

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2021-0103221

(43) 공개일자 2021년08월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 495/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)

H01L 51/42 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 495/04 (2013.01)

H01L 51/0074 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2020-0017711

(22) 출원일자 2020년02월13일

심사청구일자 2020년02월13일

(71) 출원인

울산과학기술원

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

고려대학교 산학협력단

서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 (안암동5가)

재단법인 멀티스케일 에너지시스템 연구단

서울특별시 관악구 관악로 1 (신림동, 서울대학교)

(72) 발명자

김진영

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

박송이

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

리엔목특허법인

전체 청구항 수 : 총 18 항

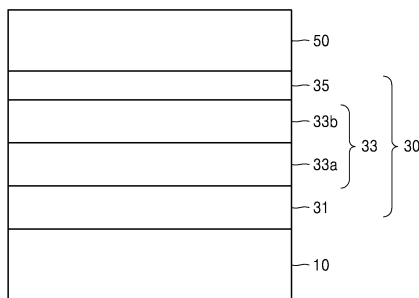
(54) 발명의 명칭 유기반도체 화합물, 이를 포함하는 유기태양전지 및 유기태양전지의 제조 방법

(57) 요약

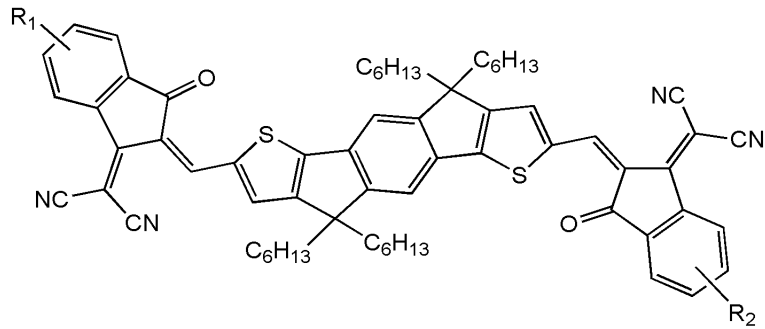
일 구현예에 따른 하기 화학식 1로 표시되는 유기 반도체 화합물을 개시한다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로 C₁ 내지 C₂₀의 알킬기이고, -C₆H₁₃기는 직쇄형의 헥실기이다. 다른 일 구현예에 따른 유기태양전지를 제공한다. 상기 유기태양전지는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하는 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 상기 제2 전극 사이의 광활성층을 포함하고, 상기 광활성층은 전자주개 물질을 포함하는 제1 광활성층 및 전자받개 물질을 포함하는 제2 광활성층을 포함하고, 상기 제1 광활성층과 상기 제2 광활성층은 서로 분리되어 이중층을 형성하고, 상기 전자받개 물질의 스톡스 이동(Stoke's shift)이 30 내지 50 nm 범위일 수 있다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/42 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

(72) 발명자

이택호

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

우한영

서울특별시 성북구 지봉로21길 19, 103동 1403호

(보문동3가, 보문아이파크아파트)

유화숙

서울특별시 성북구 보문로21가길 11, 302호 (보문동6가)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 2016M1A2A2940914
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 기후변화대응기술개발(R&D)
 연구과제명 필름형 반투과 유기태양전지 서브모듈 개발
 기 여 율 30/100
 과제수행기관명 울산과학기술원
 연구기간 2016.12.01 ~ 2021.11.30

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 2019M1A2A2065614
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 기후변화대응기술개발(R&D)
 연구과제명 태양전지-전해조 일체형 물분해 수소 생산 기술 개발
 기 여 율 20/100
 과제수행기관명 울산과학기술원
 연구기간 2019.06.20 ~ 2023.12.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 NRF-2019R1A2C2085290
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 중견연구자지원사업
 연구과제명 자가 정렬 유도 신개념 에너지 하베스팅 도너-억셉터 분자 시스템
 기 여 율 30/100
 과제수행기관명 고려대학교 산학협력단
 연구기간 2019.06.01 ~ 2020.02.29

