



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0147665
(43) 공개일자 2014년12월30일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 495/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/42 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2014-0021096
(22) 출원일자 2014년02월24일
심사청구일자 2014년02월24일
(30) 우선권주장
1020130071155 2013년06월20일 대한민국(KR)

(71) 출원인
경상대학교산학협력단
경상남도 진주시 진주대로 501 (가좌동)
(72) 발명자
김윤희
경상남도 진주시 내동로348번길 8 주공그린빌아파트 101-1103
권순기
경상남도 진주시 내동로348번길 8 주공그린빌아파트 101-1103
하종진
경상남도 진주시 진주대로500번길 12-8 위드빌 302호
(74) 대리인
권오식, 김종관, 박창희

전체 청구항 수 : 총 19 항

(54) 발명의 명칭 유기 반도체 화합물, 이의 제조방법 및 이를 채용한 유기 태양전지

(57) 요약

본 발명은 단분자로 이루어진 유기 반도체 화합물, 이의 제조방법 및 이를 채용한 유기 태양전지에 관한 것이다.
보다 구체적으로 분자 내 전자 받게 영역에 알킬 이미드를 포함하는 방향족 화합물을 도입한 단분자 유기 반도체 화합물, 이의 제조방법, 이러한 단분자 유기 반도체 화합물을 함유하는 고분자 화합물 및 고분자 화합물을 함유하는 유기 태양전지에 관한 것이다.

대표도 - 도1



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 2012T100100054

부처명 지식경제부

연구관리전문기관 한국에너지기술평가원

연구사업명 지식경제 기술혁신사업

연구과제명 400cm²의 면적에서 효율 7% 이상을 갖는 유기 태양전지 서브 모듈 및 이를 위한 소재,
장비, 생산 공정원천 기술 개발

기 여 율 1/2

주관기관 LG화학

연구기간 2012.11.01 ~ 2013.10.31이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 20113020010070

부처명 지식경제부

연구관리전문기관 서울대학교 산학협력단

연구사업명 에너지기술개발사업

연구과제명 9% 이상의 에너지 변환효율을 가지는 저분자 유기태양전지 핵심 원천기술 개발

기 여 율 1/2

주관기관 서울대학교 산학협력단

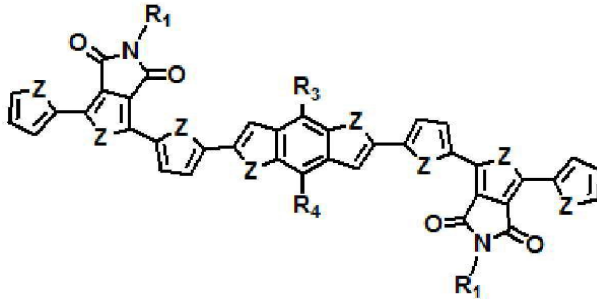
연구기간 2012.12.01 ~ 2013.11.30

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 단량체로 이루어진 유기 반도체 화합물.

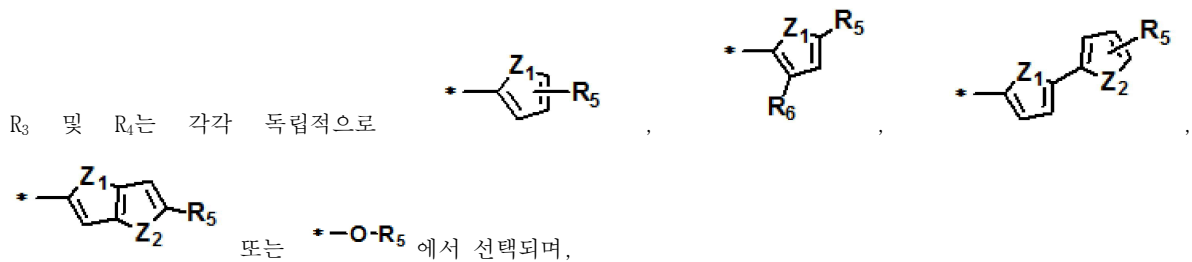
[화학식 1]



[상기 화학식 1에서,

Z는 S, O 또는 Se이고;

R₁ 은 C₁~C₃₀알킬, C₆~C₃₀아릴 또는 C₃~C₃₀헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,



Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

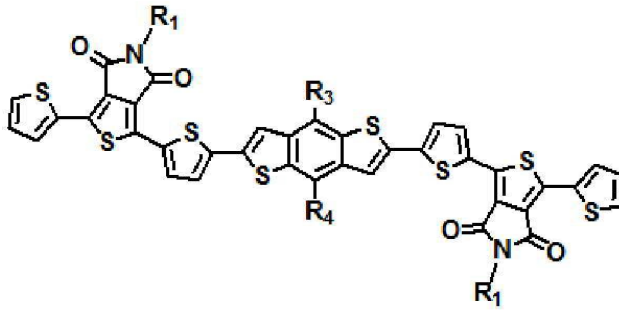
R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, C₁~C₅₀알킬, C₁~C₅₀알콕시, C₁~C₅₀알킬C₁~C₅₀알콕시카보닐, C₆~C₅₀아릴, C₃~C₃₀헤테로아릴, C₆~C₅₀아르C₁~C₅₀알킬이며, R₅ 및 R₆의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

청구항 2

제 1항에 있어서,

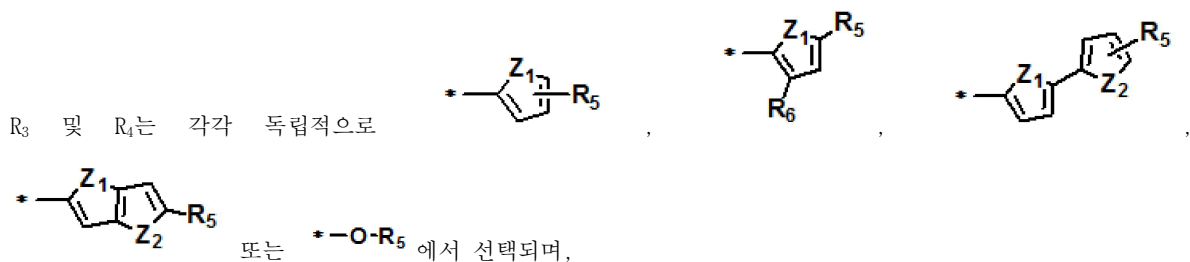
상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시되는 유기 반도체 화합물.

[화학식 2]



[상기 화학식 2에서,

R₁ 은 C₁~C₃₀알킬이고,



Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, C₁~C₅₀알킬, C₁~C₅₀알콕시, C₁~C₅₀알킬C₁~C₅₀알콕시카보닐, C₆~C₅₀아릴, C₃~C₃₀헤테로아릴, C₆~C₅₀아르C₁~C₅₀알킬이며, R₅ 및 R₆의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알킬닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

청구항 3

제 2항에 있어서,

상기 화학식 2에서,

R₁ 은 C₁~C₁₀알킬이고,

R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로 C₁~C₃₀알킬인 유기 반도체 화합물.

청구항 4

제 3항에 있어서,

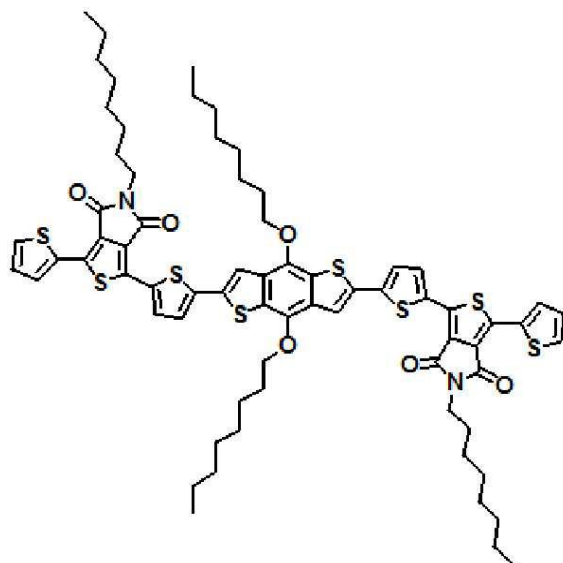
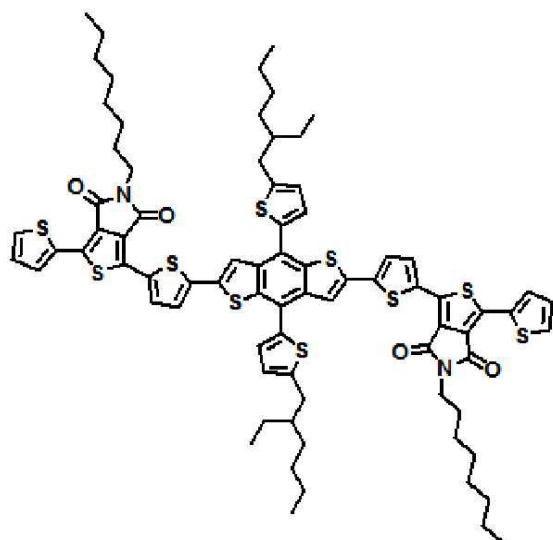
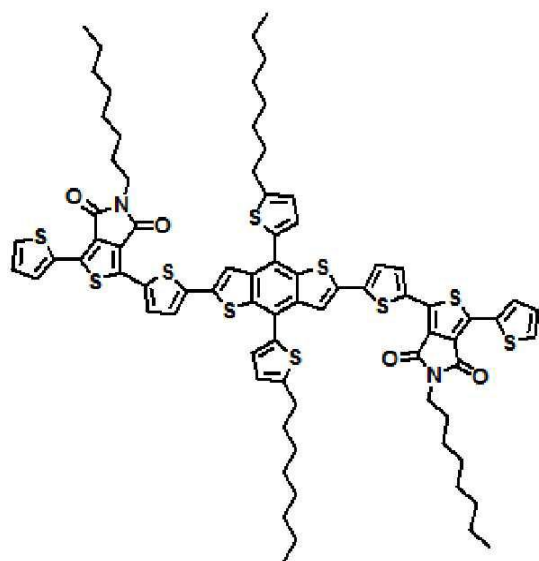
R₁ 은 C₅~C₁₀알킬이고,

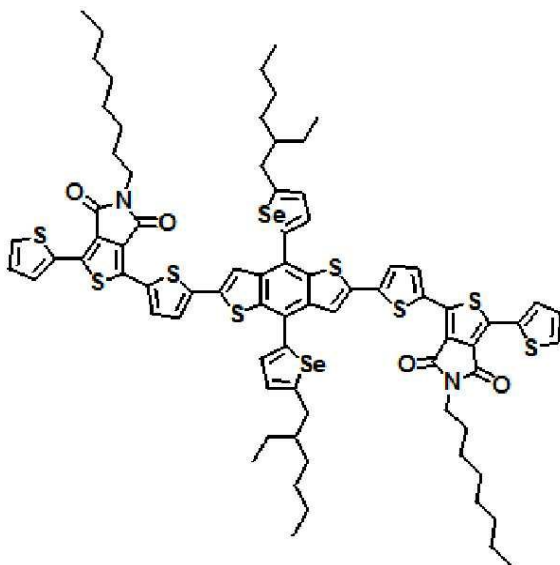
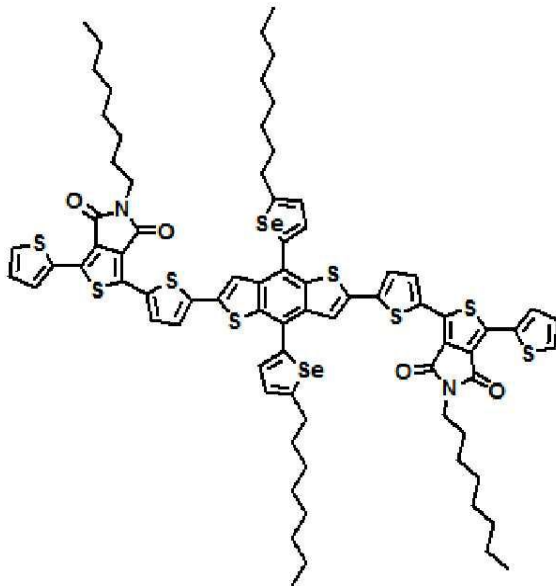
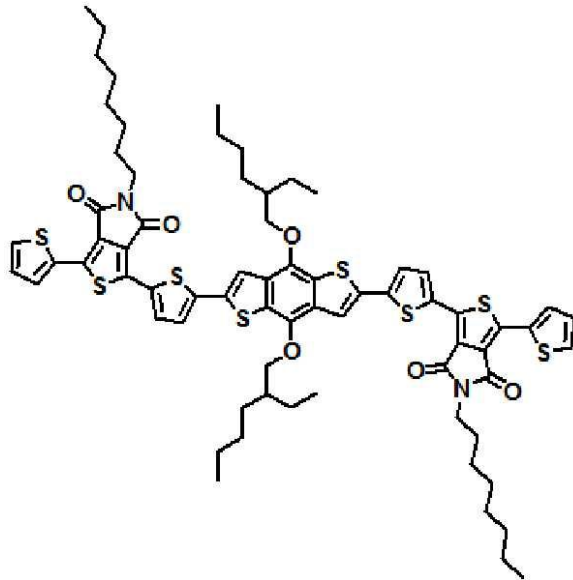
R₅₁ 및 R₆₁은 각각 독립적으로 C₅~C₁₀알킬인 유기 반도체 화합물.

청구항 5

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화합물에서 선택되는 것인 유기 반도체 화합물.





청구항 6

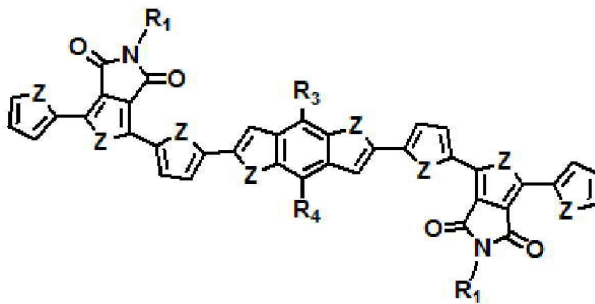
하기 화학식 16으로 표시되는 화합물과 화학식 17로 표시되는 화합물을 반응시켜 화학식 18로 표시되는 화합물을 제조하는 단계;

화학식 18로 표시되는 화합물과 n-브로모숙신이미드를 반응시켜 화학식 19로 표시되는 화합물을 제조하는 단계;

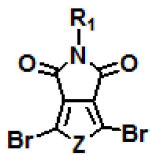
화학식 19로 표시되는 화합물과 화학식 20으로 표시되는 화합물을 반응시켜 화학식 1로 표시되는 화합물을 제조하는 단계;

를 포함하는 화학식 1로 표시되는 유기 반도체 화합물의 제조방법.

