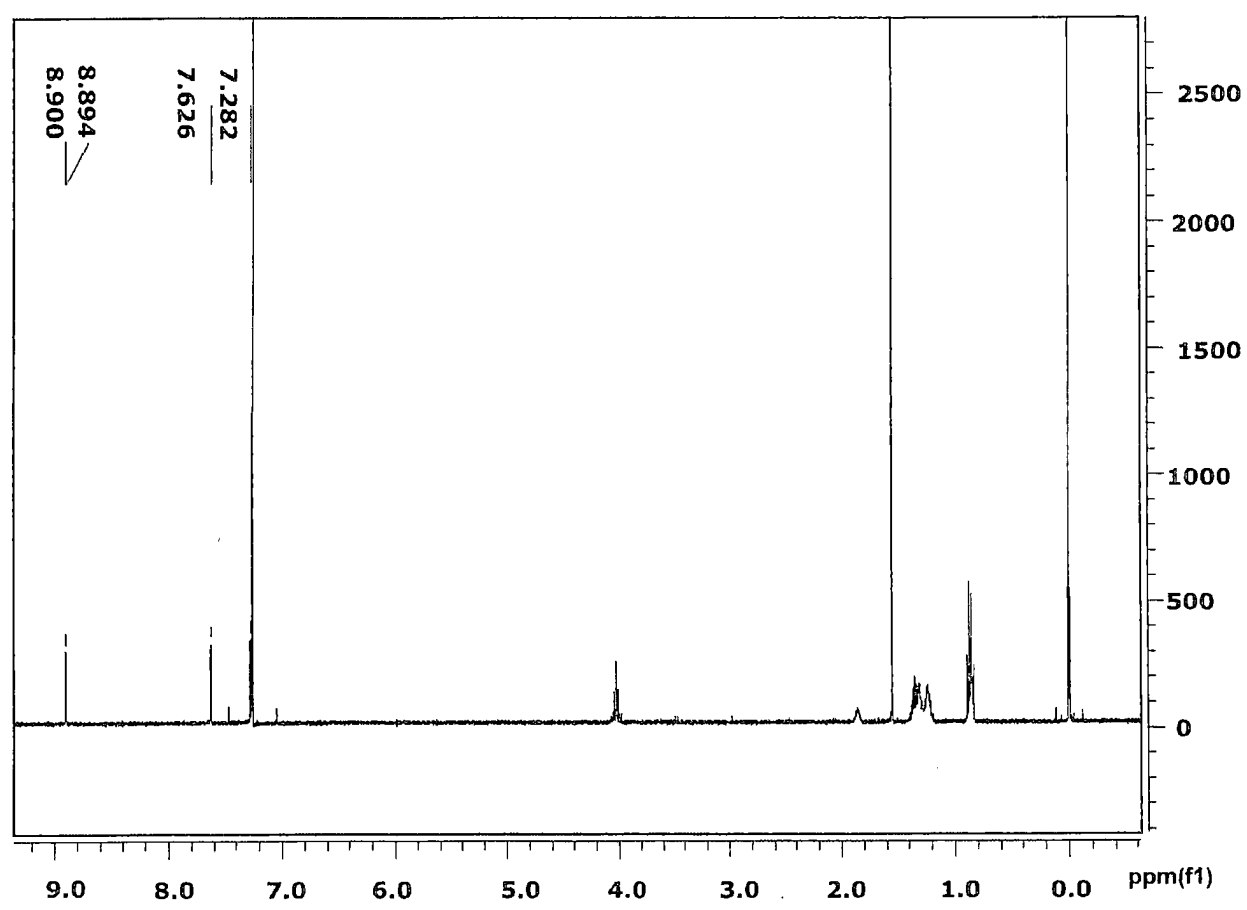


圖 11

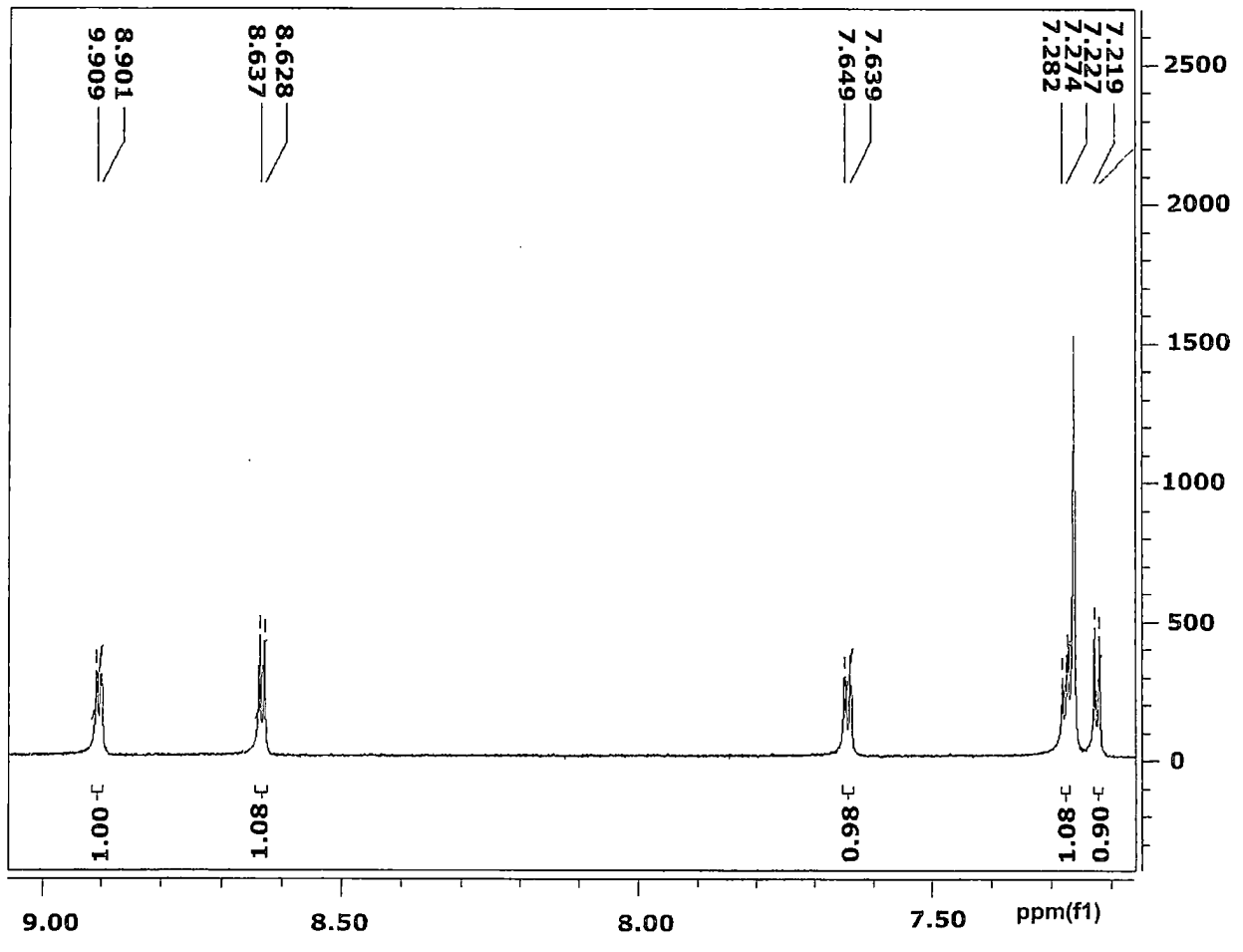


圖 12

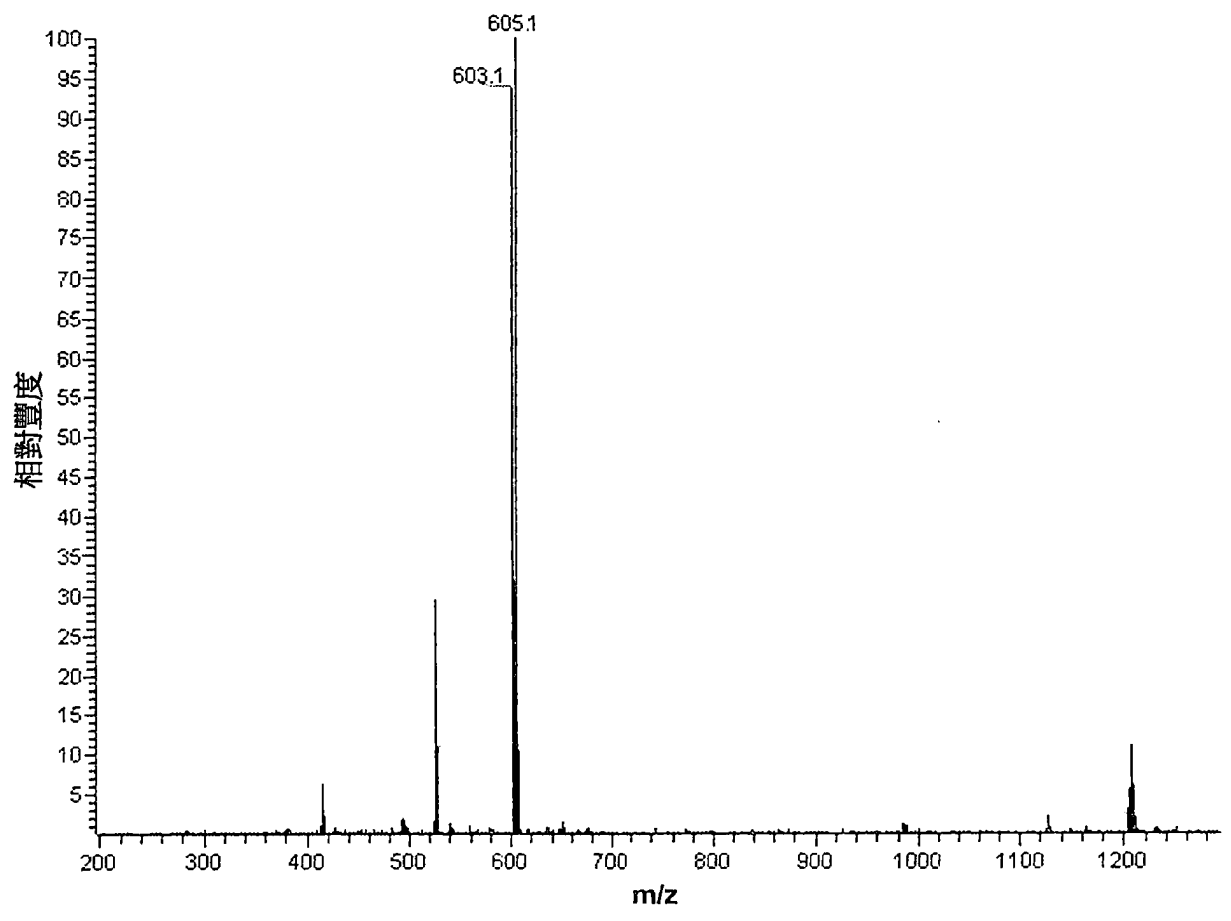


圖 13

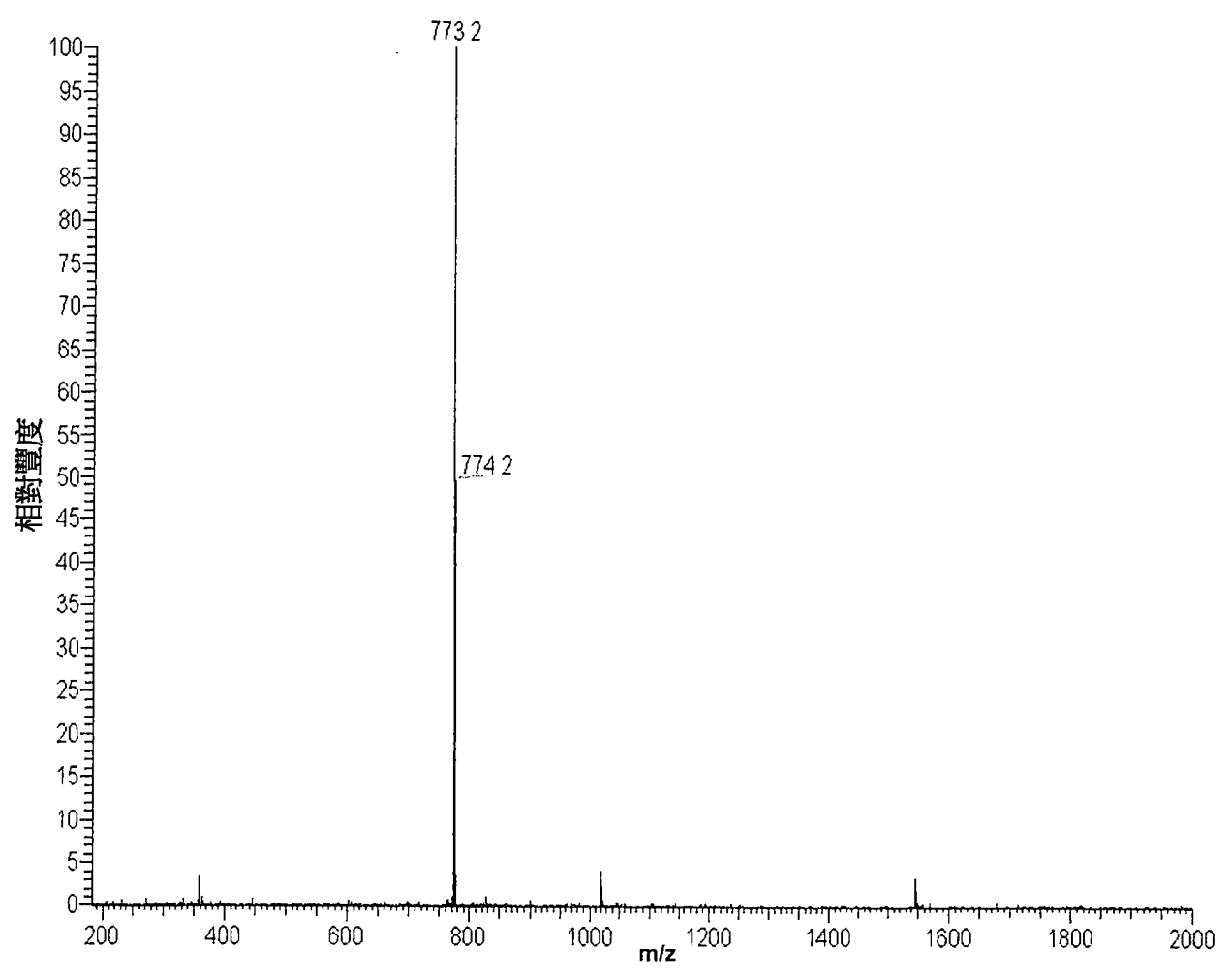


圖 14