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 2019R1A6A1A11044070
 부처명 교육부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 이공분야 중점연구소지원사업
 연구과제명 π -전자 기반 에너지·환경 혁신소재 연구
 기 여 율 10/100
 과제수행기관명 고려대학교 산학협력단
 연구기간 2019.06.01 ~ 2020.02.29

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 2012M3A6A7055540
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 글로벌프린티어사업
 연구과제명 친환경 안정화 유무기 소재 기술
 기 여 율 10/100
 과제수행기관명 고려대학교
 연구기간 2020.01.01 ~ 2020.08.31

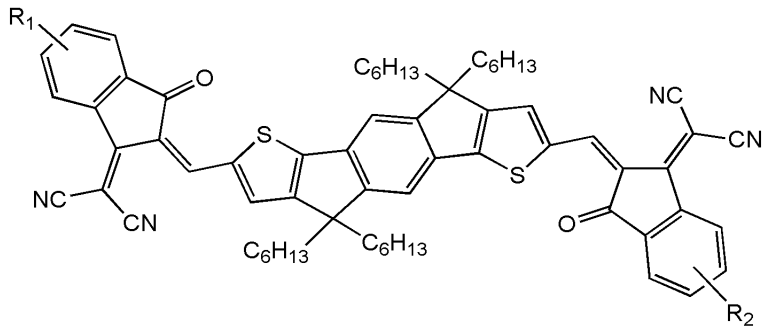
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 반도체 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

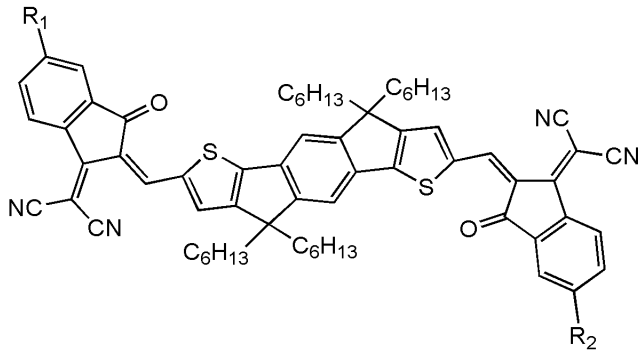
R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로 C₁ 내지 C₂₀의 알킬기이고, -C₆H₁₃기는 직쇄형의 헥실기이다.

청구항 2

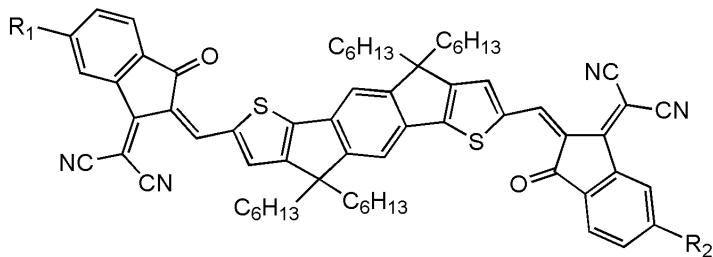
제1 항에 있어서,

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물:

<화학식 2>



<화학식 3>



청구항 3

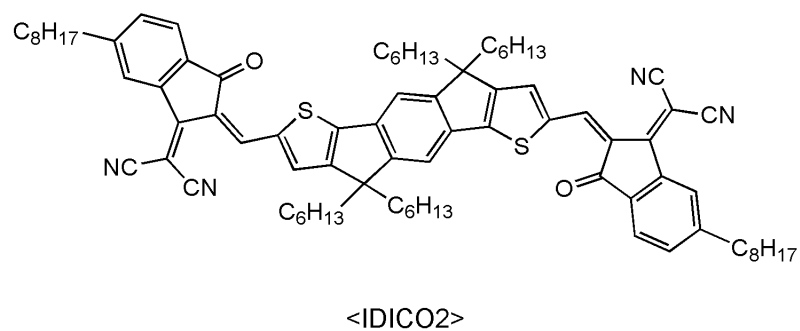
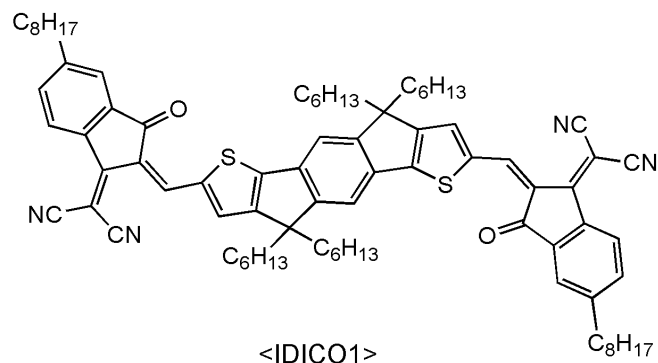
제1 항에 있어서,