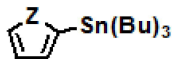
[화학식 1]



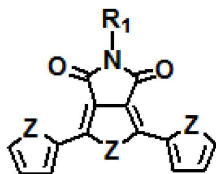
[화학식 16]



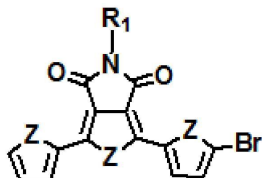
[화학식 17]



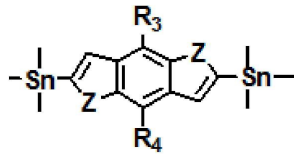
[화학식 18]



[화학식 19]



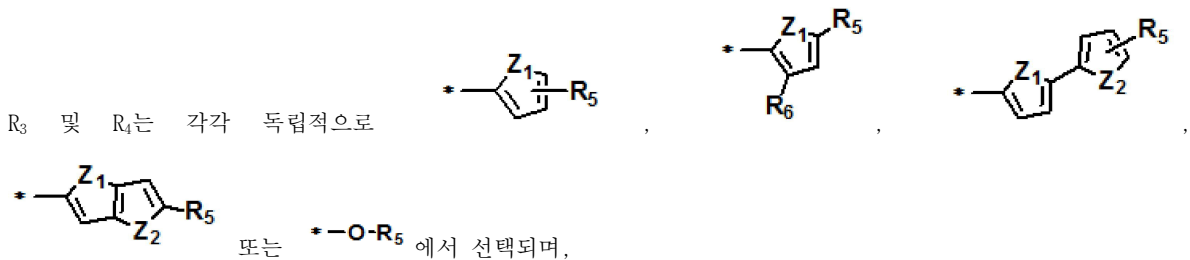
[화학식 20]



[상기 화학식 1 및 화학식 16 내지 20에서,

Z는 S, O 또는 Se이고;

R₁ 은 C₁~C₃₀알킬, C₆~C₃₀아릴 또는 C₃~C₃₀헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,



Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, C₁~C₅₀알킬, C₁~C₅₀알콕시, C₁~C₅₀알킬알콕시카보닐, C₆~C₅₀아릴, C₃~C₃₀헤테로아릴, C₆~C₅₀아르C₁~C₅₀알킬이며, R₅ 및 R₆의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

청구항 7

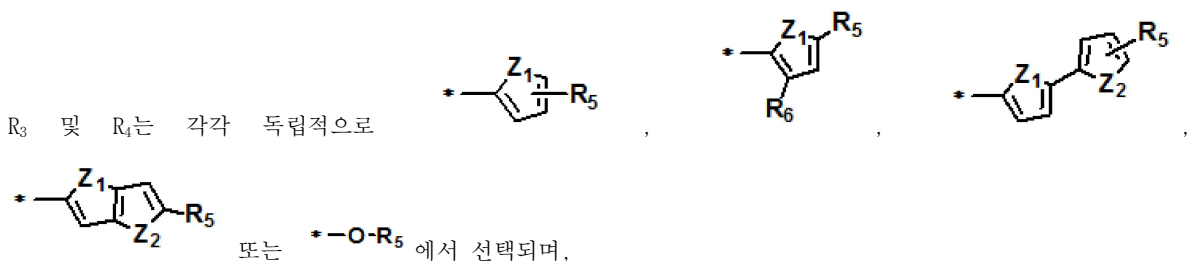
제 6항에 있어서,

상기 화학식 1은 화학식 20 화합물 1몰에 대하여, 화학식 19 화합물을 2 ~ 2.2몰을 반응시킨 것인 유기 반도체 화합물의 제조방법.

청구항 8

제 6항에 있어서,

Z는 S이며, R₁ 은 C₁~C₃₀알킬이고,



Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

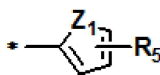
R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, C₁~C₅₀알킬, C₁~C₅₀알콕시, C₁~C₅₀알킬알콕시카보닐, C₆~C₅₀아릴, C₃~C₃₀헤테로아릴, C₆~C₅₀아르C₁~C₅₀알킬이며, R₅ 및 R₆의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬

은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환된 것인 유기 반도체 화합물의 제조방법.

청구항 9

제 8항에 있어서,

Z는 S이며, R_1 은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬이고,

R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로  또는 $*-O-R_5$ 이고,

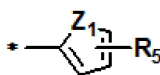
Z_1 은 S 또는 Se이며,

R_5 는 $C_1\sim C_{50}$ 알킬인 유기 반도체 화합물의 제조방법.

청구항 10

제 9항에 있어서,

Z는 S이며, R_1 은 $C_5\sim C_{10}$ 알킬이고,

R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로  또는 $*-O-R_5$ 이고,

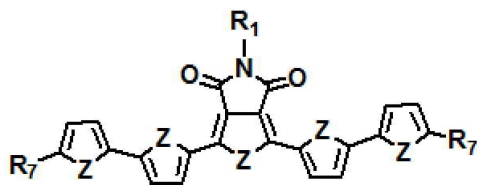
Z_1 은 S 또는 Se이며,

R_5 는 $C_5\sim C_{10}$ 알킬인 유기 반도체 화합물의 제조방법.

청구항 11

하기 화학식 21로 표시되는 단량체로 이루어진 유기 반도체 화합물.

[화학식 21]



[상기 화학식 21에서,

Z는 S, O 또는 Se이고;

R_1 은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_6\sim C_{30}$ 아릴 또는 $C_3\sim C_{30}$ 헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

R_7 은 수소, 할로젠, $C_1\sim C_{50}$ 알킬, $C_1\sim C_{50}$ 알콕시, $C_1\sim C_{50}$ 알킬 $C_1\sim C_{50}$ 알콕시카보닐, $C_6\sim C_{50}$ 아릴, $C_3\sim C_{30}$ 헤테로아릴, $C_6\sim C_{50}$ 아르 $C_1\sim C_{50}$ 알킬이며, R_5 및 R_6 의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

청구항 12

제 11항에 있어서,

Z는 S이고, R₁ 은 C₁~C₃₀알킬이고, R₇ 은 C₁~C₅₀알킬인 유기 반도체 화합물.

청구항 13

제 12항에 있어서,

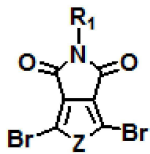
Z는 S이고, R₁ 은 C₅~C₁₀알킬이고, R₇ 은 C₅~C₁₀알킬인 유기 반도체 화합물.

청구항 14

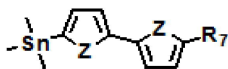
하기 화학식 16의 화합물과 화학식 22의 화합물을 반응시켜 화학식 21의 화합물을 제조하는 단계;

를 포함하는 화학식 21로 표시되는 유기 반도체 화합물의 제조방법.

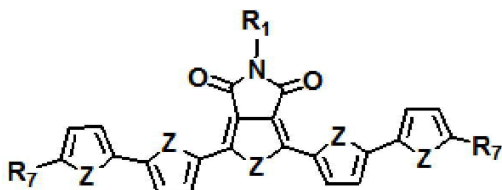
[화학식 16]



[화학식 22]



[화학식 21]



[상기 화학식 16, 21 및 22에서,

Z는 S, O 또는 Se이고;

R₁ 은 C₁~C₃₀알킬, C₆~C₃₀아릴 또는 C₃~C₃₀헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

R₇ 은 수소, 할로젠, C₁~C₅₀알킬, C₁~C₅₀알콕시, C₁~C₅₀알킬C₁~C₅₀알콕시카보닐, C₆~C₅₀아릴, C₃~C₃₀헤테로아릴, C₆~C₅₀아르C₁~C₅₀알킬이며, R₅ 및 R₆의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

청구항 15

제 14항에 있어서,

Z는 S이고, R₁ 은 C₁~C₃₀알킬이고, R₇ 은 C₁~C₅₀알킬인 유기 반도체 화합물의 제조방법.

청구항 16

제 14항에 있어서,

Z는 S이고, R₁ 은 C₅~C₁₀알킬이고, R₇ 은 C₅~C₁₀알킬인 유기 반도체 화합물의 제조방법.

청구항 17

제 14항에 있어서,

상기 화학식 21은 화학식 16 화합물 1몰에 대하여, 화학식 22 화합물을 2 ~ 2.2몰을 반응시킨 것인 유기 반도체 화합물의 제조방법.

청구항 18

제 1항 내지 제 17항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 유기 반도체 화합물을 함유하는 유기 태양전지.

청구항 19

제 18항에 있어서,

상기 유기 태양전지는 구조가 기판, 투명전극, 정공수송층, 활성층, 전자수송층, 금속전극이 순차적으로 적층된 구조인 유기 태양전지.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 단분자로 이루어진 유기 반도체 화합물, 이의 제조방법 및 이를 채용한 유기 태양전지에 관한 것이다.

[0002] 보다 구체적으로 분자 내 전자 받게 영역에 알킬 이미드를 포함하는 방향족 화합물을 도입한 단분자 유기 반도체 화합물, 이의 제조방법, 이러한 단분자 유기 반도체 화합물을 함유하는 고분자 화합물 및 고분자 화합물을 함유하는 유기 태양전지에 관한 것이다.

배경기술

[0003] 최근 환경문제와 화석 에너지 자원의 고갈에 따라 대체 에너지 개발의 중요성이 대두되고 있다. 그 중에 가장 각광받는 분야가 바로 태양전지 분야이며 거의 무한대에 가까운 에너지 자원이면서도 친환경적이고 높은 효율을 가지는 것으로 알려져 있다.

[0004] 태양전지 분야는 오래 전부터 무기물을 기반으로 한 태양전지의 개발이 이루어져 오고 있으며 최근에 들어서는 상용화를 위해 높은 가격경쟁력을 가지는 태양전지의 개발이 이슈가 되고 있다. 이러한 추세로 인해 기존의 벌크(bulk)한 태양전지보다 보다 얇은 박막형 태양전지 위주로 개발이 진행되고 있다. 발전(Plant)용 태양전지의 개발은 대부분 무기물 타입의 태양전지가 주를 이루고 있으며 저가형 휴대기기의 발전용으로 유기 태양전지가 개발되고 있다.

[0005] 반면 유기태양전지는 가볍고 플라스틱 기판위에 소자 구현이 가능하기 때문에 두루마리식 혹은 입고 다니는 태양전지로 응용될 가능성이 높다. 이미 단일 셀 효율로는 8%가 넘는 유기태양전지가 보고되고 있으며 7~9% 사이의 높은 유기태양전지가 보고되고 있다.

[0006] 최초 유기태양전지 개발은 단분자 재료인 CuPc와 Perylene을 이용한 이중접합구조로부터 시작되었으며 당시 1%의 효율을 보고하였다. 그러나 2000년대 유기물 태양전지에 관한 연구가 단분자에서 고분자로 전환되면서 급격하게 효율이 향상되었다. 현재까지 개발된 대표적인 고분자계 유기태양전지 재료로는 P3HT[폴리(3-헥실티오펜)]과 MEH-PPV[폴리(2-메톡시-5-(2-에틸-헥소일)-1,4-페닐렌-바이닐렌)], PCPDTBT[폴리(2,6-(4,4-비스-(2-에틸헥실)-4H-싸이클로펜타 [2,1-b;3,4-b]-다이싸이오펜)-에틸-4,7-(2,1,3-벤조싸이아다리아졸)] 등이 있다. 기존에는 MEH-PPV 및 P3HT를 이용하여 n 타입 재료인 PCBM(페닐-C61-부틸릭에시드메틸이서)와 혼합하여 활성층을 만들었다.

[0007] 또한 P3HT의 경우 높은 결정성을 가지므로 형태학적 개선을 위해 어닐링을 실시하여 5%가 넘는 효율을 보고하였

다. 그러나 P3HT와 같은 한 가지 반복단위로 중합된 고분자 재료들은 장파장을 흡수하는데 한계가 있으며 더 높은 효율을 구현하기 위해서는 장파장을 흡수하는 신규 재료 개발이 필요하게 되었다. 빛의 장파장 영역을 흡수하는 여러 가지 방법이 연구되었고 그 중 분자 내 전자 주계와 전자 받계를 교대 중합하여 만든 고분자 재료가 에너지 밴드갭을 변환시킴으로써 장파장을 흡수할 수 있다는 것이 보고되면서 중점적으로 연구되기 시작하였다.

[0008] 이러한 일례로 한국등록특허 제 1042530호에 알콕시기를 결사슬로 가지는 방향족 재료를 분자 내 전자주계로 사용한 유기태양전지를 개시하고 있다.

[0009] 그러나 여전히 유기 태양전지의 활성층으로 장파장의 빛을 흡수해 높은 효율을 구현할 수 있는 재료의 개발이 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0010] (특허문헌 0001) 한국등록특허 제 1042530호(등록일자 2011년 06월 13일)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0011] 본 발명은 높은 용해도를 가져 n타입(전자 받계) 재료, 일례로 PCBM와 혼합 시 형태학적으로 우수하면서도 장파장의 흡수를 가능하게 하는 단분자 유기 반도체 화합물을 제공한다.

[0012] 또한, 본 발명은 밴드갭 조절이 가능하며, 높은 전자밀도를 가지는 전자 받계구조를 도입하여 높은 단락전류와 개방전압을 가지면서 열적으로 안정하여 높은 충진율을 가지는 단분자 유기 반도체 화합물을 제공한다.

[0013] 또한, 활성층의 구성 중에서 p타입재료의 개발을 우선으로 하며 분자 내 전자주계와 전자받계가 교대 중합되어 있는 구조를 이용하여 에너지 밴드갭을 조절하는데 목적을 두고 있다.

[0014] 또한 본 발명은 본 발명에 유기 반도체 화합물을 제조하는 방법을 제공한다.