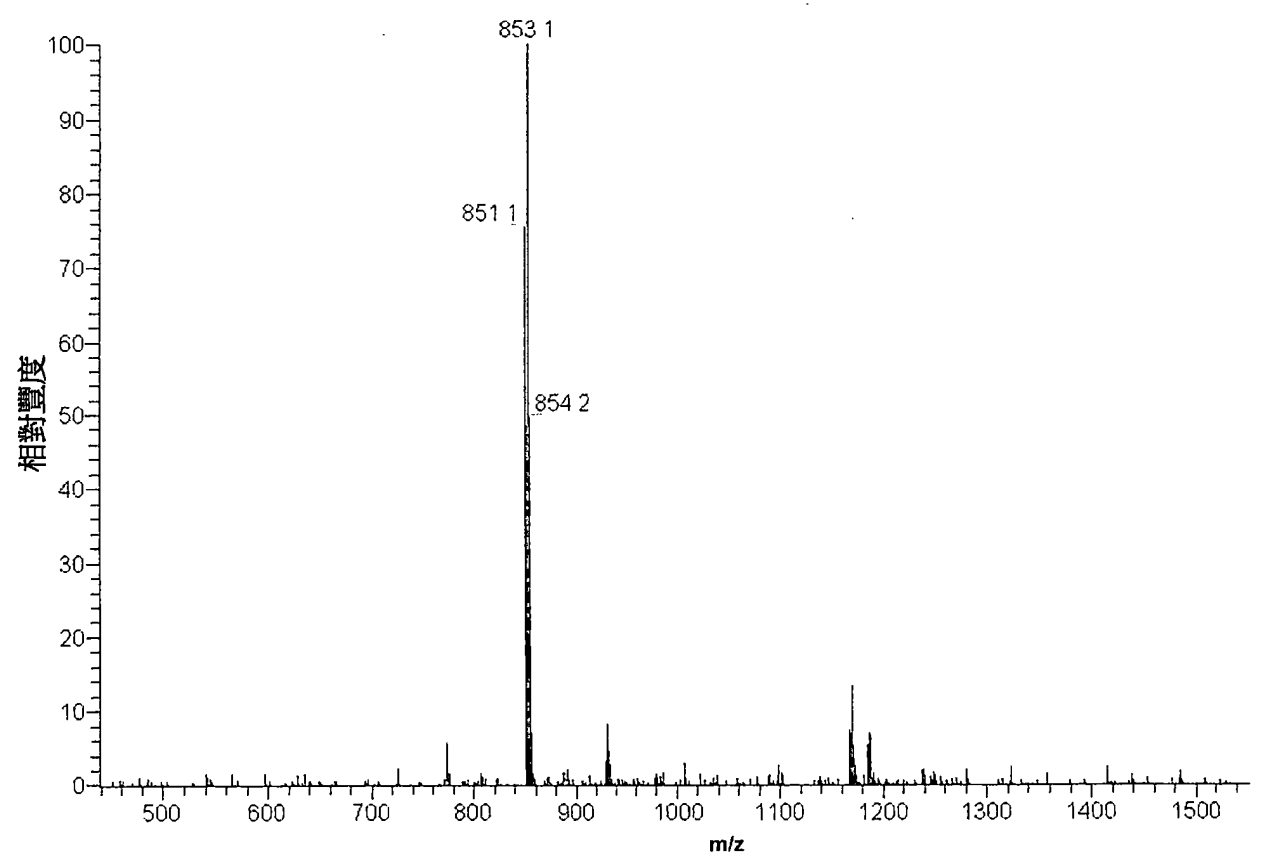


圖 15

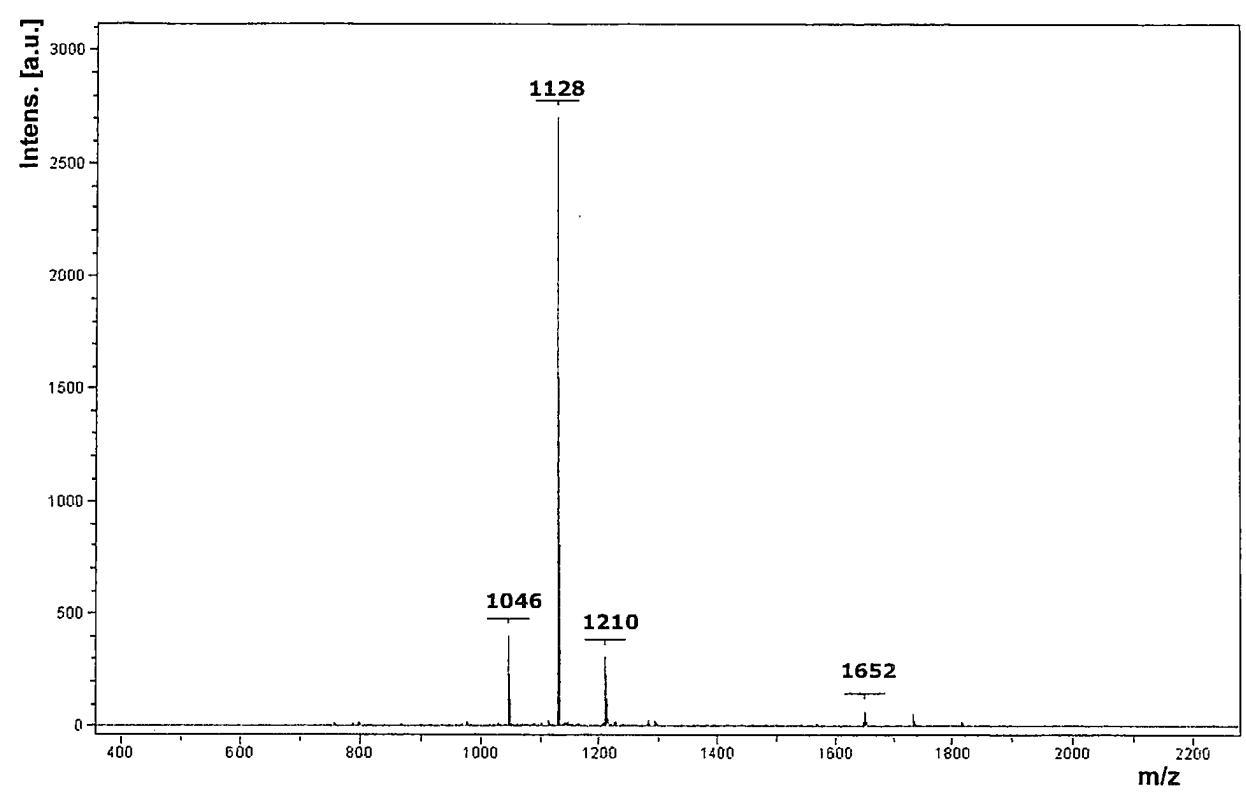


圖 16

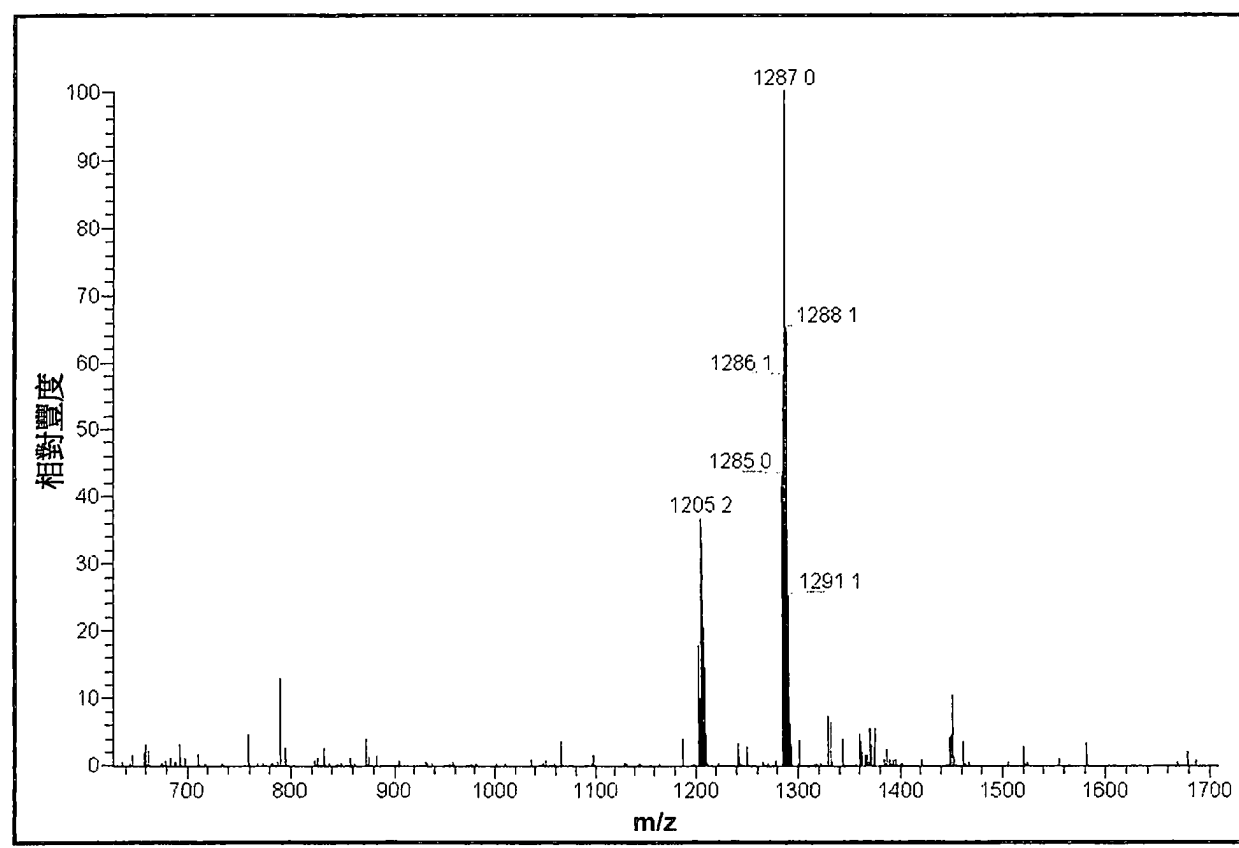


圖 17

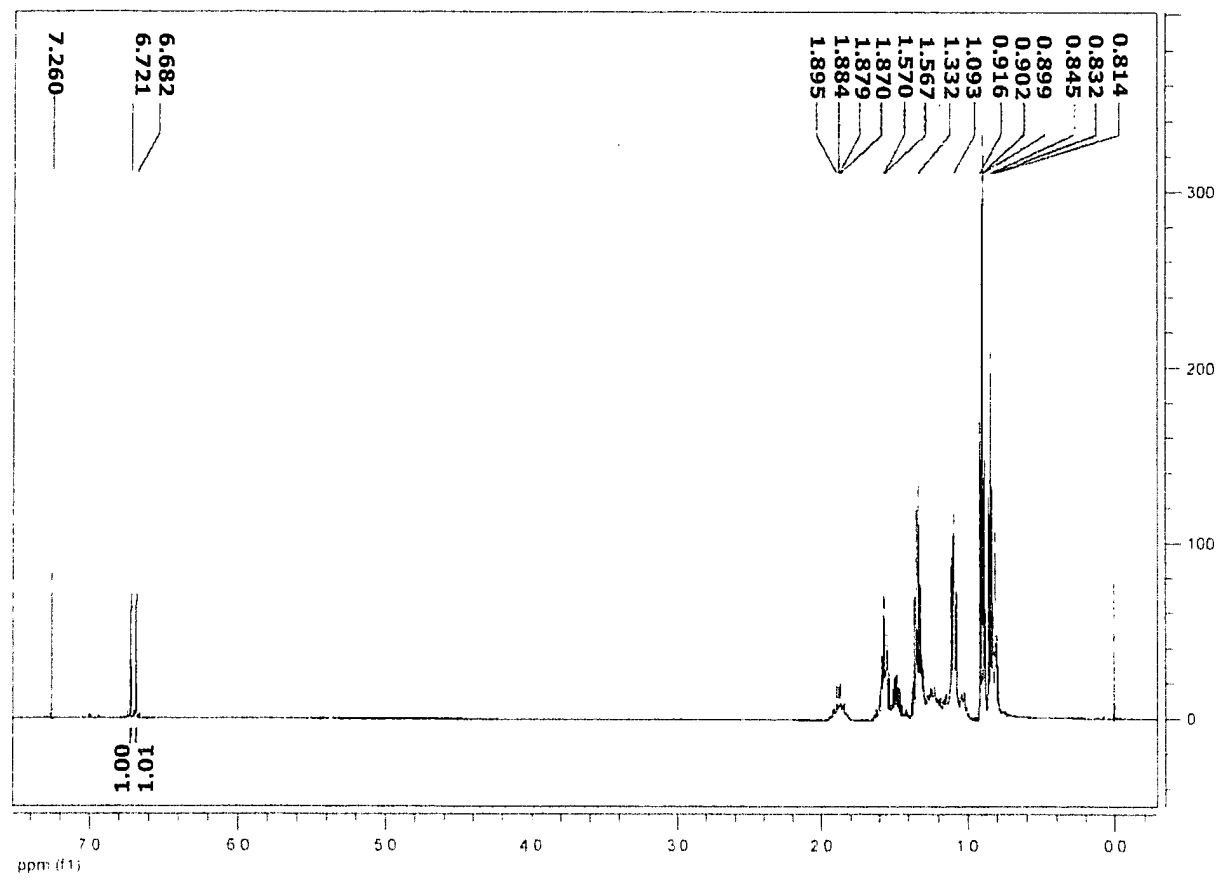


圖 18

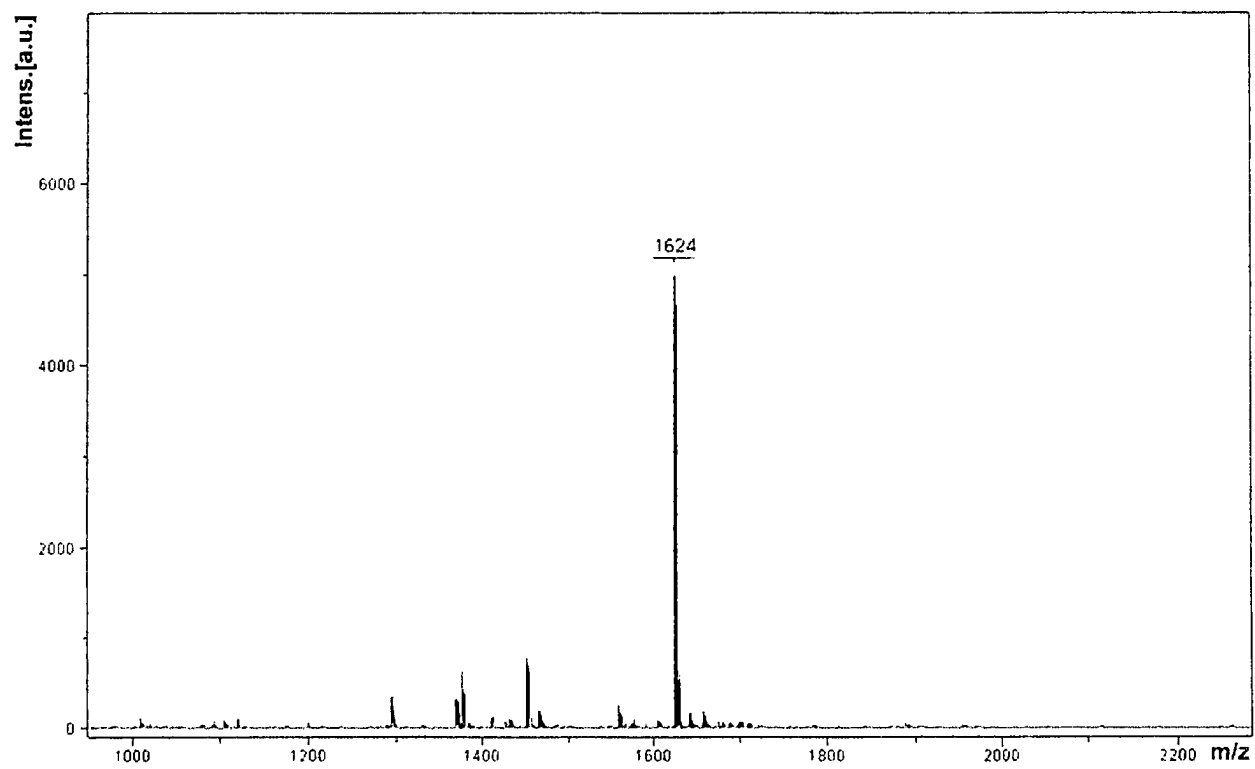