상기 R₁ 및 R₂는 옥틸기인 유기태양전지용 화합물.

청구항 4

제1 항에 있어서,

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화합물 IDIC01 또는 IDIC02인 화합물:



상기 화합물 IDIC01 및 IDIC02 에서 -C₈H₁₇ 기는 직쇄형의 옥틸기이다.

청구항 5

제1 전극;

상기 제1 전극과 대향하는 제2 전극; 및

상기 제1 전극 및 상기 제2 전극 사이의 광활성층을 포함하고,

상기 광활성층은 전자주개 물질을 포함하는 제1 광활성층 및 전자받개 물질을 포함하는 제2 광활성층을 포함하고,

상기 제1 광활성층과 상기 제2 광활성층은 서로 분리되어 이중층을 형성하고,

상기 전자받개 물질의 스톡스 이동(Stoke's shift)이 30 내지 50 nm 범위인 유기태양전지.

청구항 6

제5 항에 있어서,

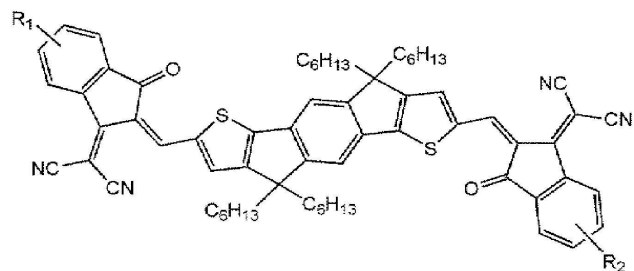
상기 전자주개 물질의 광발광 스펙트럼 및 상기 전자받개 물질의 광흡수 스펙트럼은 각각 근적외선 영역의 피크를 갖는 유기태양전지.

청구항 7

제5 항에 있어서,

상기 전자받개 물질은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기태양전지:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

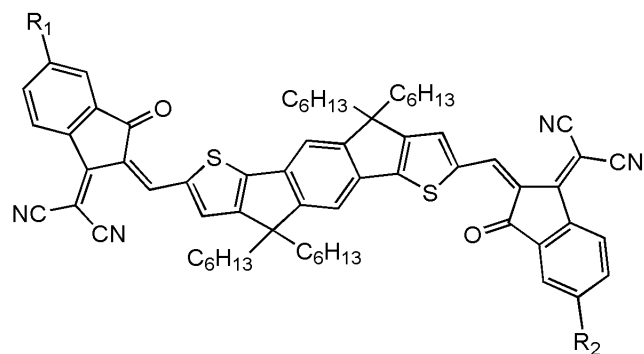
R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로 C₁ 내지 C₂₀의 알킬기이고, -C₆H₁₃기는 직쇄형의 헥실기이다.

청구항 8

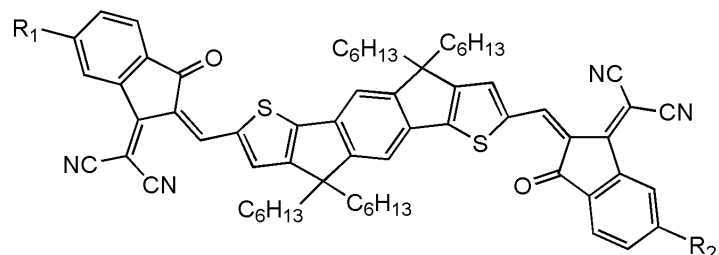
제7 항에 있어서,

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기태양전지:

<화학식 2>



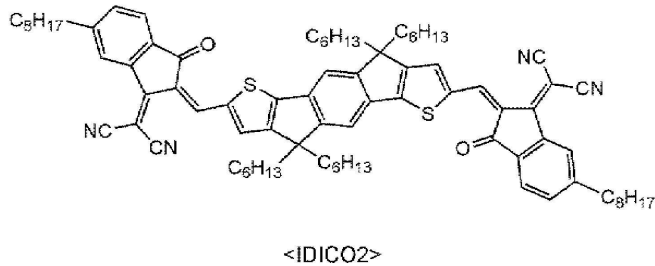
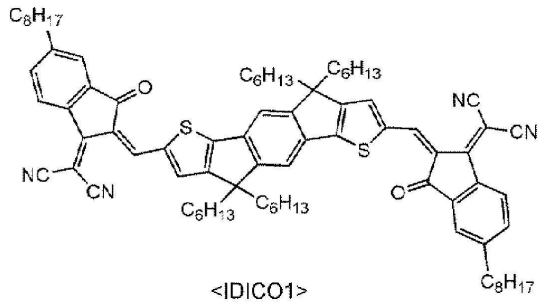
<화학식 3>



청구항 9

제7 항에 있어서,

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화합물 IDIC01 또는 IDIC02인 유기태양전지:



상기 화합물 IDIC01 및 IDIC02 에서 -C₈H₁₇ 기는 직쇄형의 옥틸기이다.

청구항 10

제5 항에 있어서,

상기 전자주개 물질은 PBDB-T-2F를 포함하는 유기태양전지.

청구항 11

제5 항에 있어서,

상기 제1 광활성층의 두께는 40 내지 50 nm인 유기태양전지.

청구항 12

제5 항에 있어서,

상기 제2 광활성층의 두께는 20 내지 30 nm인 유기태양전지.

청구항 13

제5 항에 있어서,

상기 제1 전극과 상기 광활성층 사이의 정공 수송층 또는 상기 제2 전극과 상기 광활성층 사이의 전자 수송층을 더 포함하는 유기태양전지.

청구항 14

제1 전극을 형성하는 단계;

전자주개 물질 및 제1 용매를 포함하는 제1 용액을 사용하여 상기 제1 전극 위에 제1 광활성층을 형성하는 단계;

전자받개 물질 및 제2 용매를 포함하는 제2 용액을 사용하여 상기 제1 광활성층 위에 제2 광활성층을 형성하는 단계; 및

상기 제2 광활성층 위에 제2 전극을 형성하는 단계를 포함하고,

상기 제2 용매는 상기 전자주개 물질을 용해시키지 못하고,

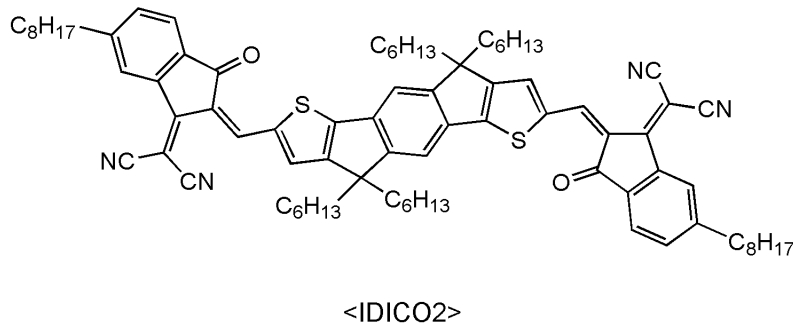
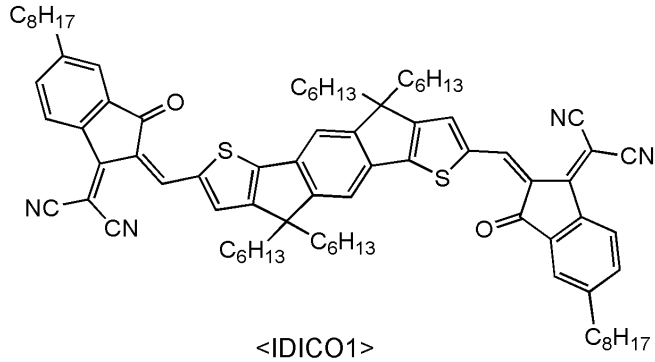
상기 제1 광활성층과 상기 제2 광활성층은 서로 분리되어 이중층을 형성하고,

상기 전자받개 물질의 스톡스 이동(Stoke's shift)이 30 내지 50 nm 범위인 유기태양전지의 제조 방법.