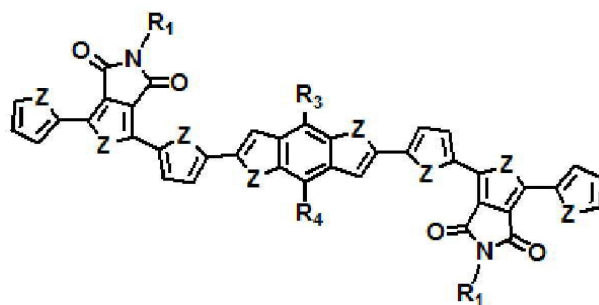
[0015] 또한, 본 발명은 본 발명에 따른 고분자 화합물을 활성층으로 가지는 유기 태양전지를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0016] 본 발명은 단분자로 이루어진 유기 반도체 화합물, 이의 제조방법, 이를 함유하는 유기 태양전지를 제공한다.

[0017] 본 발명의 유기 반도체 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0018] [화학식 1]



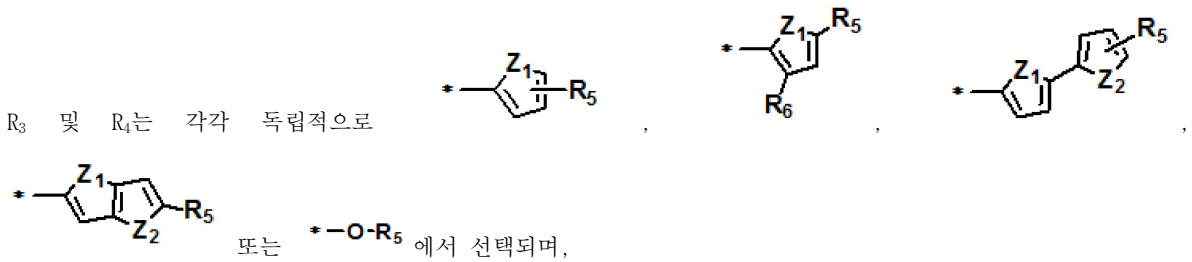
[0019]

[0020] [상기 화학식 1에서,

[0021] Z는 S, O 또는 Se이고;

[0022] R₁ 은 C₁~C₃₀알킬, C₆~C₃₀아릴 또는 C₃~C₃₀헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메

틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

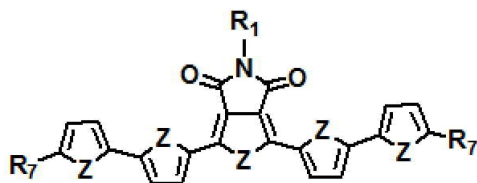


[0024] Z_1 및 Z_2 는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

[0025] R_5 및 R_6 는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, $C_1\sim C_{50}$ 알킬, $C_1\sim C_{50}$ 알콕시, $C_1\sim C_{50}$ 알킬 $C_1\sim C_{50}$ 알콕시카보닐, $C_6\sim C_{50}$ 아릴, $C_3\sim C_{30}$ 헤테로아릴, $C_6\sim C_{50}$ 아르 $C_1\sim C_{50}$ 알킬이며, R_5 및 R_6 의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

[0026] 또한, 본 발명의 유기 반도체 화합물은 하기 화학식 21로 표시된다.

[0027] [화학식 21]



[0028] [상기 화학식 21에서,

[0029] Z 는 S, O 또는 Se이고;

[0030] R_1 은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_6\sim C_{30}$ 아릴 또는 $C_3\sim C_{30}$ 헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

[0031] R_7 은 수소, 할로젠, $C_1\sim C_{50}$ 알킬, $C_1\sim C_{50}$ 알콕시, $C_1\sim C_{50}$ 알킬 $C_1\sim C_{50}$ 알콕시카보닐, $C_6\sim C_{50}$ 아릴, $C_3\sim C_{30}$ 헤테로아릴, $C_6\sim C_{50}$ 아르 $C_1\sim C_{50}$ 알킬이며, R_5 및 R_6 의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

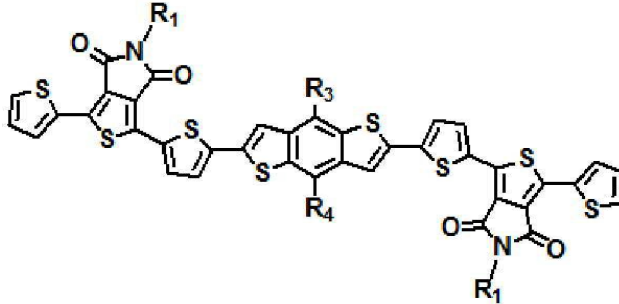
[0032] 본 발명의 유기 반도체 화합물은 높은 전자밀도를 가지는 이미드를 도입한 방향족 구조의 화합물로 전자주계와 결합 시, 화합물 backbone의 π 전자 비편재화로 인해 HOMO, LUMO 값을 조절할 수 있고, deep한 HOMO값을 가져서 높은 Voc값을 얻을 수가 있다. 이를 통해 전자밀도를 향상시키고 이미드에 치환기를 도입하여 용해도를 향상시키게 되며, 작고 딱딱한 방향족 그룹은 분자간 상호작용을 높여주어 이를 전자주계로 도입하여 전자받계와 전자주계를 결합한 단분자 화합물은 유기 태양전지의 활성층 재료로 높은 효율과 우수한 열적 안정성을 나타낸다. TPD (이하 full name : 1,3-dibromo-5-octyl-4H-thieno[3,4-c]pyrrole-4,6(5H)-dione)는 강한 전자당김체로써, 전자를 잘 끌어당길 수 있는 성질을 가지고 있다. 이로 인해서, HOMO energy level 조절이 용이하고, donor 쪽의 물질을 변화시키면서 band gap 튜닝을 쉽게 할 수 있다. 또한 구조적인 면에서는 평면 구조와 단단한 구조를 가지는 장점을 가지고 있다. 이것은 분자 주 사슬의 평면구조를 유도하여 주 사슬 간의 상호작용력을 증가시킬 수 있고, 좌우 대칭적인 구조 덕분에 형태의 변화가 일정하고 높은 재현성을 가지고 있다. 그리고 강한 전자당김체를 가지고 있기 때문에 donor와 acceptor 사이에서 intramolecular charge transfer (ICT)가 원활하게 이루어 질 수 있다. 또한 낮은 HOMO energy levels을 유도하기 때문에 OPV에서 높은 Voc값을 기대할 수 있다. TPD가 들어간 구조들은 대개 평탄한 구조이기 때문에 face-on 형태로 주변 분자들과 $\pi\text{-}\pi$ stacking을 잘 할 수

있기 때문에 좋은 결과를 기대 해 볼 수 있을 것이라 예상한다.

[0034] 구체적으로 상기 화학식 1 및 화학식 21에서 이미드의 N에 알킬치환기를 가져 유기용매에 대한 높은 용해도를 가져 모폴로지(morphology)를 향상시킬 수 있고, 높은 전자밀도를 가져 우수한 전기적 특성을 가지기위한 측면에서, 상기 R₁은 C1-C30알킬기일 수 있으며, 상기 Z는 S일 수 있다.

[0035] 본 발명에서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시되는 것일 수 있다.

[0036] [화학식 2]

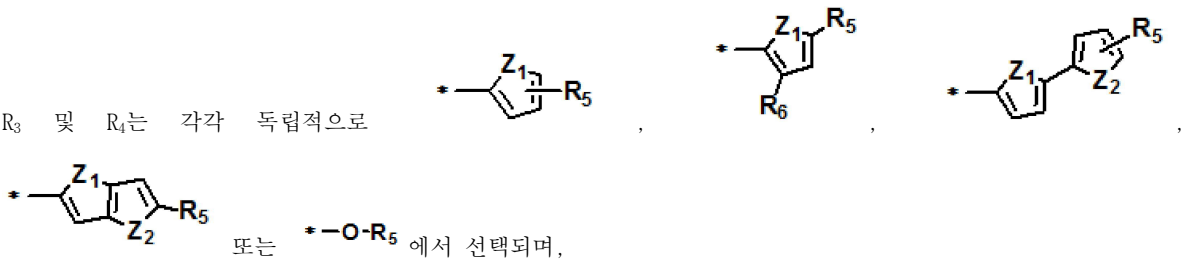


[0037]

[0038] [상기 화학식 2에서,

[0039] R₁ 은 C₁-C₃₀알킬이고,

[0040] R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로



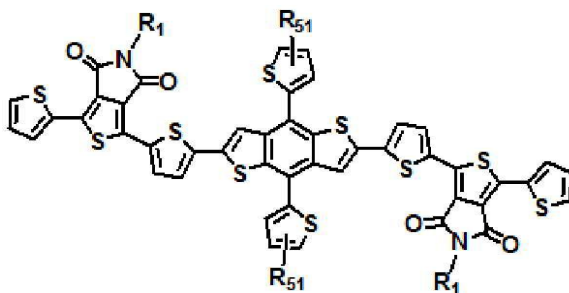
[0041] Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

[0042] R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, C₁-C₅₀알킬, C₁-C₅₀알콕시, C₁-C₅₀알킬C₁-C₅₀알콕시카보닐, C₆-C₅₀아릴, C₃-C₃₀헤테로아릴, C₆-C₅₀아르C₁-C₅₀알킬이며, R₅ 및 R₆의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 C₁-C₃₀알킬, C₂-C₃₀알케닐, C₂-C₃₀알키닐, C₁-C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

[0043] 구체적으로 상기 화학식 2에서, R₁ 은 C₁-C₁₀알킬이고, R₅ 및 R₆는 각각 독립적으로 C₁-C₃₀알킬인 것일 수 있으며, 알킬기를 치환함으로써 용해도를 조절할 수 있고 궁극적으로 공정상의 저비용 및 대면적화가 가능하다.

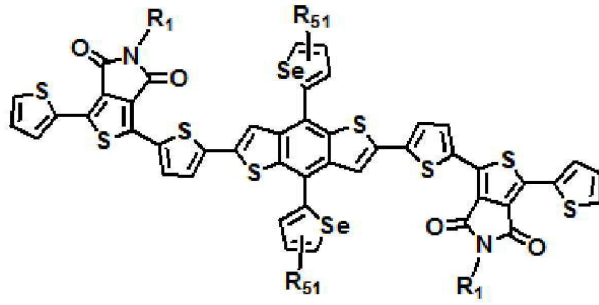
[0044] 보다 구체적으로, 상기 화학식 2는 하기 화학식 3 내지 화학식 15에서 선택되는 것일 수 있다.

[0045] [화학식 3]



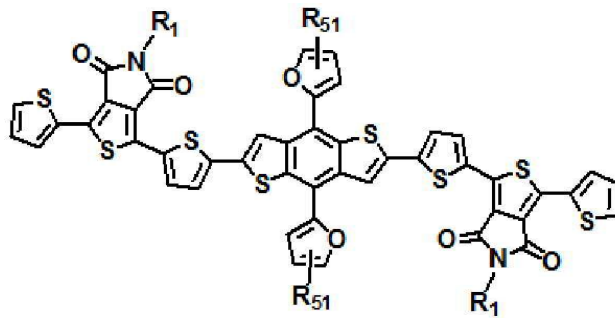
[0046]

[0047] [화학식 4]



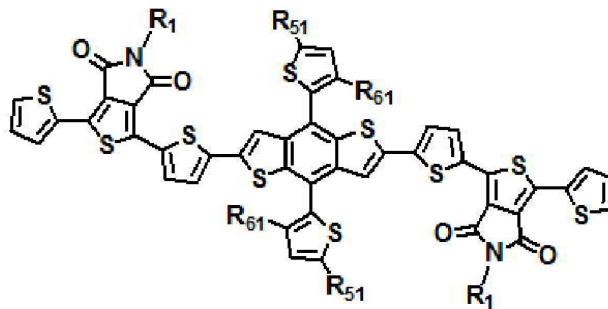
[0048]

[0049] [화학식 5]



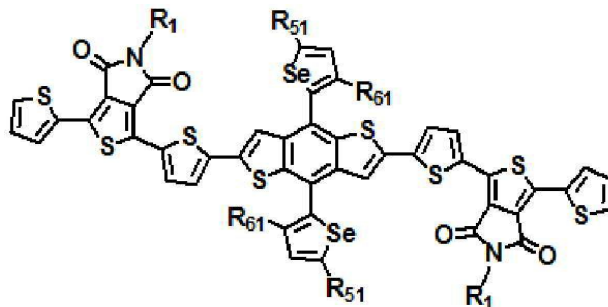
[0050]

[0051] [화학식 6]



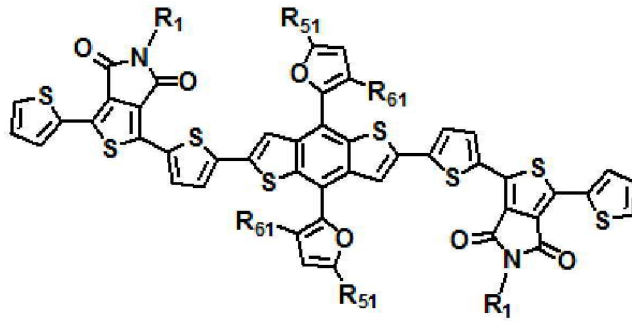
[0052]

[0053] [화학식 7]



[0054]

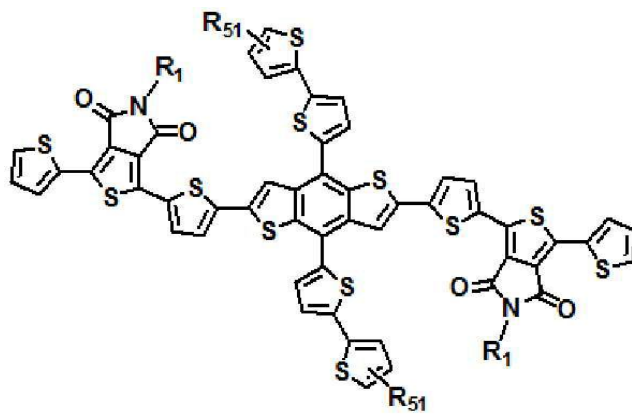
[0055] [화학식 8]



[0056]

[0057]