圖 19

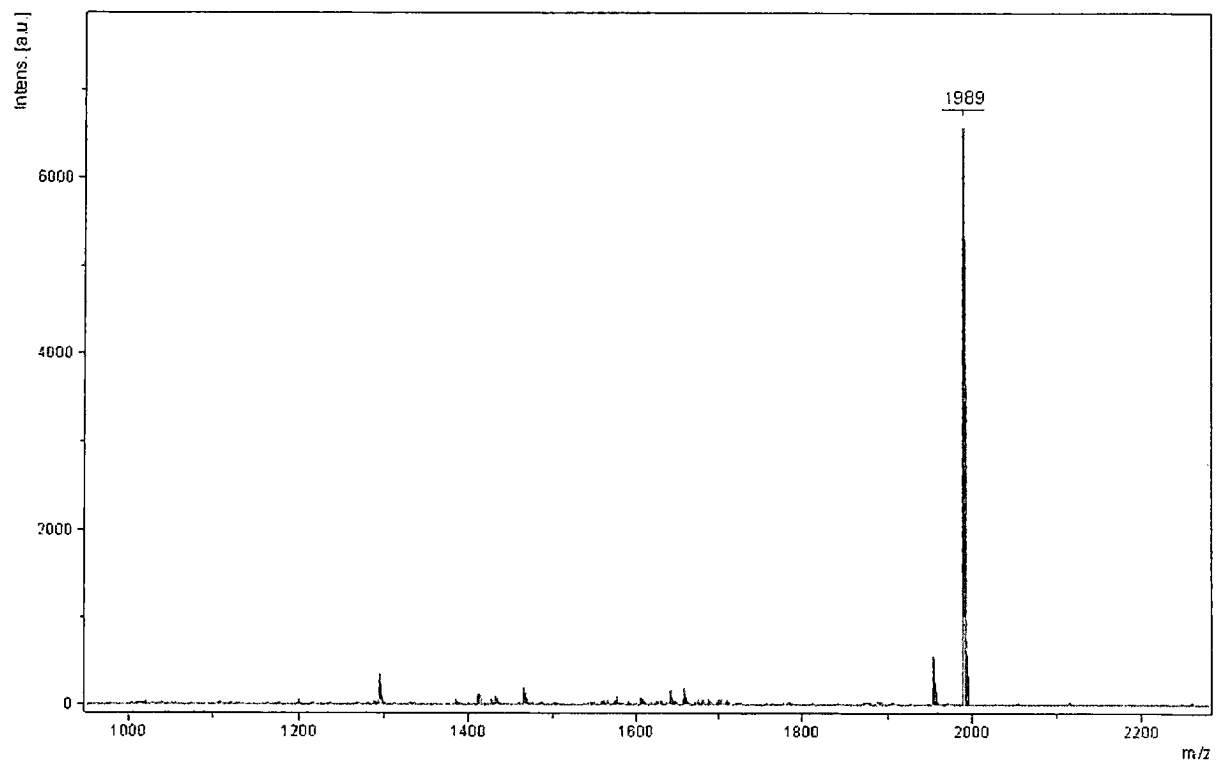


圖 20

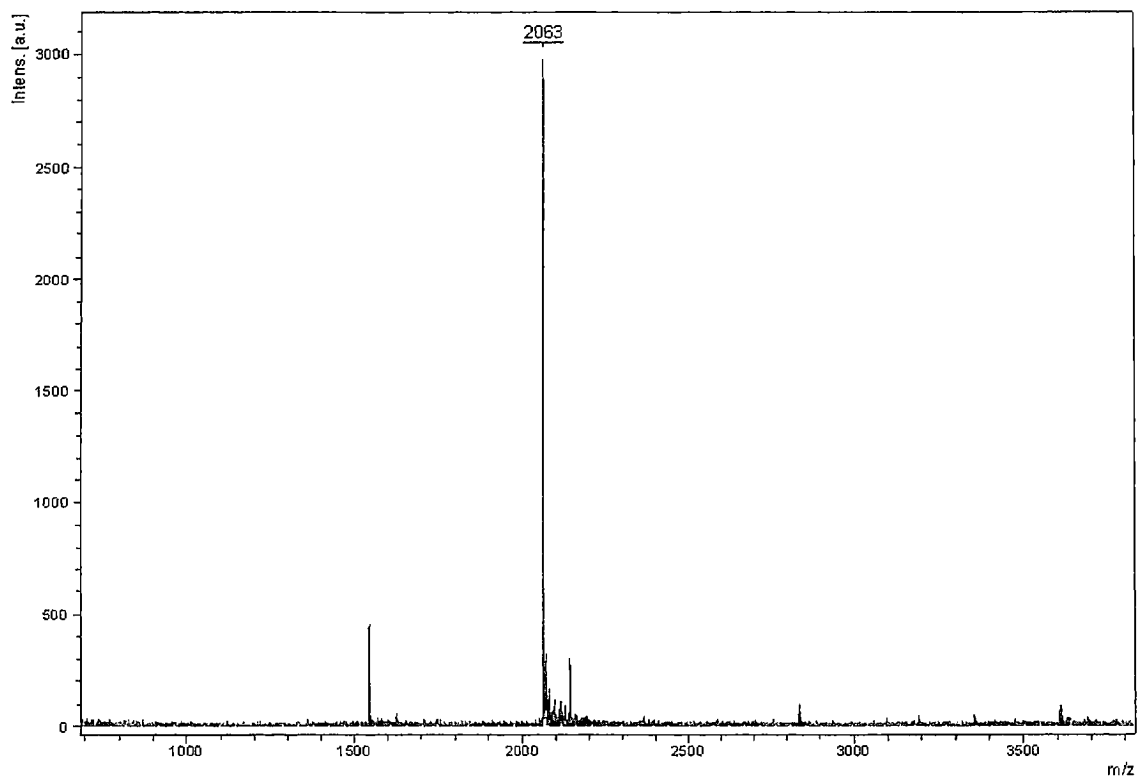


圖 21

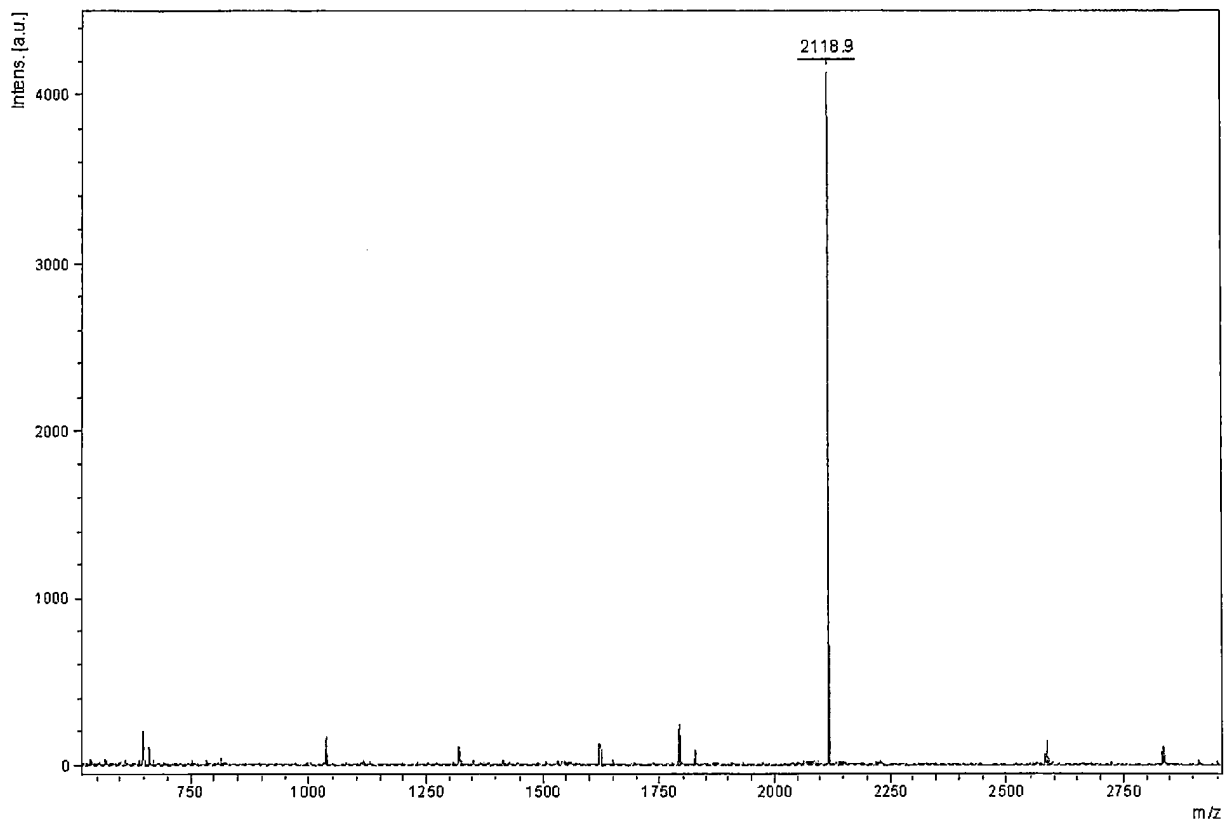


圖 22

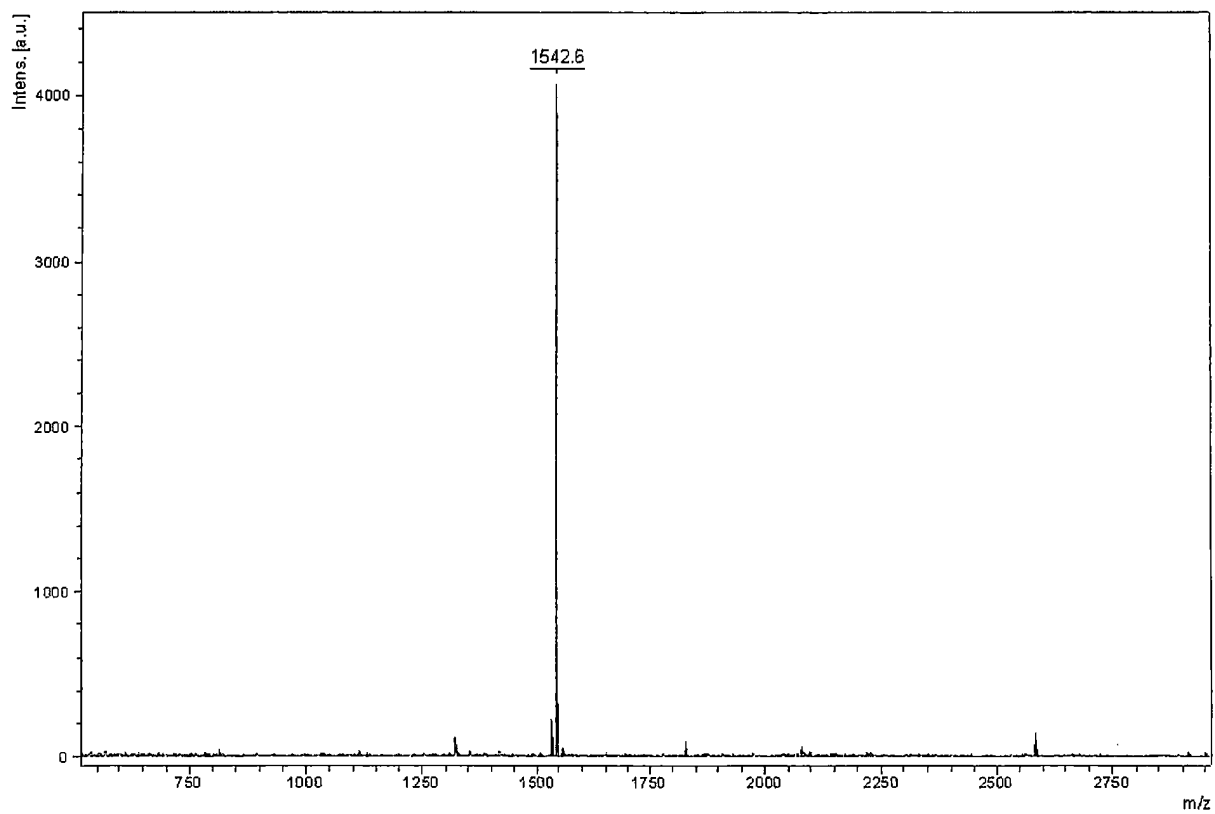


圖 23