청구항 15

제14 항에 있어서,

상기 전자주개 물질은 하기 화합물 IDIC01 또는 IDIC02인 유기태양전지의 제조 방법:



상기 화합물 IDIC01 및 IDIC02 에서, $-C_6H_{13}$ 기는 직쇄형의 헥실기이고 $-C_8H_{17}$ 기는 직쇄형의 옥틸기이다.

청구항 16

제14 항에 있어서,

상기 전자받개 물질은 PBDB-T-2F를 포함하는 유기태양전지의 제조 방법.

청구항 17

제14 항에 있어서,

상기 제1 용매는 클로로 벤젠(CB), 1,8-옥탄디티올(ODT)을 포함하고,

상기 제2 용매는 디클로로메탄(DCM)을 포함하는 유기태양전지의 제조 방법.

청구항 18

제14 항에 있어서,

상기 제1 전극 형성 후 상기 제1 광활성층 형성 전 상기 제1 전극 위에 정공 수송층을 형성하는 단계 또는 상기 제1 광활성층 형성 후 상기 제2 전극 형성 전 상기 제2 광활성층 위에 전자 수송층을 형성하는 단계를 더 포함하는 유기태양전지의 제조 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기반도체 화합물 및 이를 포함하는 유기태양전지에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 반도체 물질의 단일항 엑시톤 확산 거리(L_D)는 약 10 nm 수준인 반면, 유기태양전지의 광활성층의 두께는 100 nm가 넘어야 입사광의 90% 이상을 흡수할 수 있는 것으로 보고되어 있다. 광활성층의 두께보다 엑시톤의 확산 거리가 짧으면 엑시톤으로부터 전자와 정공으로 분리되지 못하여 광전효율이 낮아진다.

[0003] 이러한 문제를 해결하기 위하여 벌크 이종접합(BHJ) 광활성층이 도입되었다. 벌크 이종접합 광활성층에서는 전자주개 물질과 전자받개 물질이 혼합되어 있어서 엑시톤 확산 거리 내에 존재하는 전자주개 물질과 전자받개 물질 사이의 계면이 많아서 엑시톤의 분리효율이 크게 향상될 수 있다. 그러나 벌크 이종접합은 광활성층에 사용되는 물질마다 다른 미세구조의 최적화가 요구되므로 공정이 까다로워질 수 있다.

[0004] 전자주개 물질과 전자받개 물질을 단순히 적층함으로써 높은 효율을 얻을 수 있으면 대면적의 소자의 제조가 훨씬 용이해질 수 있다. 이를 위해서는 엑시톤 확산 거리(L_D)가 긴 유기 반도체 물질이 필요하다.

발명의 내용

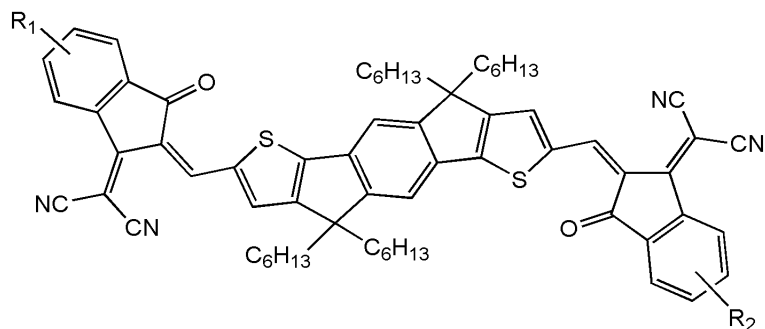
해결하려는 과제

[0005] 긴 엑시톤 확산 거리를 갖는 유기 반도체 화합물, 이를 이용한 고효율의 유기태양전지 및 이의 제조 방법을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0006] 일 구현예에 따른 유기 반도체 화합물을 제공한다. 상기 유기 반도체 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0007] <화학식 1>



[0008]

[0009] 상기 화학식 1 중,

[0010] R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로 C_1 내지 C_{20} 의 알킬기이고, $-C_6H_{13}$ 기는 직쇄형 헥실기이다.