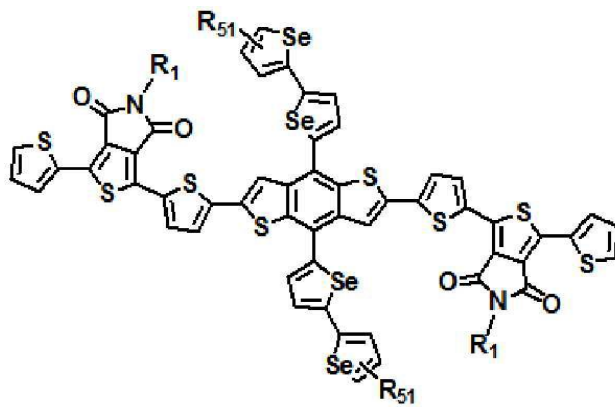
[화학식 9]



[0058]

[0059]

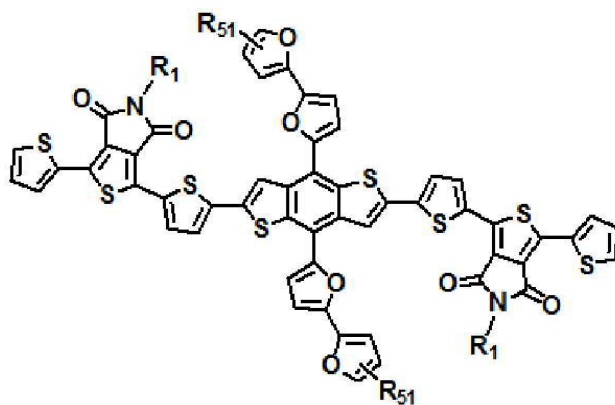
[화학식 10]



[0060]

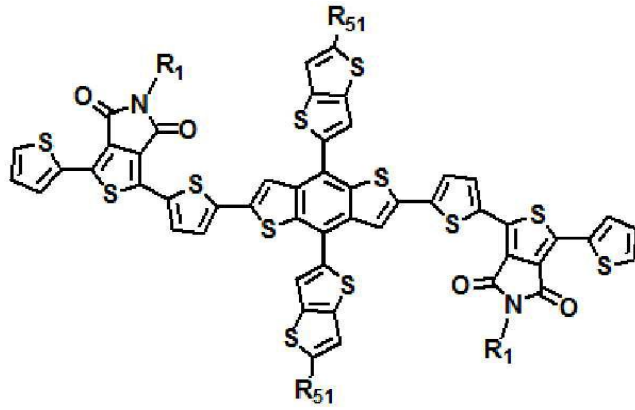
[0061]

[화학식 11]



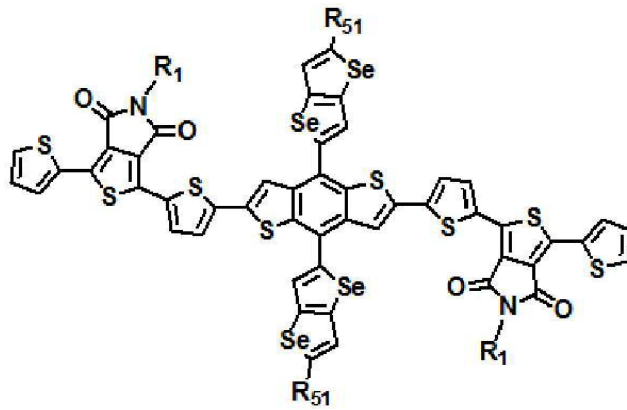
[0062]

[0063] [화학식 12]



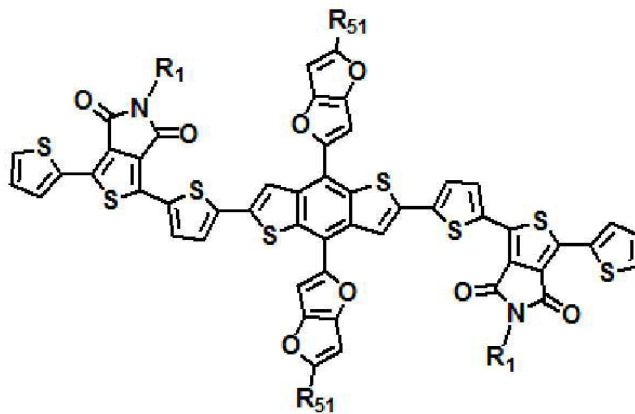
[0064]

[0065] [화학식 13]



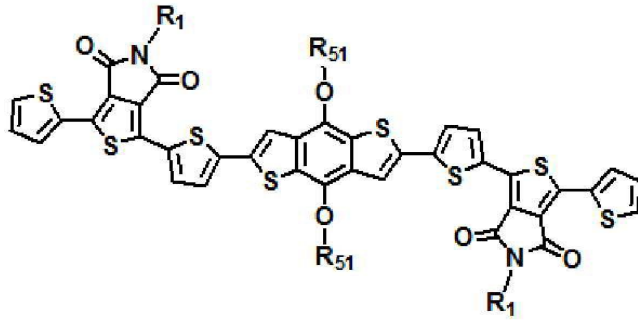
[0066]

[0067] [화학식 14]



[0068]

[0069] [화학식 15]



[0070]

[0071]

[상기 화학식 3 내지 화학식 15에서,

[0072]

R_1 은 C_1 - C_{10} 알킬이고,

[0073]

R_{51} 및 R_{61} 은 각각 독립적으로 C_1 - C_{30} 알킬이다.]

[0074]

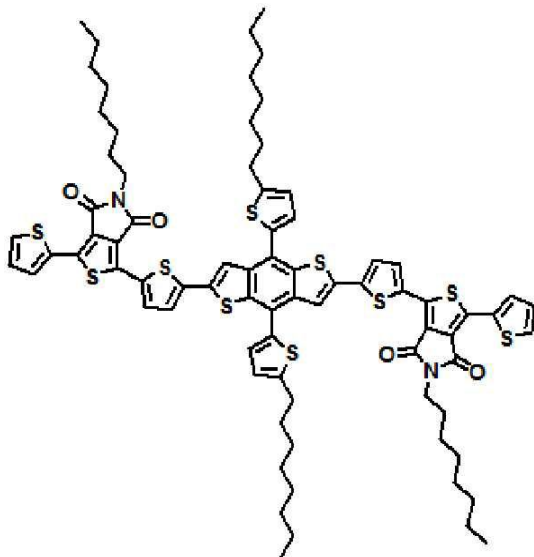
더욱 구체적으로, R_1 은 C_5 - C_{10} 알킬이고, R_{51} 및 R_{61} 은 각각 독립적으로 C_5 - C_{10} 알킬인 것일 수 있으며, 이 범위의 알킬기를 치환함으로써 용해도를 조절할 수 있고 궁극적으로 공정상의 저비용 및 대면적화가 가능하다.

[0075]

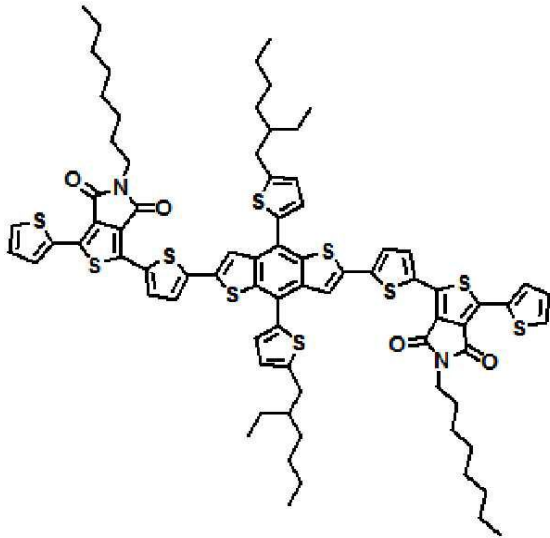
더욱 구체적으로 R_1 은 C_8H_{17} 이고, R_{51} 및 R_{61} 은 각각 독립적으로 C_8H_{17} 인 것일 수 있다.

[0076]

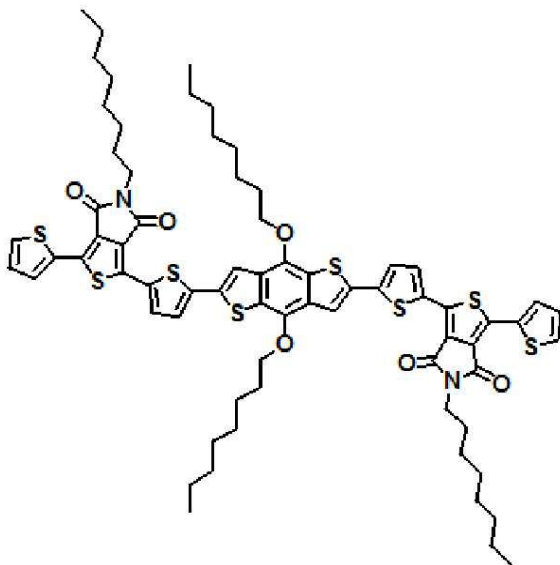
더욱 구체적으로 상기 화학식 1은 하기 화합물에서 선택되는 것일 수 있다.



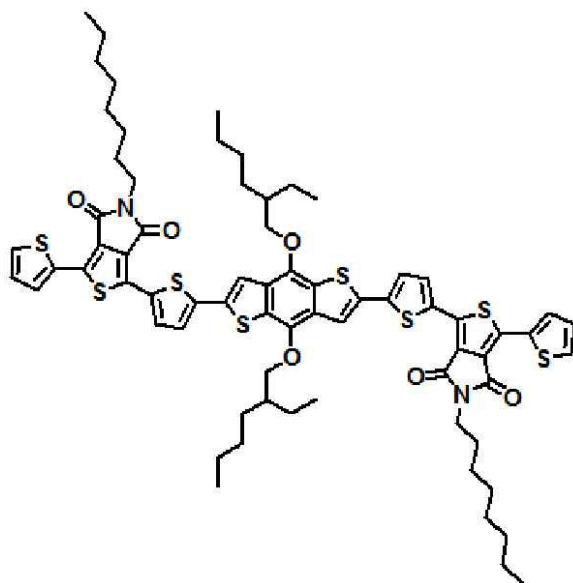
[0077]



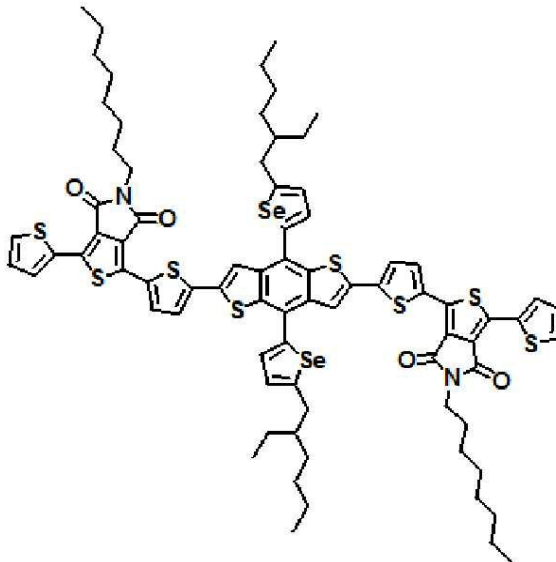
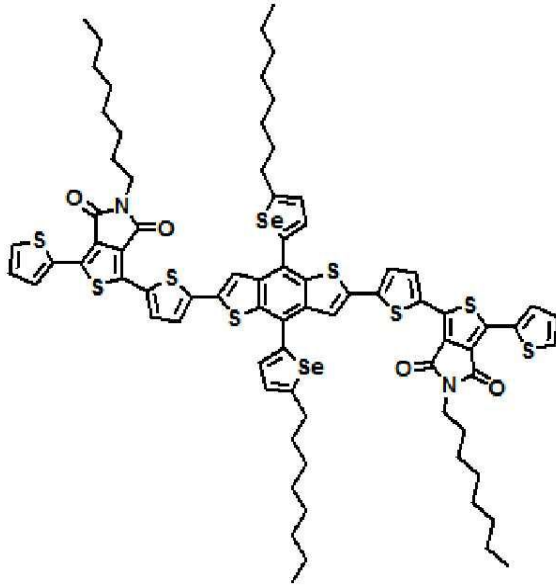
[0078]



[0079]



[0080]



또한 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 반도체 화합물의 제조방법을 제공한다.

본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 유기 반도체 화합물의 제조방법은,

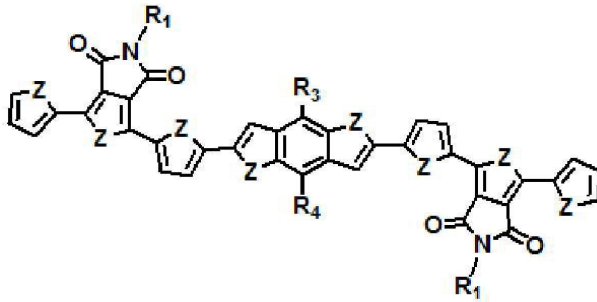
하기 화학식 16으로 표시되는 화합물과 화학식 17로 표시되는 화합물을 반응시켜 화학식 18로 표시되는 화합물을 제조하는 단계;

화학식 18로 표시되는 화합물과 n-브로모숙신이미드를 반응시켜 화학식 19로 표시되는 화합물을 제조하는 단계;

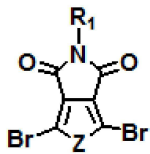
화학식 19로 표시되는 화합물과 화학식 20으로 표시되는 화합물을 반응시켜 화학식 1로 표시되는 화합물을 제조하는 단계;

를 포함한다.