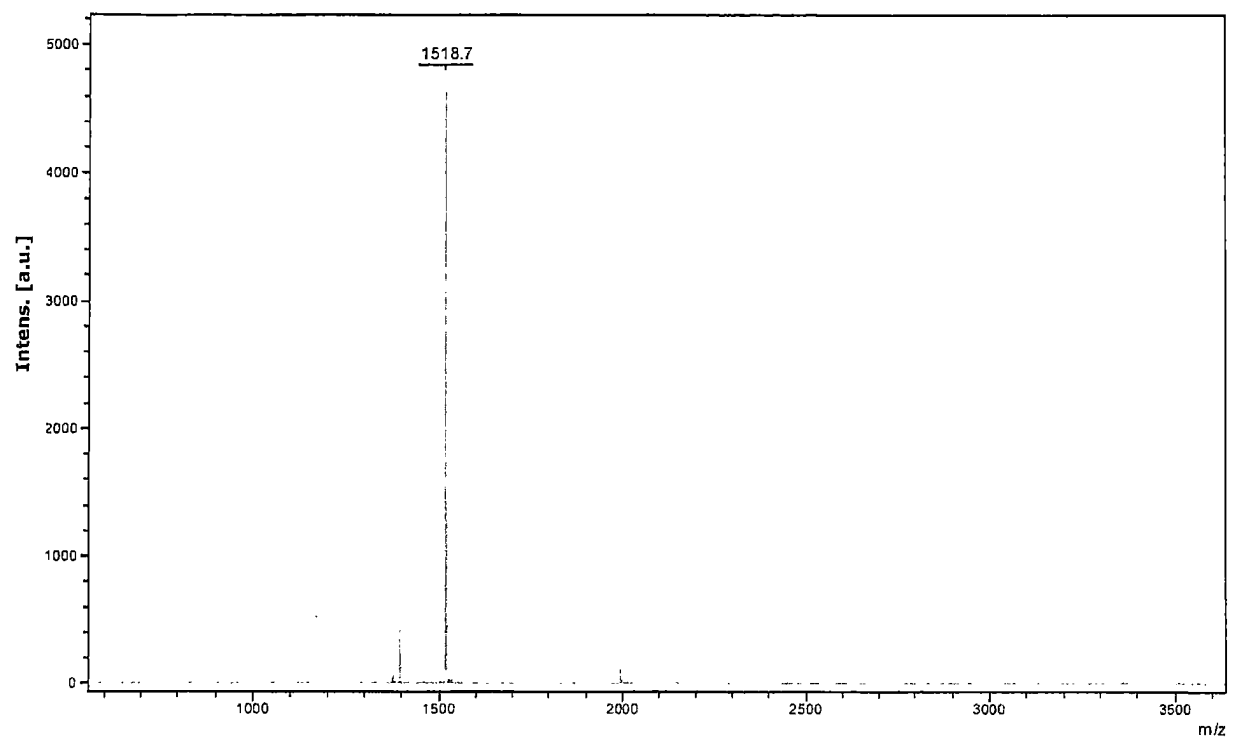


圖 24

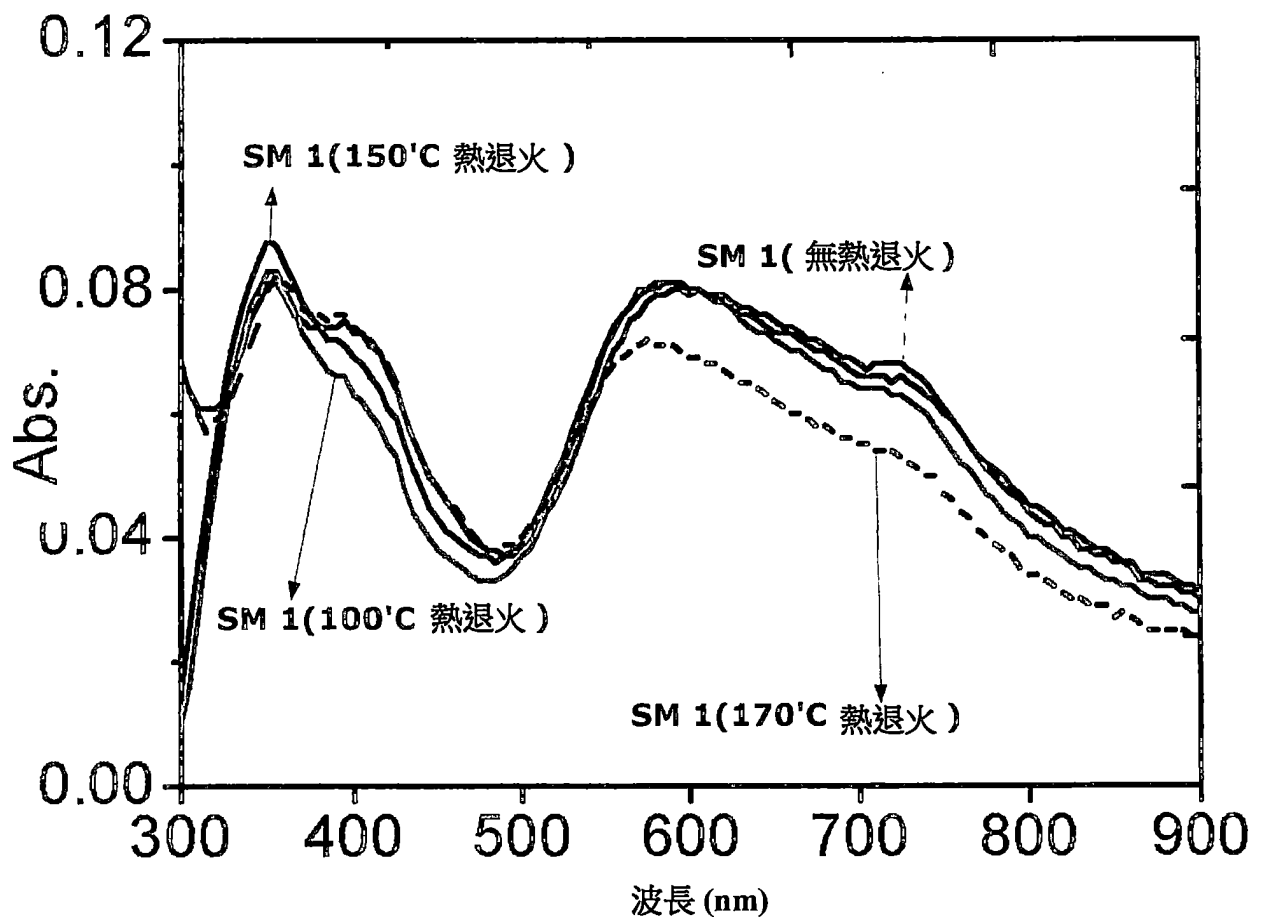


圖 25

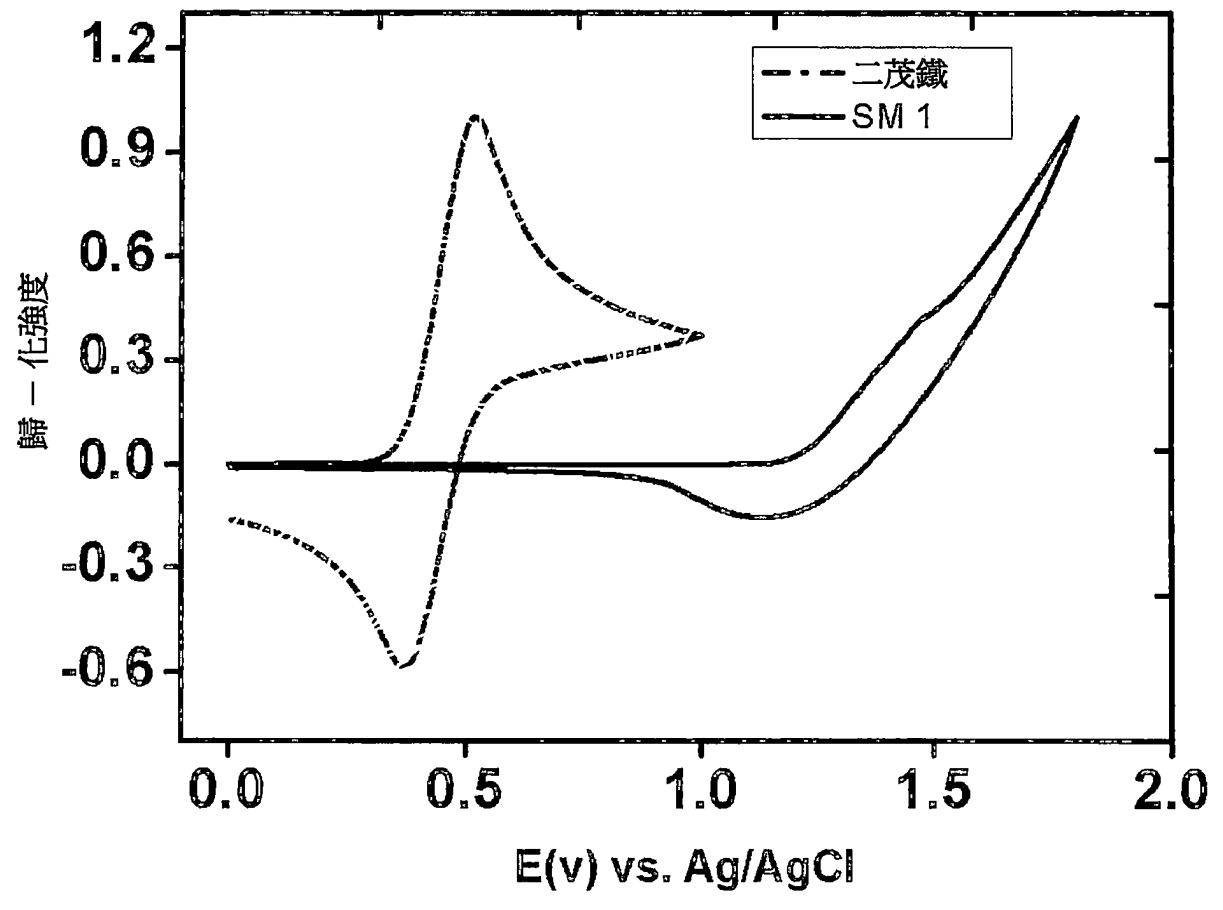
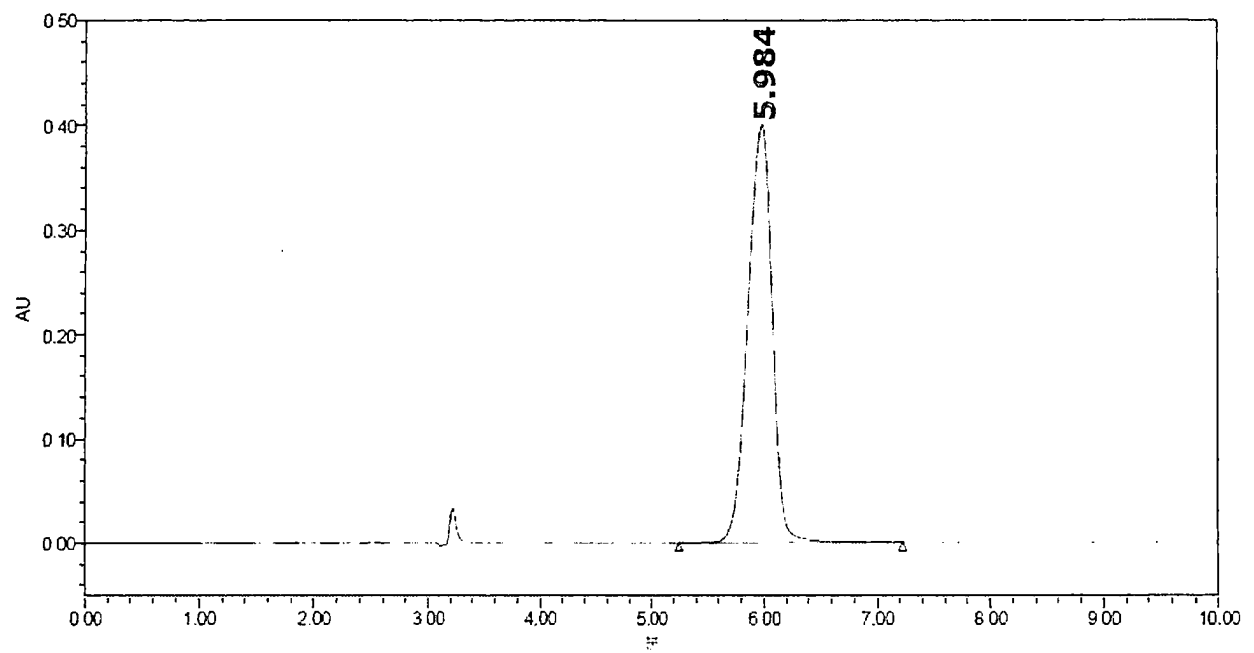
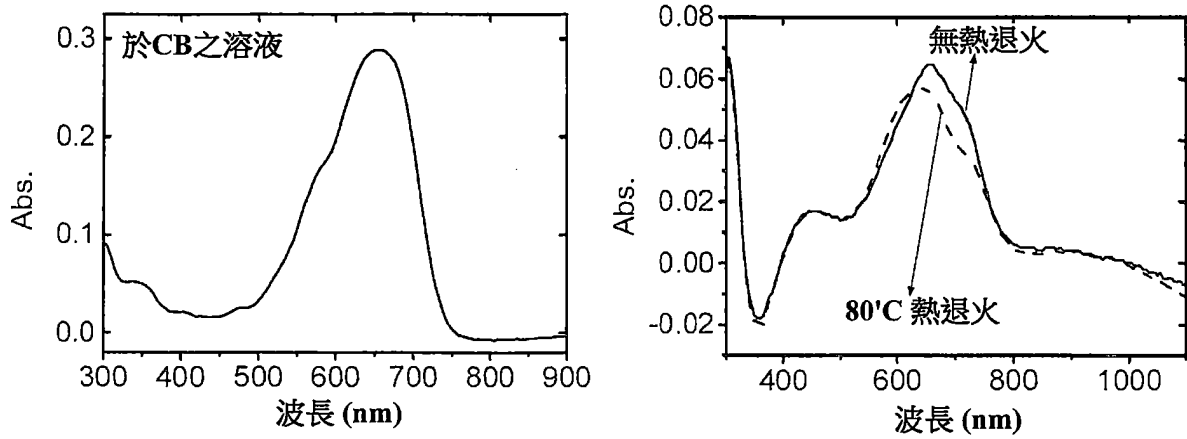


圖 26



	RT	Area	% Area	Height
1	5.984	6031900	100.00	399626

圖 27



	Temp.	$\lambda_{max1}$	$\lambda_{max2}$	$\lambda_{edge}$	$E_g$
於CB之溶液	25	655.0	-	742.4	1.67
膜	25	656.8	454.5	816.9	1.52
膜	80	640.8	454.8	831.9	1.49