[0011] 다른 일 구현예에 따른 유기태양전지를 제공한다. 상기 유기태양전지는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하는 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 상기 제2 전극 사이의 광활성층을 포함하고, 상기 광활성층은 전자주개 물질을 포함하는 제1 광활성층 및 전자받개 물질을 포함하는 제2 광활성층을 포함하고, 상기 제1 광활성층과 상기 제2 광활성층은 서로 분리되어 이중층을 형성하고, 상기 전자받개 물질의 스톡스 이동(Stoke's shift)이 30 내지 50 nm 범위일 수 있다.

[0012] 다른 일 구현예에 따른 유기태양전지의 제조방법을 제공한다. 상기 유기태양전지의 제조 방법은 제1 전극을 형성하는 단계; 전자주개 물질 및 제1 용매를 포함하는 제1 용액을 사용하여 상기 제1 전극 위에 제1 광활성층을 형성하는 단계; 전자받개 물질 및 제2 용매를 포함하는 제2 용액을 사용하여 상기 제1 광활성층 위에 제2 광활성층을 형성하는 단계; 및 상기 제2 광활성층 위에 제2 전극을 형성하는 단계를 포함한다. 상기 제2 용매는 상기 전자주개 물질을 용해시키지 못하고, 상기 제1 광활성층과 상기 제2 광활성층은 서로 분리되어 이중층을 형성하고, 상기 전자받개 물질의 스톡스 이동(Stoke's shift)이 30 내지 50 nm 범위일 수 있다.

발명의 효과

[0013] 전자받개 물질로서 스톡스 이동이 작은 유기 반도체 화합물을 사용함으로써 고효율의 이중층 헤테로정선 구조의 유기태양전지를 단순한 필름 형성 공정을 통해 제조할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0014] 도 1은 일 구현예에 따른 유기태양전지를 개략적으로 도시한 단면도이다.

도 2는 벌크 헤테로정선(a)과 이중층 헤테로정선(b)의 단면을 비교하여 나타낸 다이어그램이다.

도 3a 내지 도 3d는 각각 시료 2 내지 시료 5의 흡수 스펙트럼 및 발광 스펙트럼의 오버랩을 나타낸 그래프이다.

도 3e는 시료 2 내지 시료 5의 스펙트럼의 오버랩 면적을 파장에 따라 도시한 그래프이고, 도 3f는 시료 2 내지 시료 5의 광 흡수 계수 그래프이다.

도 4는 PBDB-T-2F, IDIC, IDIC01, IDIC02 및 NIDCS-HO의 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 보여주는 다이어그램이다.

도 5 내지 도 8은 각각 시료 1 내지 9의 스침각 X선 산란의 이미지이다.

도 9는 실시예 1의 소자의 TEM 사진이다.

도 10 및 도 11은 각각 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지 소자의 전류 밀도 대 전압의 그래프 및 파장에 따른 외부 양자 효율(EQE)의 그래프이다.

도 12 및 도 13은 각각 비교예 2 내지 5의 유기태양전지 소자의 전류 밀도 대 전압의 그래프 및 파장에 따른 외부 양자 효율(EQE)의 그래프이다.

도 14 및 도 15는 각각 실시예 1 내지 3 및 비교예 1 내지 7의 유기태양전지 소자에서 같은 물질에 대하여 이중층 구조 대 헤테로정선 구조의 채움율 및 전력변환효율(PCE)의 비를 나타낸 그래프이다.

도 16은 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지의 개방 전압(V_{oc}) 대 광강도의 그래프이다.