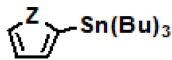
[화학식 1]



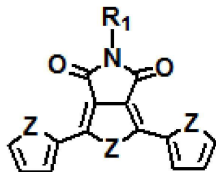
[화학식 16]



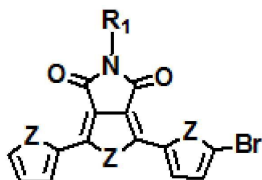
[화학식 17]



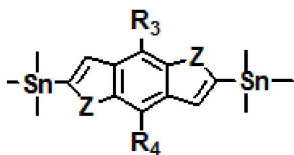
[화학식 18]



[화학식 19]



[화학식 20]



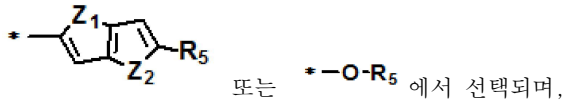
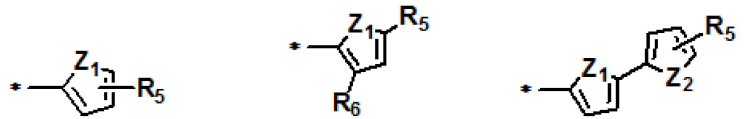
[상기 화학식 1 및 화학식 16 내지 20에서,

Z는 S, O 또는 Se이고;

R₁ 은 C₁~C₃₀알킬, C₆~C₃₀아릴 또는 C₃~C₃₀헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

[0104]

R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로



[0105]

Z_1 및 Z_2 는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

[0106]

R_5 및 R_6 는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, $C_1\sim C_{50}$ 알킬, $C_1\sim C_{50}$ 알콕시, $C_1\sim C_{50}$ 알킬 $C_1\sim C_{50}$ 알콕시카보닐, $C_6\sim C_{50}$ 아릴, $C_3\sim C_{30}$ 헤테로아릴, $C_6\sim C_{50}$ 아르 $C_1\sim C_{50}$ 알킬이며, R_5 및 R_6 의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

[0107]

본 발명에서 상기 화학식 1은 화학식 20 화합물 1몰에 대하여, 화학식 19 화합물을 2 ~ 2.05몰을 반응시킨 것일 수 있다.

[0108]

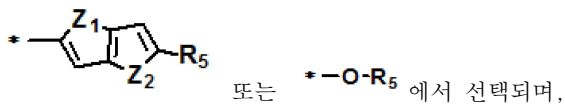
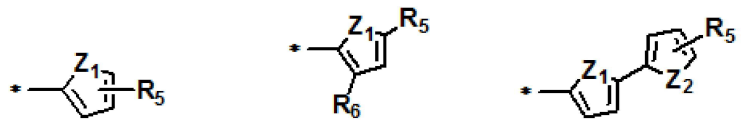
구체적으로 상기 화학식 1및 화학식 16 내지 20에서,

[0109]

Z 는 S이며, R_1 은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬이고,

[0110]

R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로



[0111]

Z_1 및 Z_2 는 각각 독립적으로 S, O 또는 Se이고,

[0112]

R_5 및 R_6 는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, $C_1\sim C_{50}$ 알킬, $C_1\sim C_{50}$ 알콕시, $C_1\sim C_{50}$ 알킬 $C_1\sim C_{50}$ 알콕시카보닐, $C_6\sim C_{50}$ 아릴, $C_3\sim C_{30}$ 헤테로아릴, $C_6\sim C_{50}$ 아르 $C_1\sim C_{50}$ 알킬이며, R_5 및 R_6 의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬, $C_2\sim C_{30}$ 알케닐, $C_2\sim C_{30}$ 알키닐, $C_1\sim C_{30}$ 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 것일 수 있다.

[0113]

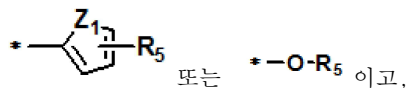
보다 구체적으로, 상기 화학식 1및 화학식 16 내지 20에서,

[0114]

Z 는 S이며, R_1 은 $C_1\sim C_{30}$ 알킬이고,

[0115]

R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로



[0116]

Z_1 은 S 또는 Se이며,

[0117]

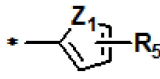
R_5 는 $C_1\sim C_{50}$ 알킬인 것일 수 있다.

[0118]

더욱 구체적으로 상기 화학식 1및 화학식 16 내지 20에서,

[0119]

Z 는 S이며, R_1 은 $C_5\sim C_{10}$ 알킬이고,

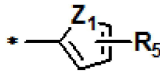
[0120] R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로  또는 $*-O-R_5$ 이고,

[0121] Z_1 은 S 또는 Se이며,

[0122] R_5 는 C_5 - C_{10} 알킬인 것일 수 있다.

[0123] 더욱 구체적으로 상기 화학식 1 및 화학식 16 내지 20에서,

[0124] Z 는 S이며, R_1 은 C_8H_{17} 이고,

[0125] R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로  또는 $*-O-R_5$ 이고,

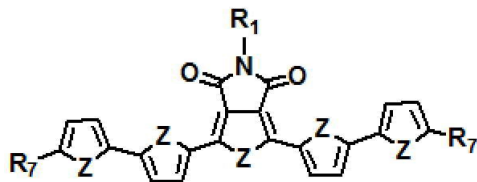
[0126] Z_1 은 S 또는 Se이며,

[0127] R_5 는 C_8H_{17} 인 것일 수 있다.

[0128] 본 발명의 유기 반도체 화합물의 제조방법에서 사용되는 용매는 통상의 유기합성에서 사용되는 용매라도 모두 가능하나, 이에 한정이 있는 것은 아니며, 반응시간과 온도 또한 발명의 핵심을 벗어나지 않는 범위 내에서 변경이 가능하다.

[0129] 또한, 본 발명은 하기 화학식 21로 이루어진 유기 반도체 화합물에 관한 것이다.

[0130] [화학식 21]



[0131]

[0132] [상기 화학식 21에서,

[0133] Z 는 S, O 또는 Se이고;

[0134] R_1 은 C_1 - C_{30} 알킬, C_6 - C_{30} 아릴 또는 C_3 - C_{30} 헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 C_1 - C_{30} 알킬, C_2 - C_{30} 알케닐, C_2 - C_{30} 알키닐, C_1 - C_{30} 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

[0135] R_7 은 수소, 할로젠, C_1 - C_{50} 알킬, C_1 - C_{50} 알콕시, C_1 - C_{50} 알킬 C_1 - C_{50} 알콕시카보닐, C_6 - C_{50} 아릴, C_3 - C_{30} 헤테로아릴, C_6 - C_{50} 아르 C_1 - C_{50} 알킬이며, R_5 및 R_6 의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 C_1 - C_{30} 알킬, C_2 - C_{30} 알케닐, C_2 - C_{30} 알키닐, C_1 - C_{30} 알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

[0136] 구체적으로 Z 는 S이고, R_1 은 C_1 - C_{30} 알킬이고, R_7 은 C_1 - C_{50} 알킬인 것일 수 있다.

[0137] 보다 구체적으로 Z 는 S이고, R_1 은 C_5 - C_{10} 알킬이고, R_7 은 C_5 - C_{10} 알킬인 것일 수 있다.

[0138] 보다 구체적으로 Z 는 S이고, R_1 은 C_8H_{17} 이고, R_7 은 C_6H_{13} 인 것일 수 있다.

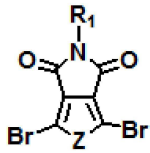
[0139] 또한 본 발명은 상기 화학식 21로 표시되는 유기 반도체 화합물의 제조방법을 제공한다.

[0140] 본 발명의 상기 화학식 21로 표시되는 유기 반도체 화합물의 제조방법은,

[0141] 하기 화학식 16의 화합물과 화학식 22의 화합물을 반응시켜 화학식 21의 화합물을 제조하는 단계;

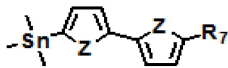
[0142] 를 포함한다.

[0143] [화학식 16]



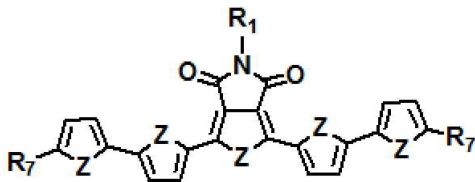
[0144]

[0145] [화학식 22]



[0146]

[0147] [화학식 21]



[0148]

[0149] [상기 화학식 16, 21 및 22에서,

[0150] Z는 S, O 또는 Se이고;

[0151] R₁ 은 C₁~C₃₀알킬, C₆~C₃₀아릴 또는 C₃~C₃₀헤테로아릴이며, 상기 알킬, 아릴 및 헤테로아릴은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

[0152] R₇ 은 수소, 할로젠, C₁~C₅₀알킬, C₁~C₅₀알콕시, C₁~C₅₀알킬C₁~C₅₀알콕시카보닐, C₆~C₅₀아릴, C₃~C₃₀헤테로아릴, C₆~C₅₀아르C₁~C₅₀알킬이며, R₅ 및 R₆의 알킬, 알콕시, 알킬알콕시카보닐, 아릴, 헤테로아릴, 아르알킬은 C₁~C₃₀알킬, C₂~C₃₀알케닐, C₂~C₃₀알키닐, C₁~C₃₀알콕시, 아미노기, 하이드록시기, 할로젠기, 사이아노기, 나이트로기, 트리플루오로메틸기 및 실릴기로 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.]

[0153] 구체적으로 Z는 S이고, R₁ 은 C₁-C₃₀알킬이고, R₇ 은 C₁-C₅₀알킬인 것일 수 있다.

[0154] 보다 구체적으로 Z는 S이고, R₁ 은 C₅~C₁₀알킬이고, R₇ 은 C₅~C₁₀알킬인 것일 수 있다.

[0155] 보다 구체적으로 Z는 S이고, R₁ 은 C₈H₁₇이고, R₇ 은 C₆H₁₃인 것일 수 있다.

[0156] 본 발명에서 상기 화학식 21은 화학식 16 화합물 1몰에 대하여, 화학식 22 화합물을 2.2 ~ 2.5몰을 반응시킨 것일 수 있다.

[0157] 본 발명의 유기 반도체 화합물의 제조방법에서 사용되는 용매는 통상의 유기합성에서 사용되는 용매라도 모두 가능하나, 이에 한정이 있는 것은 아니며, 반응시간과 온도 또한 발명의 핵심을 벗어나지 않는 범위 내에서 변경이 가능하다.

[0158] 또한 본 발명은 본 발명의 고분자 화합물을 함유하는 유기태양전지를 제공한다.

[0159] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기태양전지는 기관, 투명전극, 정공수송층, 활성층, 전자수송층, 금속전극이 순차적으로 적층된 것일 수 있으며, 본 발명에 따른 상기 화학식 11의 고분자 화합물을 활성층의 p타입으로 사용되는 유기 태양전지를 제공한다.

[0160] 일반적으로 본 발명에 따른 유기 태양전지는 이하 상술하는 방법으로 제조될 수 있으나 이는 일례를 들어 설명

하는 것으로 이에 한정이 있는 것은 아니다.

- [0161] 태양전지는 일반적으로 도 1과 같이 유리기관/투명전극(ITO)/정공수송층/활성층(전자주게/전자받게)/전자수송층/금속전극(A1)으로 이루어진다. 구동원리는 빛이 유기기관과 ITO, 정공수송층을 통과하여 활성층에 도달하게 되면 p타입(전자주게) 고분자와 n타입(전자받게) 사이에서 여기자(Exciton)가 발생하게 되고 n타입의 물질을 따라 전자가 뿔(호핑)을 통해 금속전극으로 이동하게 되고 남은 정공은 정공수송층을 통해 ITO층으로 이동하게 된다. 이렇게 분리된 전자와 정공은 전류와 전압을 발생시키게 되고 전력을 생성시키게 된다. 정공수송층은 PEDOT:PSS[폴리(3,4-에틸렌다이옥시티오펜)]:[폴리(스티렌설포네이트)]로 이루어져 있으며 전자가 양극인 ITO층으로 이동하는 것을 막아주면서 정공의 수송을 원활하게 도와준다.
- [0162] 또한 본 발명의 활성층은 보다 바람직하게 p타입과 n타입의 계면을 넓게 하는 피상이종접합(bulk-heterojunction)으로 이루어져 있는 것이 좋으며 이를 통해 생성되는 여기자가 쉽게 전자와 정공으로 분리될 수 있다는 장점을 가지게 된다.
- [0163] 보다 상세하게 설명하면, 투명전극인 ITO가 코팅된 유리기관위에 PEDOT-PSS(Baytron P TP A1 4083, Bayer AG)를 스핀코팅하여 30 ~ 50nm 두께로 층을 코팅한다. 그 후 120 °C에서 60분간 어닐링을 하여 용매를 제거한다. 활성층은 본 발명에 따른 고분자 화합물과 PCBM 유도체 및 첨가제(DIO; 다이아이오도옥탄, ODT; 옥타다이싸이올)를 60 °C에서 12시간동안 교반시킨 후에 0.45 μm 크기의 필터로 물질을 필터한 후에 PEDOT-PSS 층위에 스핀코팅을 이용하여 100 nm 두께로 코팅한다. 그 후에 고진공 (10^{-6} torr)에서 10 nm 두께로 TiO_2 (인듐 틴 옥사이드)를 코팅하고 금속 전극으로 알루미늄(A1)을 100 nm 두께로 증착한다. 증착 후 필요에 따라 글러브 박스 안에서 120-150 °C의 온도로 30분간 어닐링을 실시하여 형태학적 최적화를 실시한다.
- [0164] 상기 기관은 유리기관 이외에도 플라스틱 기관으로 PET[폴리(에틸렌테레프탈레이트)], PES[폴리(이서술폰)] 등의 소재를 사용할 수 있다.
- [0165] 본 발명에 따른 유기반도체 화합물을 사용하는 활성층은 스크린 인쇄법, 프린팅법, 스핀캐스팅법, 스핀코팅법, 딥핑법 또는 잉크분사법을 통하여 박막으로 형성될 수 있다.
- [0166] 상기 금속 전극은 전도성 물질이면 가능하나, 금(Au), 은(Ag), 알루미늄(A1), 니켈(Ni), 크롬(Cr) 및 인듐틴산화물(ITO)로 이루어진 군으로부터 선택된 물질로 형성되는 것이 바람직하다.
- [0167] 또한 투명전극은 제한이 있는 것은 아니나, ITO(인듐틴옥사이드), ZnO (아연옥사이드), MnO (망간옥사이드)등이 사용될 수 있다.