圖 28

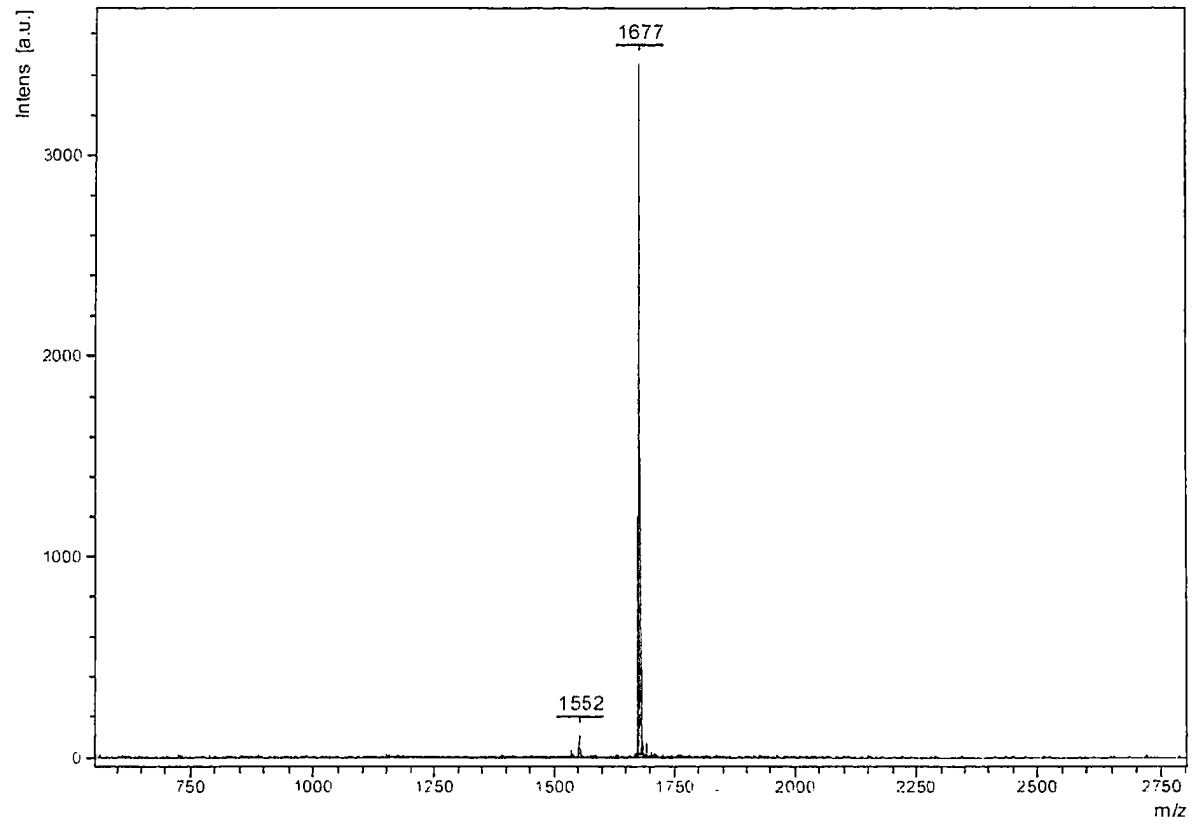


圖 29

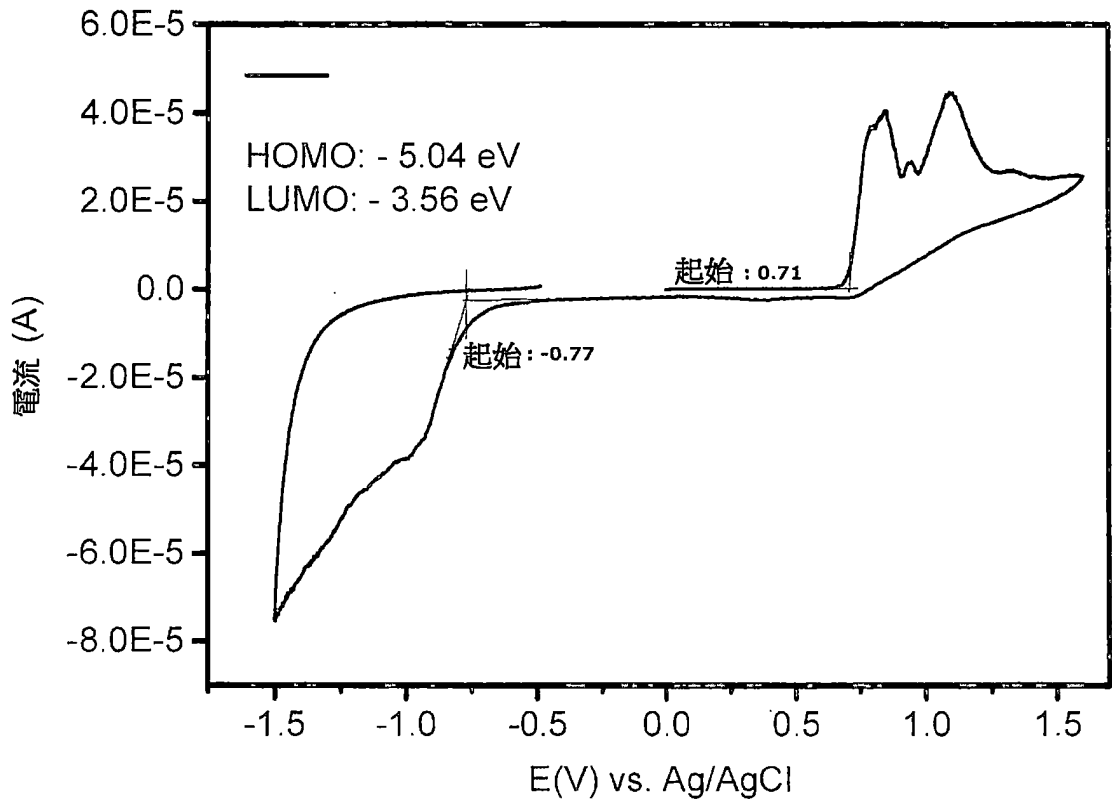


圖 30

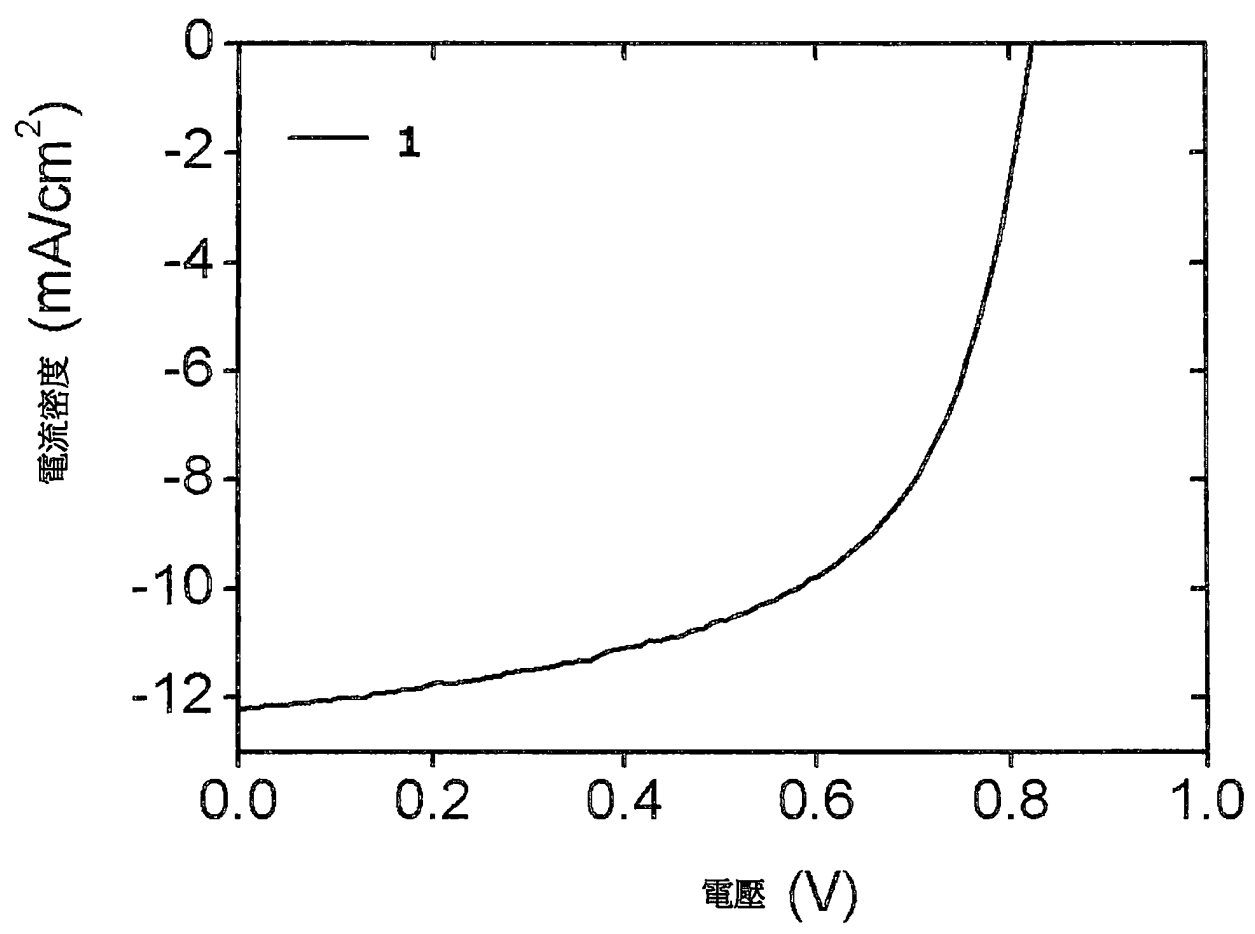


圖 31

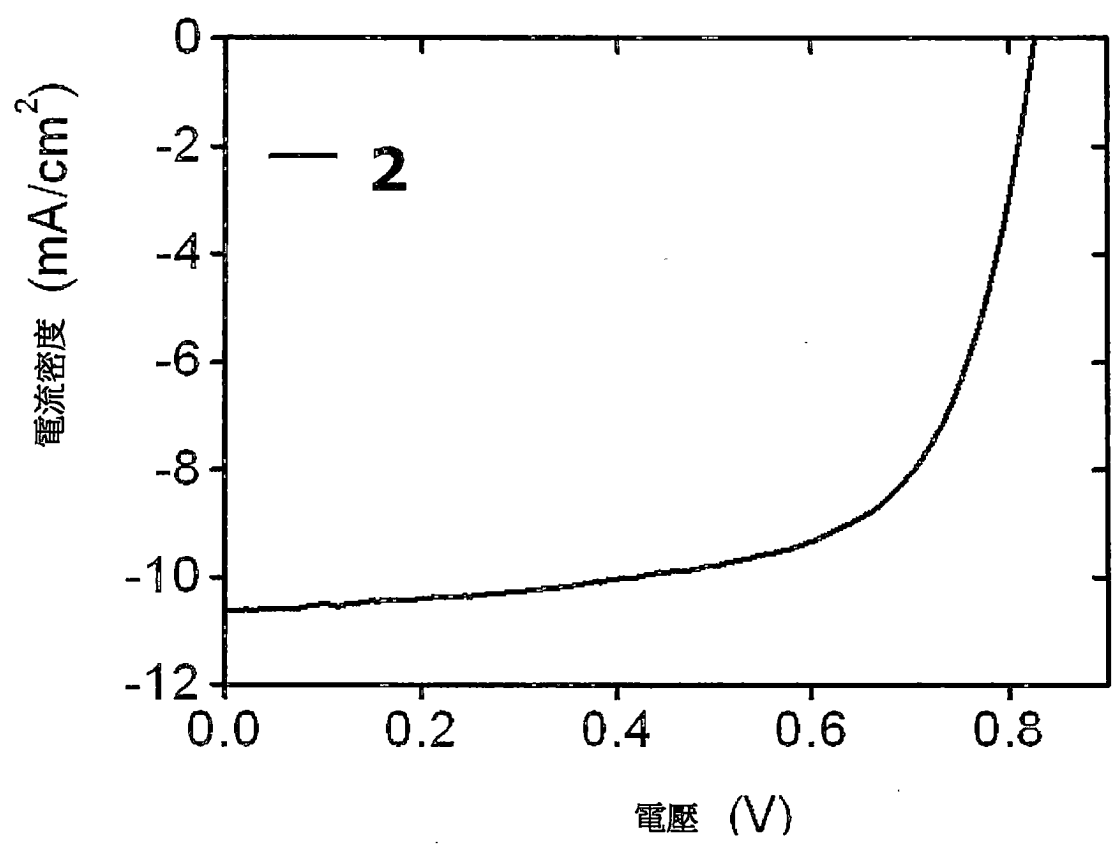


圖 32

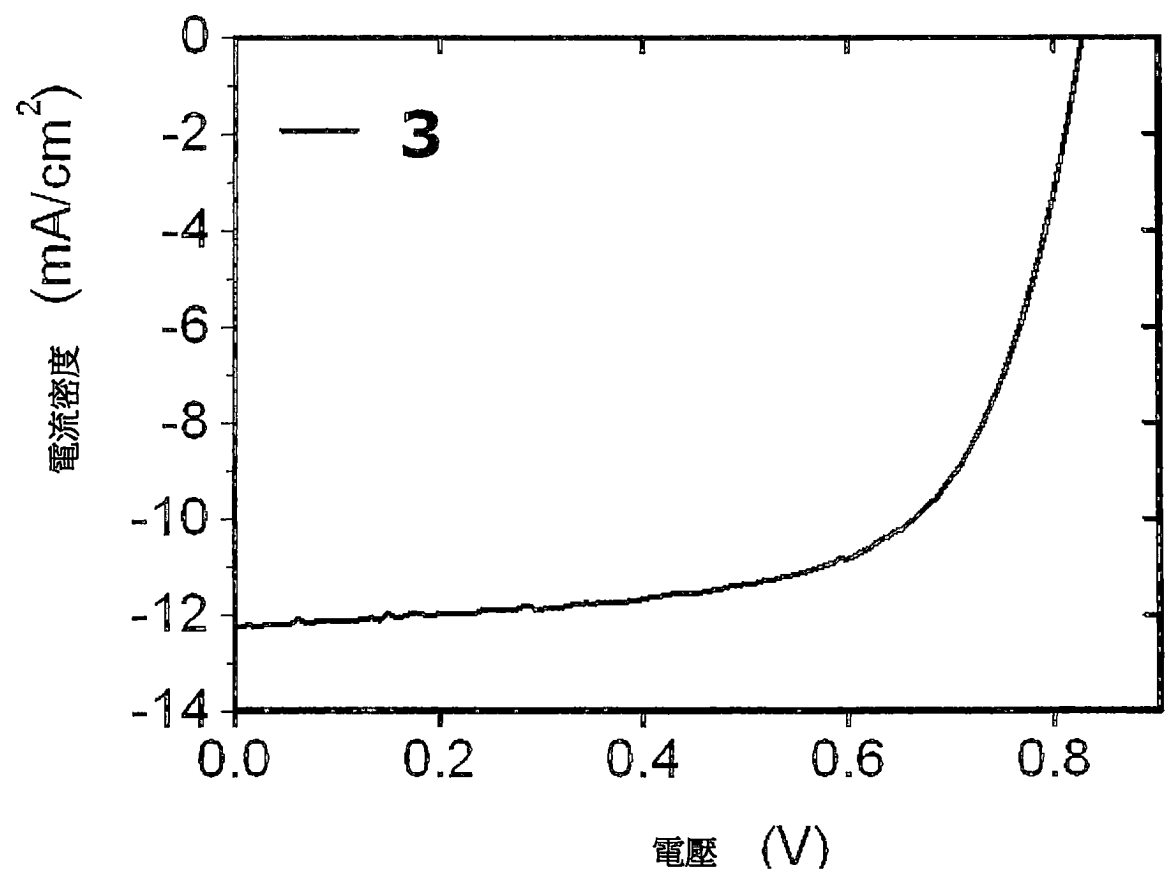


圖 33

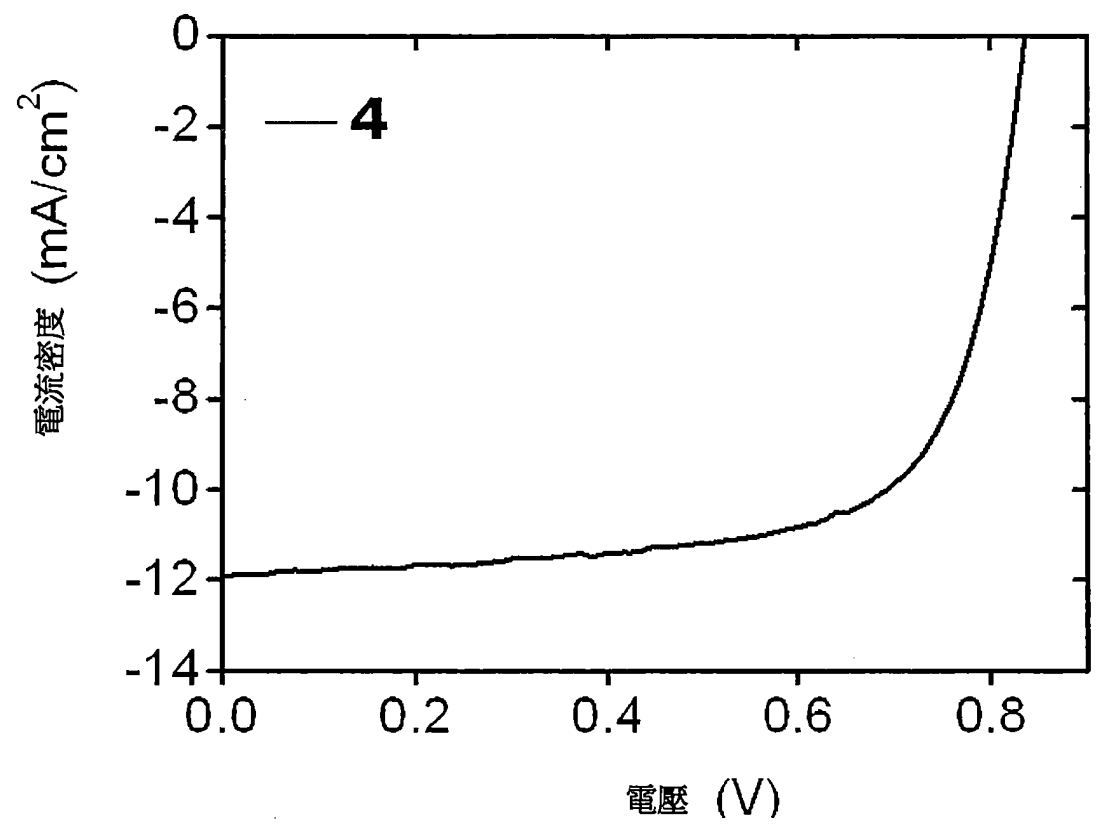


圖 34

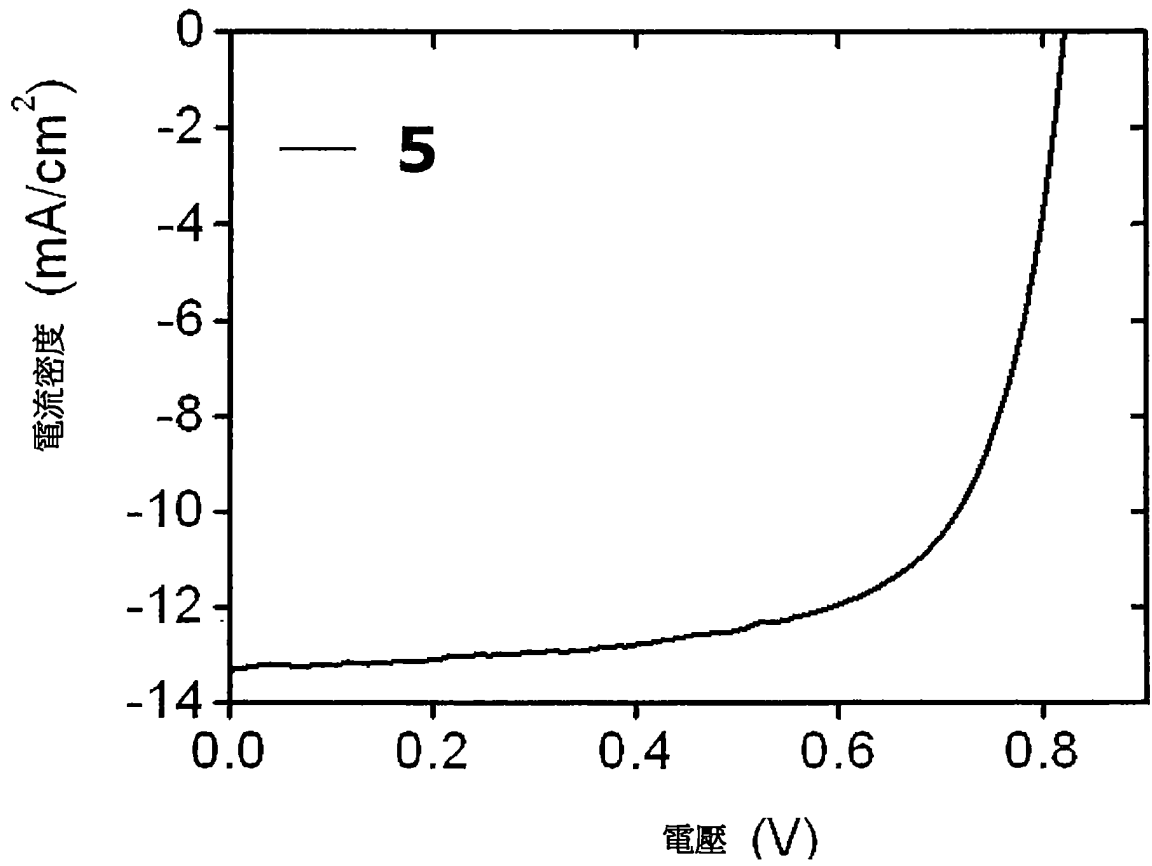


圖 35

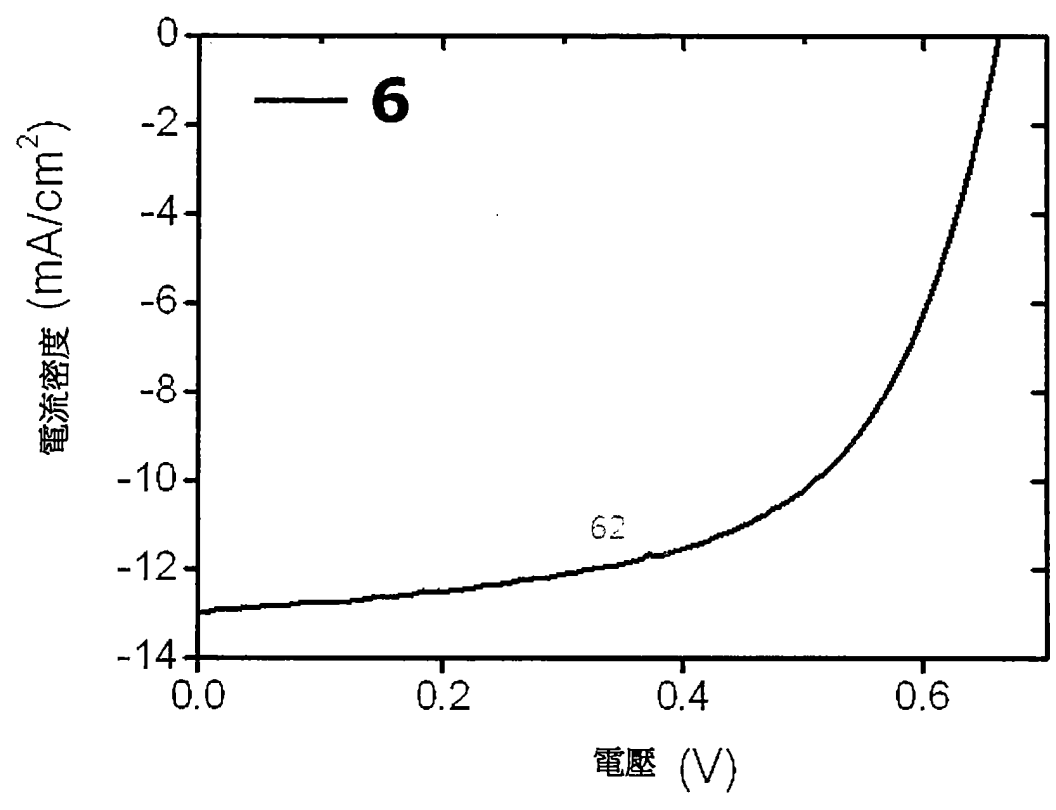


圖 36

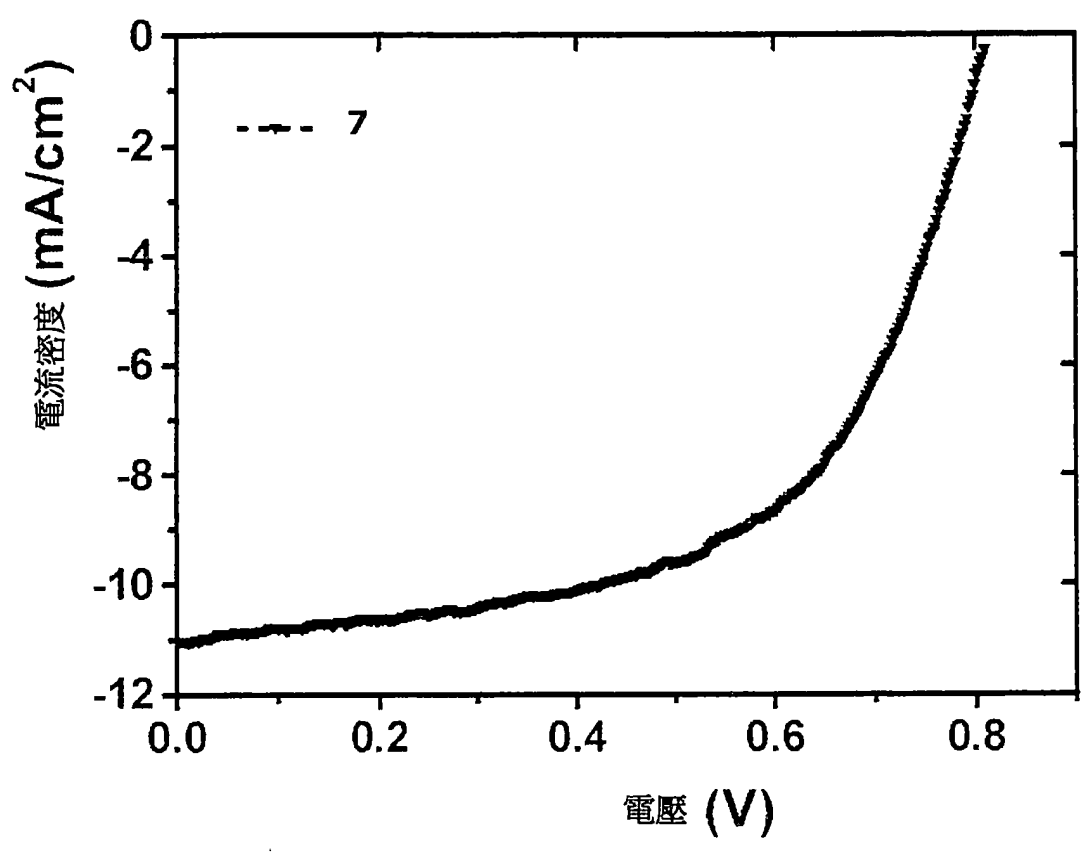


圖 37

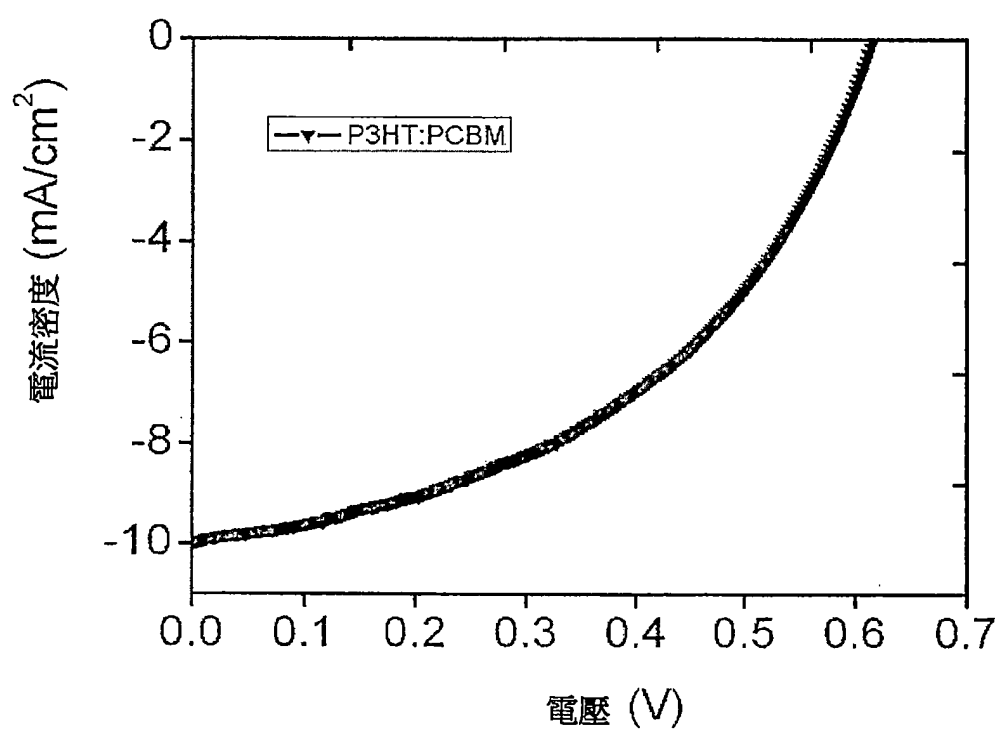
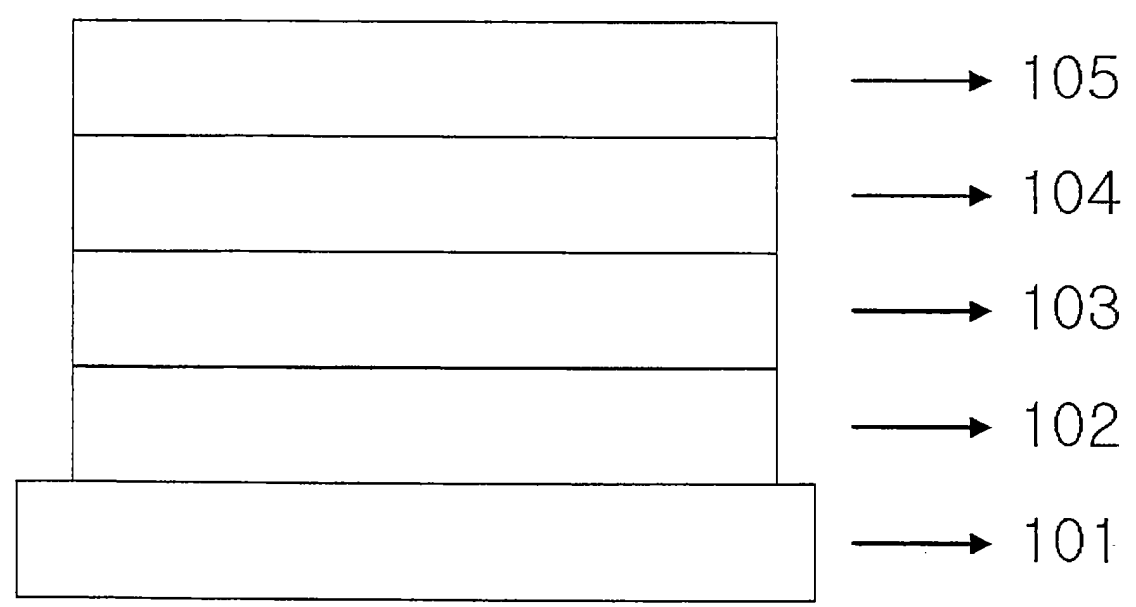


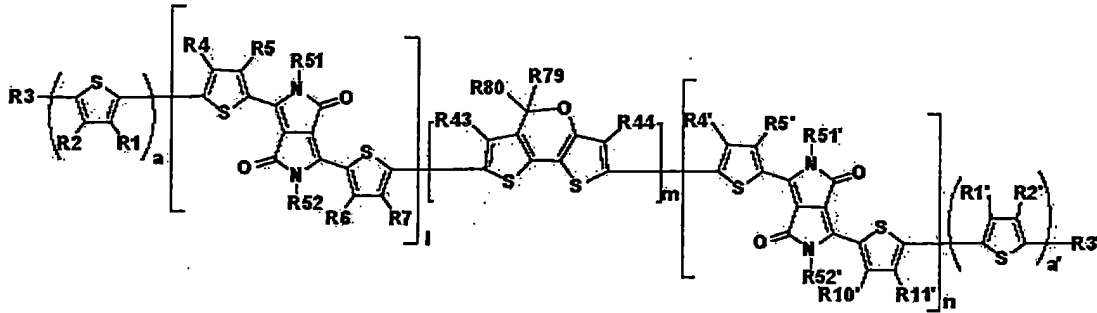
圖 38