도 17 내지 도 20은 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지 소자의 조사한 광의 강도에 따른 정규화된 광 전류 밀도 대 전압의 그래프이다.

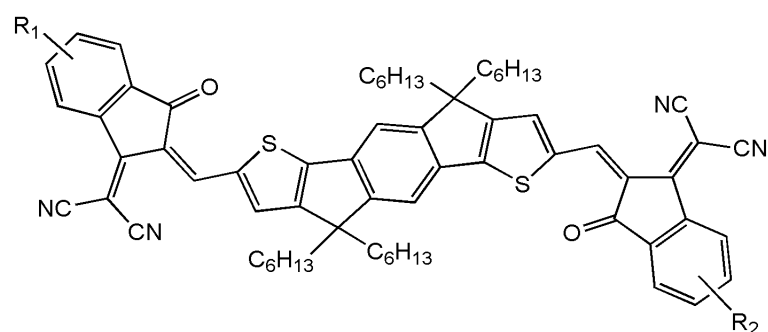
도 21은 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지의 광전류 밀도(J_{ph}) 대 유효 전압(V_{eff})의 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0015] 이하에서 첨부도면을 참조하여 본 발명의 일 실시형태에 대하여 상세히 설명한다. 또한, 본 명세서 및 도면에 있어서 실질적으로 동일한 기능을 가진 구성요소에 대해서는 동일한 부호를 첨부함으로써 중복설명을 생략한다.

[0016] 일 구현예에 따른 유기 반도체 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0017] <화학식 1>



[0018]

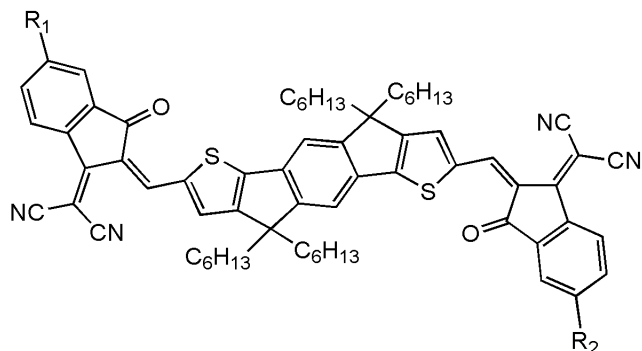
[0019] 상기 화학식 1 중,

[0020] R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로 수소 또는 C₁ 내지 C₂₀의 알킬기이다.

[0021] $-C_6H_{13}$ 기는 직쇄형의 헥실기이다.

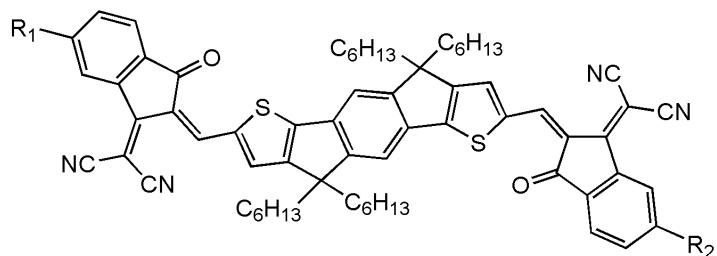
[0022] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다:

[0023] <화학식 2>



[0024]