발명의 효과

- [0168] 본 발명에 따른 유기 반도체 화합물은 단분자 화합물로서, 생산 수율이 높고, 합성 후 정제가 용이하며, 순도가 높아서 고순도막의 제조가 가능하다. 또한, 고분자 화합물에 비하여, 본 발명의 단분자 화합물은 온도, 습도, 시간, 재료의 상태에 따른 물성의 변화가 적어 고분자 화합물에 비하여 재현성이 우수한 특징이 있다. 또한, 본 발명의 단분자 화합물은 종래 고분자 화합물의 PCE값과 비교하였을 때, 동등 이상의 우수한 효과가 있다.
- [0169] 또한, 전자 주게 화합물이 이미드에 치환된 치환기를 가짐으로써 높은 용해도를 가질 뿐만 아니라 Benzodithiophene (BDT)는 현재 많은 연구가 진행되고 있는 물질 중 하나이다. BDT의 여러 장점 중 하나가 바로 hole mobility가 높다는 점이다. 입체장애가 적고, Planar한 구조를 가지고 있어서 고분자에서 주 사슬의 뒤틀림이 적기 때문에 사슬간의 상호작용이 원활하여 carrier 능력이 아주 좋기 때문이다. 이러한 이유로 TFT 뿐만 아니라 OPV에서도 주목 받고 있고, 다양하게 사용 되고 있다. 가지는 높은 전자밀도로 인해 유기 태양전지에 적용하면 단락전류(J_{sc})값을 향상시킬 수 있다.
- [0170] 또한 본 발명은 본 발명에 따른 유기 반도체 화합물은 유기 태양전지의 활성층의 p타입재료로 사용되며 에너지 밴드갭을 조절하여 높은 개방 전압을 가질 수 있어 이를 채용한 유기 태양전지는 높은 효율을 가질 수 있다.
- [0171] 또한 본 발명은 전자 주게 화합물인 유기 반도체 화합물의 이미드에 치환되는 치환기의 구조에 따라 이를 채용한 유기 태양전지의 산화 안정성, 개방 전압값 및 전류 밀도를 향상시킬 수 있다.
- [0172] 또한 본 발명에 따른 유기 반도체 화합물은 용매에 대한 용해도가 높아 스핀코팅이나 프린팅 같은 용액 공정으로도 제조할 수 있어 비용을 절감할 수 있을 뿐만 아니라 대면적화가 가능한 장점을 가진다.
- [0173] 대면적화를 가지게 되면 공정경쟁력을 가지게 된다. 그러나 대면적 구현시 저항문제가 해결되지 않아 아직 많은

연구가 필요한 실정이다.

[0174] 유기태양전지가 상용화 된다면 많은 곳에 응용이 가능할 것으로 보인다. 휴대기기나 OLED TV의 전원, E-paper의 전원 등으로 사용될 수 있으며 높은 부가가치를 지니는 미래형 산업이 될 것이다.

도면의 간단한 설명

[0175] 도 1은 유리기판/투명전극(ITO)/정공수송층(PEDOT:PSS)/활성층(p/n)/전자수송층(TiO₂)/금속전극(Al)으로 제조되는 일반적인 유기태양전지 구조를 보여주는 단면도이다.

도 2는 실시예 1에 따른 TGA를 통해 분자의 분절운동을 관측한 도면이다.

도 3은 실시예 2에 따른 TGA를 통해 분자의 분절운동을 관측한 도면이다.

도 4는 실시예 3에 따른 TGA를 통해 분자의 분절운동을 관측한 도면이다.

도 5는 실시예 4에 따른 TGA를 통해 분자의 분절운동을 관측한 도면이다.

도 6은 실시예 5에 따른 TGA를 통해 분자의 분절운동을 관측한 도면이다.

도 7은 실시예 1에 따른 유기반도체 화합물의 용액상 및 필름상의 UV-vis 흡수 스펙트라이다.

도 8은 실시예 2에 따른 유기반도체 화합물의 용액상 및 필름상의 UV-vis 흡수 스펙트라이다.

도 9는 실시예 3에 따른 유기반도체 화합물의 용액상 및 필름상의 UV-vis 흡수 스펙트라이다.

도 10은 실시예 4에 따른 유기반도체 화합물의 용액상 및 필름상의 UV-vis 흡수 스펙트라이다.

도 11은 실시예 5에 따른 유기반도체 화합물의 용액상 및 필름상의 UV-vis 흡수 스펙트라이다.

도 12는 실시예 1에 따른 화합물의 전기적 특성(cyclic voltammetry) 도면이다.

도 13은 실시예 2에 따른 화합물의 전기적 특성(cyclic voltammetry) 도면이다.

도 14는 실시예 3에 따른 화합물의 전기적 특성(cyclic voltammetry) 도면이다.

도 15는 실시예 4에 따른 화합물의 전기적 특성(cyclic voltammetry) 도면이다.

도 16는 실시예 5에 따른 화합물의 전기적 특성(cyclic voltammetry) 도면이다.

도 17~18은 실시예 1~5 를 유기태양전지소자로 제작하여 측정한 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0176] 본 발명은 하기의 실시예에 의하여 보다 명확히 이해될 수 있으며, 하기의 실시예는 본 발명의 예시 목적에 불과하며 발명의 영역을 제한하고자 하는 것은 아니다.

[0177] 또한 본 발명에서 언급되는 용어 중 특별히 정의하지 않는다면 당업자들 사이에서 통상적으로 사용되는 의미로 이해되는 것을 의미한다.

[0178] I_D(Drain current): Drain에 흐르는 전류

[0179] V_G(Gate voltage): Gate에 인가되는 Voltage

[0180] IPCE(Incident-Photon-to-electron Conversion Efficiency): 양자효율

[0181] Mn(Number of molecular weight): 수평균 분자량

[0182] PDI(Poly dispersity index): 다분산지수

[0183] HOMO(highest occupied molecular orbital): 최고점유 분자궤도

[0184] LUMO(lowest unoccupied molecular orbital): 최저비점유 분자궤도

[0185] Band gap: HOMO와 LUMO 사이의 공간

[0186] Voc: 특정한 온도와 일조 강도에서 부하를 연결하지 않은(개방 상태의)태양광발전장치 양단에 걸리는 전압.

[0187] J_{sc} : 특정한 온도와 일조 강도에서 단락 조건에 있는 태양전지나 모듈 등 태양광발전장치의 출력 전류. 단위 면적당 단락 전류를 특별히 J_{sc} 라고 하는 경우도 있다.

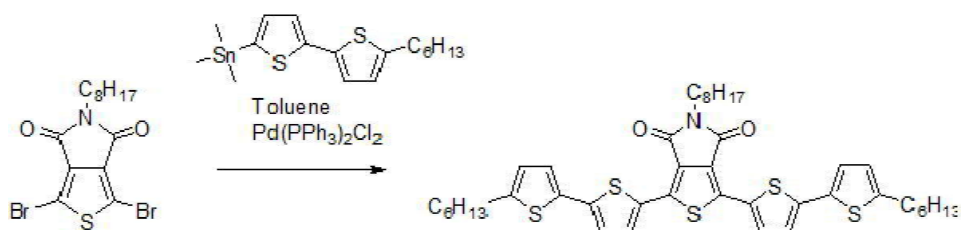
[0188] FF: 개방전압과 단락 전류의 곱에 대한 최대 출력의 비율, 태양전지로서의 전류 전압 특성 곡선(I-V 곡선)의 질을 나타내는 지표이며, 주로 내부의 직렬, 병렬 저항과 다이오드 성능 지수(diode quality factor)에 따라 달라진다.

[0189] PCE : 태양전지의 최대 출력(P_{max})을 발전하는 면적(태양전지 면적 A)과 규정된 시험 조건에서 측정한 입사 조사 강도(incidence irradiance ; E)의 곱으로 나누 값을 백분율로 나타낸 것으로서, %로 표시한다.

[0190] [실시예 1]

[0191] 1,3-bis(5'-hexyl-[2,2'-bithiophen]-5-yl)-5-octyl-4H-thieno[3,4-c]pyrrole-4,6(5H)-dione(1,3-비스(5'-헥실-2,2'-바이티오펜-5-일)-5-옥틸-4H-싸이에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온, 이하, BT-TPD)의 합성

[0192]



[0193]

잘 건조시킨 100mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 1,3-디브로모-5-옥틸-4H-싸이에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온 (1.01g, 2.38mmol)과 (5'-헥실-2,2'-바이티오펜-5-일)트리메틸스타네인(1.97g, 4.77mmol)을 넣고 톨루엔 40ml에 녹였다. 질소가 담긴 풍선을 이용하여, 10분 동안 질소 기류하를 유지시켜준다.

[0194]

그 후에 촉매로 $Pd(PPh_3)_2Cl_2$ (0.05g, 0.07 mmol)을 넣고, 온도를 100 °C로 올린 후, 질소기류 하에서 12시간 동안 교반하였다. 혼합물을 클로로포름으로 추출하고 유기층을 물로 씻어 준 다음 $MgSO_4$ 로 건조시킨 후, 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하였다. n-헥산/클로로포름(부피비 2:1의 비율로)용매를 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리해서 노란색 고체화합물을 0.96g(53%)의 수득율로 얻었다.

[0195]

1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ = 7.92 (d, 2H), 7.11 (d, 4H), 6.73 (d, 2H), 3.68 (t, 2H), 2.82 (t, 4H), 1.68 (m, 6H), 1.431.25 (br, 22H), 0.89 (t, 9H).

[0196]

^{13}C NMR (500 MHz, $CDCl_3$): δ = 163.0, 147.4, 141.8, 136.3, 134.1, 131.1, 130.7, 128.5, 125.5, 125.0, 124.3, 39.0, 38.2, 32.1, 31.9, 31.8, 30.6, 29.6, 29.5, 29.1, 28.9, 27.3, 23.0, 22.9, 14.4

[0197]

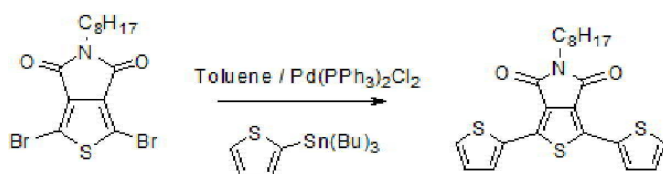
HRMS (EI): m/z calcd for $C_{42}H_{51}NO_2S_5$ (M^+) 761.25

[0198] [실시예 2] TBDT-TTPD의 합성

[0199]

1)5-octyl-1,3-di(thiophen-2-yl)-4H-thieno[3,4-c]pyrrole-4,6(5H)-dione(a)(5-옥틸-1,3-디(싸이오펜-2-일)-4H-싸이에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온(a))의 합성

[0200]



[0201]

잘 건조시킨 500 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 1,3-디브로모-5-옥틸-4H-싸이에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온 (7.50 g, 17.73 mmol)과 트리부틸(싸이오펜-2-일)스테네인(16.53 g, 44.32 mmol)을 넣고 톨루엔 300 mL에 녹였

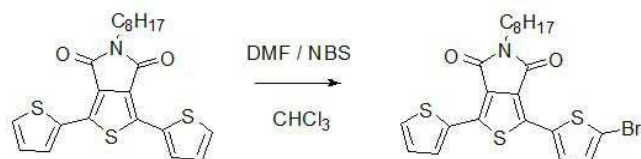
다. 질소가 담긴 풍선을 이용하여, 10분 동안 질소기류하를 유지시켜준다. $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ (0.37 g, 0.53 mmol)을 넣고, 온도를 100°C 로 올린 후, 질소기류하에서 12시간동안 교반하였다. 혼합물을 클로로포름으로 추출하고 유기층을 물로 씻어 준 다음 MgSO_4 로 건조시킨 후, 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하였다. n-헥산/디클로로메탄(부피비4:1의 비율로)용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리해서 노란색 고체화합물을 4.88 g (64%)의 수득율로 얻었다.

[0202]

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ = 8.00 (s, 2H), 7.45 (s, 2H), 7.15 (t, 2H), 3.68(t, 2H), 1.72 (m, 2H), 1.32 (m, 10H), 0.88 (t, 3H).

[0203]

2)1-(5-bromothiophen-2-yl)-5-octyl-3-(thiophen-2-yl)-4H-thieno[3,4-c]pyrrole-4,6(5H)-dione(b)(1-(5-브로모싸이오펜-2-일)-5-옥틸-3-(싸이오펜-2-일)-4H-싸이에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온(b))의 합성



[0204]

[0205]

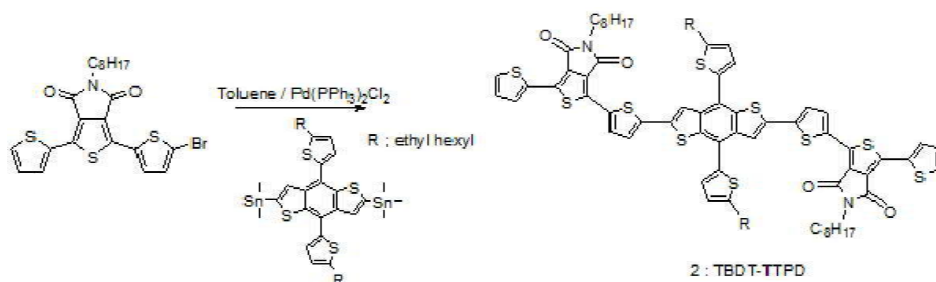
잘 건조시킨 250 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 5-옥틸-1,3-디(싸이오펜-2-일)-4H-싸이에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온 (5.50 g, 12.79 mmol)과 클로로포름100mL, DMF 100 mL 에 녹였다. n-브로모숙신이미드(NBS) (2.27 g, 12.79 mmol)를 클로로포름 50mL, DMF 50mL와 같이 녹인 후, -5°C 로 내린 플라스크 용기에 천천히 적가시켰다. 10시간 후, 혼합물을 클로로포름으로 추출하고 유기층을 물로 씻어준다음 MgSO_4 로 건조시킨 후, 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하였다. n-헥산/디클로로메탄 (부피비 5:1의 비율로)용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리해서, 재결정 후 노란색 고체화합물을 3.44 g (53%)의 수득율로 얻었다.

[0206]

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ = 8.00 (s, 2H), 7.45 (s, 2H), 7.15 (t, 2H), 3.68(t, 2H), 1.72 (m, 2H), 1.32 (m, 10H), 0.88 (t, 3H).