## 申請專利範圍

1. 一種如下列化學式所示之單分子：

[化學式 11]



其中，

a 及 a' 各自獨立地為 2 至 5 的整數，且二或更多個括號中之結構係彼此相同或不同；

R1、R2、R4 至 R7、R43 至 R44、R1'、R2'、R4'、R5'、R10' 及 R11' 係各自獨立地為氫；

R3、R3'、R51、R52、R51'、R52'、R79 及 R80 係各自獨立地為經取代或未經取代之烷基；

l 為單元之重覆數目，且  $0 \leq l \leq 10$ ；

m 為單元之重覆數目，且  $0 < m \leq 10$ ；

n 為單元之重覆數目，且  $0 \leq n \leq 10$ ；

$l+n \geq 2$ ；

$2 \leq l+m+n \leq 10$ ；以及

當 l、m 及 n 係各為二或更多時，二或更多 [ ] 之結構係彼此相同或不同。

2. 如申請專利範圍第 1 項之單分子，其分子量為 100 g/mol 至 20,000 g/mol。

3. 一種有機太陽能電池，其包括：

第一電極；

設為相對於第一電極的第二電極；以及

置於第一電極和第二電極之間、且包含光活性層的一或多層有機材料層，

其中，該有機材料層之一或多層係包括如申請專利範圍第 1 或 2 項之單分子。