[0207]

3) TBDT-TTPD의 합성



[0208]

[0209]

잘 건조시킨 100 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 1-(5-브로모싸이오펜-2-일)-5-옥틸-3-(싸이오펜-2-일)-4H-싸이에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온 (1.00 g, 1.96 mmol)과 2,6-비스(트리메틸틴)-4,8-비스(5-(2-에틸헥실)싸이오펜-2-일)벤조[1,2-b:4,5b0]다이싸이오펜 (0.89 g, 0.98 mmol)을 넣고 톨루엔 30 mL에 녹였다. 질소가 담긴 풍선을 이용하여, 10분 동안 질소기류하를 유지시켜준다. $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$ (0.02 g, 0.03 mmol)을 넣고, 온도를 100°C 로 올린 후, 질소기류 하에서 12시간동안 교반하였다. 혼합물을 클로로포름으로 추출하고 유기층을 물로 씻어준 다음 MgSO_4 로 건조시킨 후, 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하였다. n-헥산/클로로포름 (부피비 1:1의 비율로)용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리해서 검붉은 고체화합물을 0.49 g (35%)의 수득율로 얻었다.

[0210]

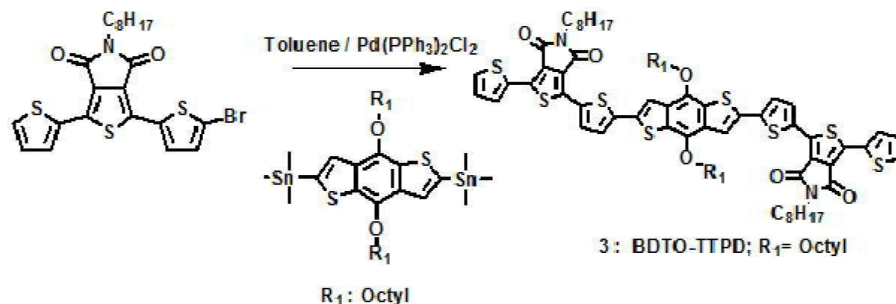
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3), δ = 8.01 (d, 2H), 7.91 (d, 2H), 7.66 (s, 2H), 7.44 (t, 2H), 7.32(d, 2H), 7.24 (d, 2H), 7.13 (d, 2H), 6.97 (d, 2H), 3.66 (t, 4H), 2.95 (t, 4H), 1.70 (br, 8H), 1.571.29 (br, 34H),

1.070.87 (m, 18H).

¹³C NMR (500 MHz, CDCl₃): δ 162.7, 162.6, 146.2, 140.6, 139.6, 137.4, 136.9, 135.9, 135.6, 132.9, 132.7, 132.2, 130.9, 130.2, 128.8, 128.7, 128.6, 128.4, 126.1, 125.9, 125.6, 123.6, 120.3, 41.8, 38.9, 34.8, 33.0, 32.2, 29.6, 29.4, 28.8, 27.5, 27.4, 26.2, 23.5, 23.0, 14.7, 14.4, 11.4

MS (MALDI-TOF/TOF): calculated for C₇₈H₈₄N₂O₄S₁₀, 1432.36;

[실시예 3] BDTO-TTPD의 합성



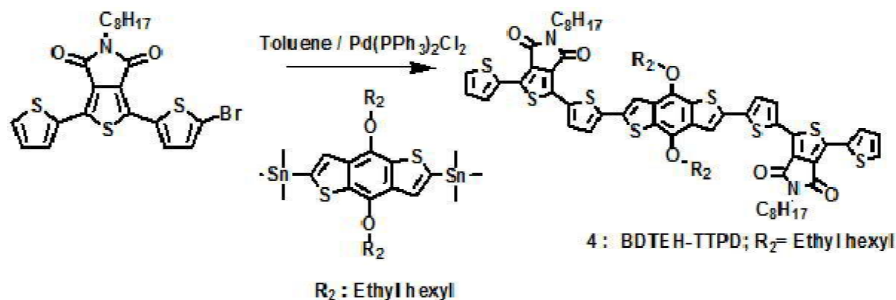
잘 건조시킨 100 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 1-(5-브로모싸이오펜-2-일)-5-옥틸-3-(싸이오펜-2-일)-4H-싸이 에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온 (1.00 g, 1.96 mmol)과 2,6-비스(트리메틸틴)-4,8-비스(5-(2-옥틸옥시))벤조 [1,2-b:4,5b0]다이싸이오펜 (0.76 g, 0.98 mmol)을 넣고 Toluene 30 mL에 녹였다. 질소가 담긴 풍선을 이용하여, 10분 동안 질소기류하를 유지시켜준다. Pd(PPh₃)₂Cl₂ (0.02 g, 0.03 mmol)을 넣고, 온도를 100℃로 올린 후, 질소기류 하에서 12시간동안 교반하였다. 혼합물을 클로로포름으로 추출하고 유기층을 물로 씻어준 다음 MgSO₄로 건조시킨 후, 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하였다. n-헥산/클로로포름(부피비 1:1의 비율로) 용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리해서 검붉은 고체화합물을 0.61 g (48%)의 수득율로 얻었다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃), δ = 7.93 (d, 4H), 7.36 (d, 2H), 7.10 (s, 2H), 7.06 (d, 4H), 4.11 (t, 4H), 3.61 (t, 4H), 1.88-1.57 (br, 16H), 1.441.12 (br, 32H), 1.030.88 (m, 12H).

¹³C NMR (500 MHz, CDCl₃): δ (162.8, 162.7, 162.6, 144.3, 140.8, 139.7, 136.7, 135.7, 132.8, 132.7, 132.4, 131.0, 130.3, 130.2, 128.8, 128.7, 126.3, 125.7, 117.3, 41.1, 39.0, 38.9, 32.2, 30.8, 29.7, 29.6, 28.9, 27.4, 24.2, 23.7, 23.6, 23.0, 14.7, 14.4, 11.8)

MS (MALDI-TOF/TOF): calculated for C₇₀H₈₀N₂O₆S₈, 1300.54;

[실시예 4] BDTEH-TTPD의 합성



잘 건조시킨 100 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 1-(5-브로모싸이오펜-2-일)-5-옥틸-3-(싸이오펜-2-일)-4H-싸이 에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온 (1.00 g, 1.96 mmol)과 2,6-비스(트리메틸틴)-4,8-비스(5-(2-에틸헥실옥시))

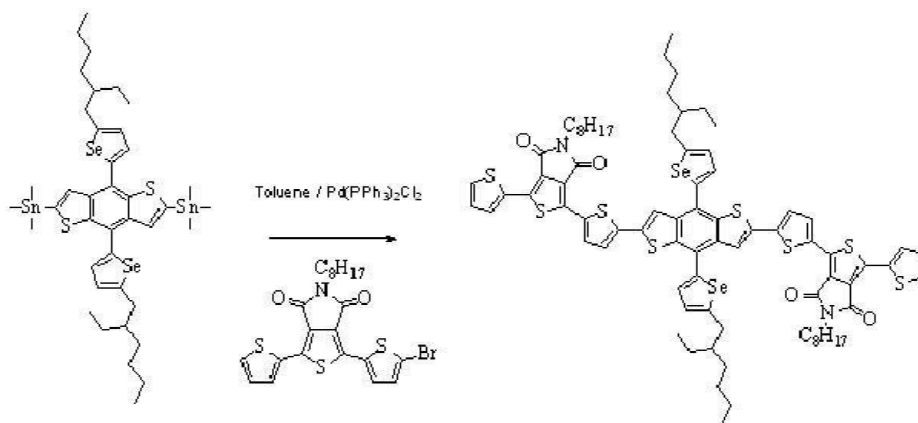
벤조[1,2-b:4,5b0]다이싸이오펜 (0.76 g, 0.98 mmol)을 넣고 톨루엔 30 mL에 녹였다. 질소가 담긴 풍선을 이용하여, 10분 동안 질소기류하를 유지시켜준다. Pd(PPh₃)₂Cl₂ (0.02 g, 0.03 mmol)을 넣고, 온도를 100°C로 올린 후, 질소기류하에서 12시간동안 교반하였다. 혼합물을 클로로포름으로 추출하고 유기층을 물로 씻어준 다음 MgSO₄로 건조시킨 후, 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하였다. n-Hexane/chloroform (1/1)용매를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리해서 검붉은 고체화합물을 0.58 g (46%)의 수득율로 얻었다.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃), δ = 7.89 (d, 2H), 7.74 (d, 2H), 7.31 (t, 2H), 7.16 (s, 2H), 7.01(d, 4H), 4.09 (t, 4H), 3.63 (t, 4H), 1.69 (br, 10H), 1.361.16 (br, 32H), 1.130.88 (m, 18H).

¹³C NMR (500 MHz, CDCl₃): δ (162.7, 162.6, 162.5, 146.2, 140.6, 139.6, 136.9, 135.9, 132.9, 132.7, 132.2, 130.9, 130.2, 128.7, 126.1, 125.9, 125.6, 123.6, 120.3, 41.8, 38.9, 34.8, 33.0, 32.2, 29.6, 29.4, 28.9, 27.5, 27.4, 26.2, 23.5, 23.0, 14.7, 14.4, 11.4)

MS (MALDI-TOF/TOF): calculated for C₇₀H₈₀N₂O₆S₈, 1300.08;

[실시예 5] SBDT-TTPD의 합성



잘 건조시킨 100 mL 삼구 둥근 바닥 플라스크에 1-(5-브로모싸이오펜-2-일)-5-옥틸-3-(싸이오펜-2-일)-4H-싸이 에노[3,4-c]피롤-4,6(5H)-다이온 (1.00 g, 1.96 mmol)과 2,6-비스(트리메틸틴)-4,8-비스(5-(2-에틸헥실)셀레노 펜-2-일)벤조[1,2-b:4,5b0]다이싸이오펜 (0.98 g, 0.98 mmol)을 넣고 톨루엔 30 mL에 녹였다. 질소가 담긴 풍 선을 이용하여, 10분 동안 질소기류하를 유지시켜준다. Pd(PPh₃)₂Cl₂ (0.02 g, 0.03 mmol)을 넣고, 온도를 100°C로 올린 후, 질소기류하에서 12시간동안 교반하였다. 혼합물을 클로로포름으로 추출하고 유기층을 물로 씻 어준 다음 MgSO₄로 건조시킨 후, 회전식 증발기를 이용하여 용매를 제거하였다. n-Hexane/chloroform (1/1)용매 를 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 분리해서 검붉은 고체화합물을 0.46 g (31%)의 수득율로 얻었다.

¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂), δ = 7.99 (d, 2H), 7.91 (d, 2H), 7.66 (s, 2H), 7.44 (t, 2H), 7.32(d, 2H), 7.24 (d, 2H), 7.13 (d, 2H), 6.97 (d, 2H), 3.68 (t, 4H), 2.95 (t, 4H), 1.70 (br, 8H), 1.571.29 (br, 34H), 1.070.97 (m, 18H).

¹³C NMR (500 MHz, CDCl₃): δ 162.7, 162.6, 146.2, 140.6, 139.6, 137.4, 136.9, 135.9, 135.6, 132.9, 132.7, 132.2, 130.9, 130.2, 128.8, 128.7, 128.6, 128.4, 126.1, 125.9, 125.6, 123.6, 120.3, 41.8, 38.9, 34.8, 33.0, 32.2, 29.6, 29.4, 28.8, 27.5, 27.4, 26.2, 23.5, 23.0, 14.7, 14.4, 11.4. MS (MALDI-TOF/TOF): calculated for C₇₈H₈₄N₂O₄S₈Se₂, 1528.25.

[실시예 6] 유기반도체 소자제작

ITO가 코팅된 유리기판을 아세톤과 IPA(Isopropylalcohol)로 세척한 후에, PEDOTPSS (Baytron P TP AI 4083,

Bayer AG)를 ITO층 위에 코팅한다. 이때 두께는 3050 nm 정도가 되도록 하며 120℃에서 60분간 어닐링을 실시한다. 활성층으로 상기 실시예 1 내지 5에서 제조한 단분자 화합물과 PCBM 유도제 및 첨가제(DIO;다이아이오도옥탄, ODT;옥타다이싸이올)를 60℃에서 12시간동안 교반시킨 후에 0.45 μm 크기의 필터로 물질을 필터한 후에 PEDOT-PSS 층위에 스핀코팅을 이용하여 100 nm 두께로 코팅한다. 그 후에 고진공 (10^{-6} torr)에서 10 nm 두께로 TiO_2 (인듐틴 옥사이드)를 코팅하고 알루미늄(Al)을 100 nm 두께로 증착하여 유기 태양전지 소자를 제작하였다. 필요에 따라 형태학적 특성의 개선을 목표로 어닐링을 실시하기도 한다. 또한 전류밀도전압 곡선(JV) 측정에는 Keithley사의 4200 소스를 이용하였으며 AM 1.5 G 조건 하에 표준 PVM132(NREL, 100mW/cm²의 세기로 측정함) 범위 하에서 유기 태양전지 소자 특성을 측정하여 도 17 ~ 18에 나타내었다.(Oriel 1kW solarsimulator 사용).

[0232] 상기 실시예 1 내지 5에서 화합물(BT-TPD, TBDT-TPPD, BDTO-TPPD, BDTEH-TPPD, SBDT-TPPD)의 광 흡수영역을 용액상태와 필름상태에서 측정하여 결과를 도7~도11에 도시하였다. 하기에 도7 ~ 도 11그래프에 대한 결과 값을 표 1로 정리하였다.

[0233] [표 1]

	실시예 1 (BT-TPD)	실시예 2 (TBDT-TPPD)	실시예 3 (BDTO-TPPD)	실시예 4 (BDTEH-TPPD)	실시예 5 (SBDT-TPPD)
Sol.(max) (nm)	331,463	458,488,517	484,512	485,511	463,489,517
Film(max) (nm)	340,448, 522	487,525,570	481,519,561	483,520,561	495,527,573
Edge(nm)	566	631	618	634	628
Band gap(optical) (eV)	2.19	1.97	2.01	1.96	3.37
HOMO(electronic) (eV)	5.36	5.36	5.33	5.27	5.34
LUMO(optical) (eV)	3.17	3.39	3.32	3.31	3.37
Oxidation onset(eV)	0.96	0.96	0.93	0.87	0.94

[0234]

[0235] 여기서 실시예 1 내지 5의 HOMO값은 하기에 도8 에서 측정한 결과 값을 이용하여 계산한 값이다. 또한 밴드갭은 필름상태에서 UV흡수파장에서 구하였다. 표 1의 결과에서 보이는 바와 같이 본 발명에 따른 유기 반도체 화합물은 밴드갭이 넓어 장파장의 빛까지 흡수할 수 있으며 즉, 태양광과 유사한 파장영역의 빛까지 흡수가 가능하기 때문에 보다 많은 전류를 생산하게 되어 높은 단락전류가 발생할 수 있다.