4.如申請專利範圍第 3 項之有機太陽能電池，其中，該有機材料層係包括電洞傳輸層、電洞注入層、或同時執行電洞傳輸及電洞注入的層，且電洞傳輸層、電洞注入層、或同時執行電洞傳輸及電洞注入的層係包含該單分子。

5.如申請專利範圍第 3 項之有機太陽能電池，其中，該有機材料層係包括電子注入層、電子傳輸層、或同時執行電子注入及電子傳輸的層，且電子注入層、電子傳輸層、或同時執行電子注入及電子傳輸的層係包含該單分子。

6.如申請專利範圍第 3 項之有機太陽能電池，其中，該光活性層係包含選自由電子供體及電子受體所組成之群組的一、二或更多者，且電子供體係包含該單分子。

7.如申請專利範圍第 6 項之有機太陽能電池，其中，該電子受體係選自由下列所組成之群組：富勒烯（fullerene）、富勒烯衍生物、奈米碳管、奈米碳管衍生物、浴銅靈（bathocuproine）、半導體元素（semiconductor element）、半導體化合物及該等之組合。

8.如申請專利範圍第 6 項之有機太陽能電池，其中，該電子供體及該電子受體形成塊材異質接面（bulk heterojunction (BHJ)）。

9.如申請專利範圍第 3 項之有機太陽能電池，其中，該光活性層係具有包含 n-型有機材料層及 p-型有機材料層之雙層結構，且該 p-型有機材料層係包含該單分子。