[0236] 실시예 1 내지 5의 열적특성은 하기에 도 2~6 에서 측정한 결과 값을 표 2로 정리하였다. 실시예 1,2,3,4,5에서 합성된 물질에 대한 열적 안정성에서, 유리전이온도 값은 측정되지 않았으나, Tm과 Tc가 측정된 것으로 보아 물질의 특성이 결정성을 가진 것으로 예상된다.

[0237] [표 2]

	실시예 1 (BT-TPD)	실시예 2 (TBDT-TPPD)	실시예 3 (BDTO-TPPD)	실시예 4 (BDTEH-TPPD)	실시예 5 (SBDT-TPPD)
Tm(°C)	105	265	234	228	233
Tc(°C)	-	223	195	187	203
5wt% loss(°C)	442	457	365	390	416

[0238]

[0239] 한편 유기태양전지의 특성은 크게 4가지 특성으로 나타낼 수 있는데, 단락전류(Short circuit current; Jsc),

개방전압(Open circuit voltage; Voc), 충전율(Fill factor; FF), 전력 변환 효율(Power conversion efficiency; PCE)이다. 이들 간의 상관관계는 아래의 식 1로 표현할 수 있다.

$$\eta = P_{out}/P_{in} = I_{max} \times V_{max}/P_{in} = I_{sc} \times V_{oc} \times FF/P_{in} \quad \text{—식 1}$$

식1에 의하면 고효율을 구현하기 위해서는 소자에 높은 단락전류와 개방전압이 필요하다. 또한 높은 충전율을 가져야만 고효율의 소자구현이 가능하다. 높은 단락전류를 구현하기 위해서는 재료적으로 높은 전하이동도를 가져야 하며 높은 개방전압은 분자 내 전자주계의 HOMO 값과 LUMO 값에 연관이 있다. 또한 높은 충전율을 가지기 위해서는 일반적으로 전자 받개로 사용되는 PCBM과 혼합하였을 때 형태학적 특성이 우수해야만 한다. 따라서 위와 같은 여러 가지 조건이 충족되었을 때 비로소 고효율의 유기태양전지가 가능해 진다.

도 17~18은 각각 실시예 1 ~ 5에서 합성된 화합물의 유기태양전지 특성을 측정한 결과 값을 나타냈으며, 이에 해당하는 결과 값을 하기 표 3에 나타내었다.

[표 3]

Devices	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
BT-TPD:PC71BM	0.84	6.2	27.5	1.43
TBDT-TTPD:PC61BM	0.97	9.1	52.0	4.60
BDTO-TTPD:PC71BM	0.86	2.4	54.0	1.12
BDTEH-TTPD:PC71BM	0.91	7.1	41.8	2.70
SBDT-TTPD:PC71BM	0.90	10.4	45.7	4.24

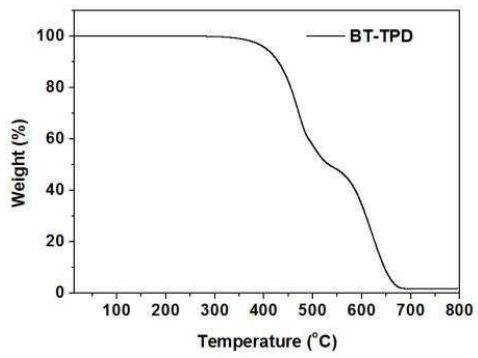
표 3에서 보이는 바와 같이, TBDT-TTPD의 경우 9.1 mA/cm²의 높은 단락전류(J_{sc})값을 보여주며 0.97V의 높은 개방전압(V_{oc}) 값을 나타내고 있다. FF는 52.0%를 나타내고 있고, 물질의 효율은 약 4.6%의 값을 보여주고 있다. SBDT-TTPD의 경우 10.4 mA/cm²의 높은 단락전류(J_{sc})값을 가지고, 0.90V의 높은 개방전압을 가지고 있으며, FF는 45.7%의 값을 나타내고 있다. 물질의 효율은 4.24%로 높은 효율 값을 나타내었다. BDTEH-TTPD, BDTO-TTPD, BT-TPD는 각각 7.1, 2.4, 6.2 mA/cm²의 단락전류(J_{sc})값을 가지고, 개방전압은 각각 0.91, 0.86, 0.84V의 값을 나타내고 있었으며, FF는 각각 41.8, 54.0, 27.5 %의 값을 나타내며, 물질의 효율은 각각 2.70, 1.12, 1.43%의 값을 나타내었다.

도면

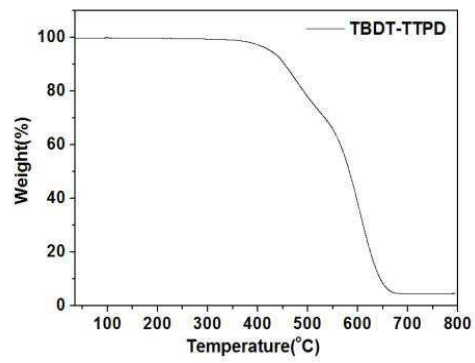
도면1

Al(음극)
TiO ₂ (광학층)
Active Layer(활성층)
PEDOT:PSS
Glass/ITO

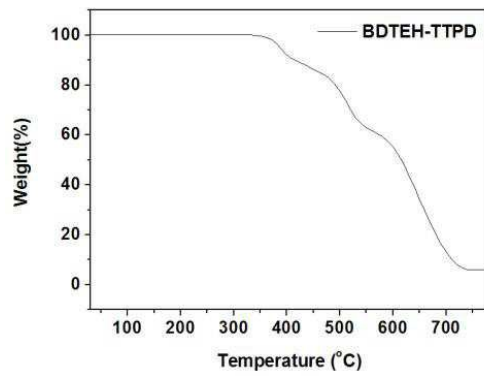
도면2



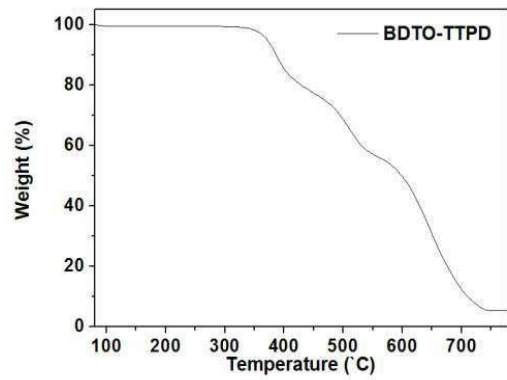
도면3



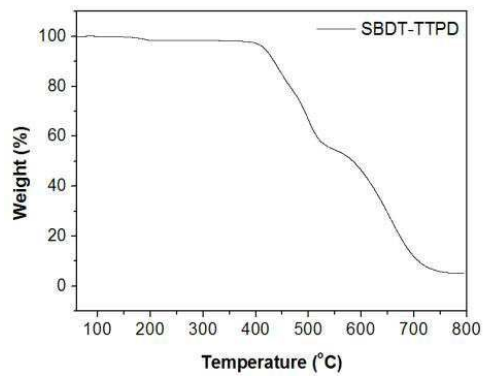
도면4



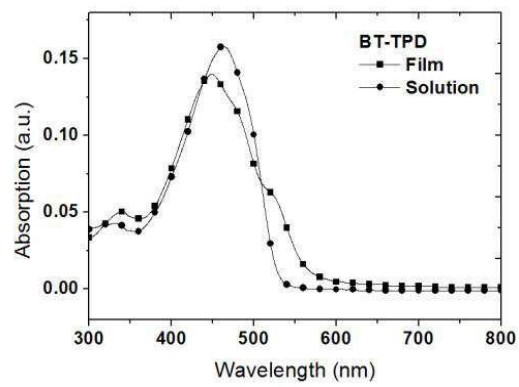
도면5



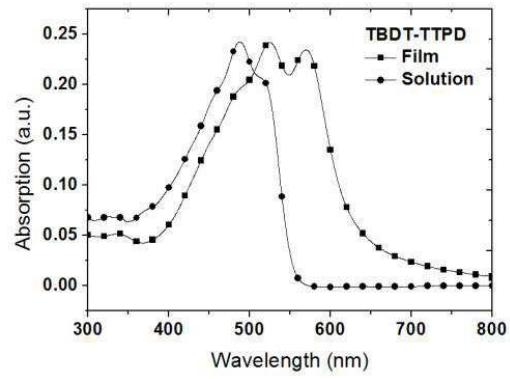
도면6



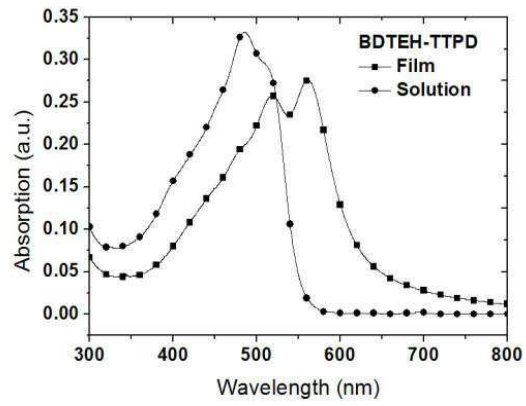
도면7



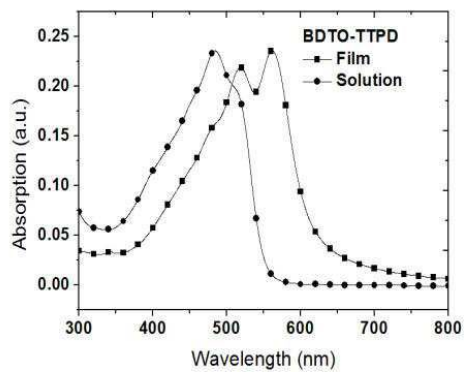
도면8



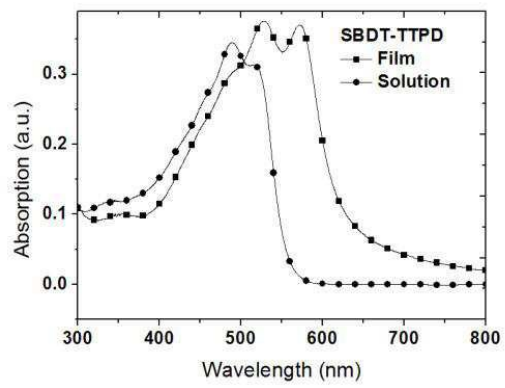
도면9



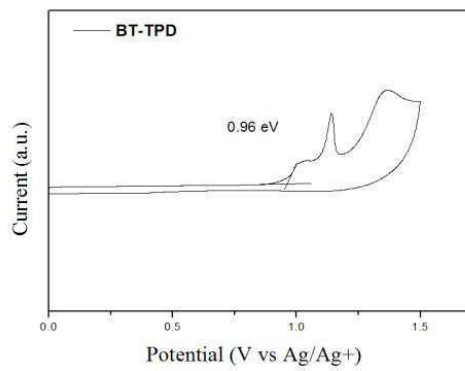
도면10



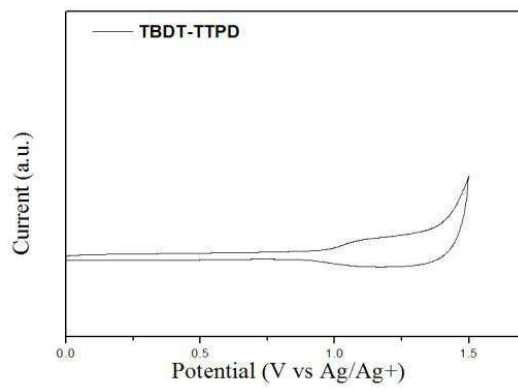
도면11



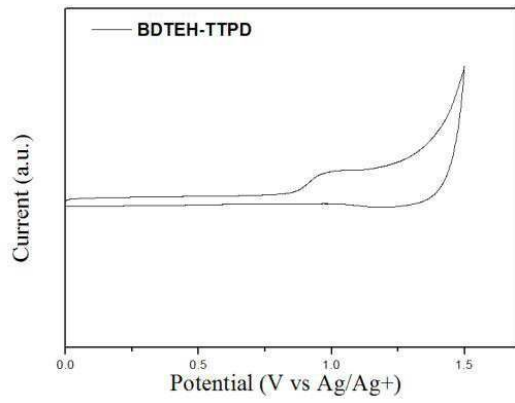
도면12



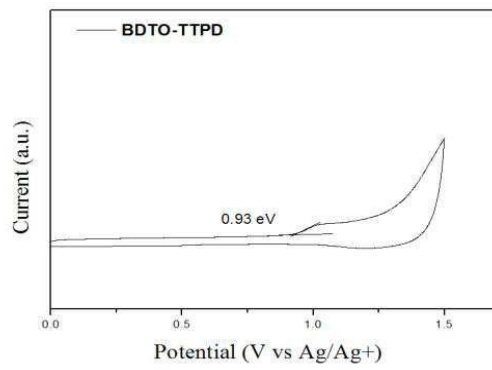
도면13



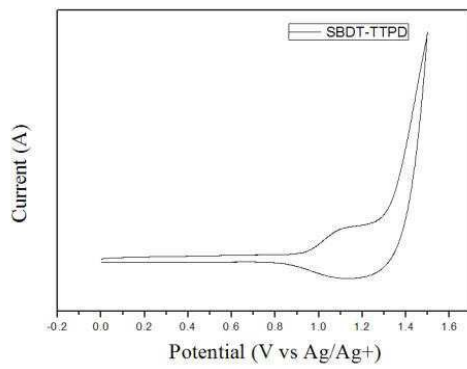
도면14



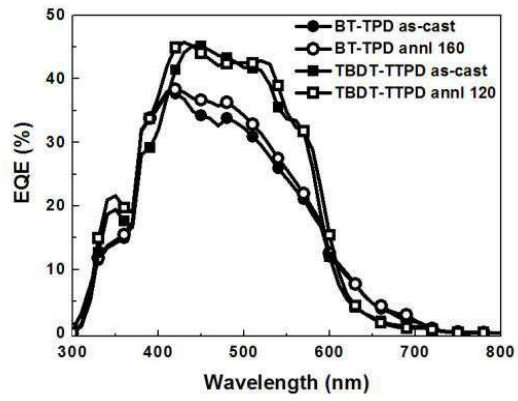
도면15



도면16



도면17



도면18