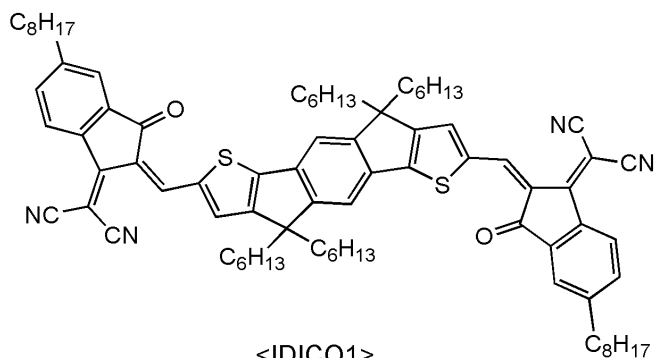
[0025] <화학식 3>



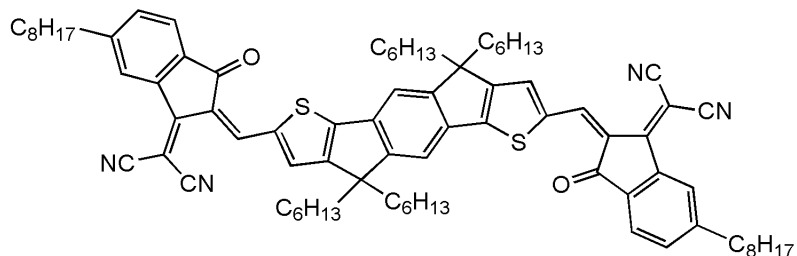
[0026]

[0027] 상기 화학식 2 및 상기 화학식 3에서 R_1 및 R_2 는 옥틸기일 수 있다.

[0028] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화합물 IDIC01 또는 IDIC02 일 수 있다.



[0029]



[0030]

[0031] 상기 화합물 <IDIC01> 및 <IDIC02>에서 $-C_8H_{17}$ 기는 직쇄형의 옥틸기이다.

[0032] 상기 유기 반도체 화합물은 흡수 스펙트럼과 발광 스펙트럼의 스톡스 이동(Stoke's shift)이 작고, 그에 따라 엑시톤 확산 거리가 길어서 유기태양전지의 광활성층의 전자받개 물질로 사용될 수 있다. 상기 유기 반도체 화

합물을 전자받개 물질로 사용하는 경우 이중층 구조의 광활성층을 갖는 유기태양전지에서도 높은 효율을 나타낼 수 있다.

[0033] 도 1은 일 구현예에 따른 유기태양전지(100)를 개략적으로 도시한 단면도이다. 도 1을 참조하면, 유기태양전지(100)는 제1 전극(10), 제2 전극(50) 및 제1 전극(10)과 제2 전극(50) 사이의 유기층(30)을 포함한다. 유기층(30)은 광활성층(33)을 포함하고, 광활성층(33)은 전자주개 물질을 포함하는 제1 광활성층(33a) 및 전자받개 물질을 포함하는 제2 광활성층(33b)을 포함한다. 유기층(30)은 정공 수송층(31) 및 전자 수송층(35)을 더 포함할 수 있다.

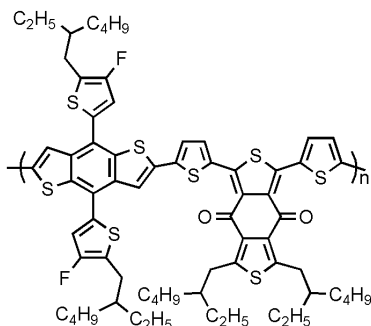
[0034] 제1 전극(10)은 애노드일 수 있다. 제1 전극(10)은 인듐 주석 산화물(Indium tin oxide; ITO), 인듐 아연 산화물(Indium zinc oxide; IZO), 불소도핑 주석 산화물(fluorine-doped tin oxide; FTO), ZnO-Ga₂O₃, ZnO-Al₂O₃, SnO₂-Sb₂O₃ 등일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0035] 제2 전극(50)은 캐소드일 수 있다. 제2 전극(50)은 알루미늄(Al), 금(Au), 은(Ag), 구리(Cu), 탄소(C), 탄소나노튜브(carbon nanotube), 전도성 고분자, 또는 이들의 조합으로 이루어진 전극일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는 제2 전극(50)은 컬러 필터 기능을 갖는 반투명 전극일 수 있다.

[0036] 광활성층(33)은 광을 받아 엑시톤(exciton)을 형성하고 이를 전자와 정공으로 분리시켜 전류를 만들어내는 광전 변환층으로서의 역할을 수행한다. 제1 광활성층(33a)과 제2 광활성층(33b)에서 생성된 엑시톤은 두 층 사이의 계면으로 확산하여 전자와 정공으로 분리된다.

[0037] 제1 광활성층(33a)은 전자주개 물질을 포함할 수 있고, 제2 광활성층(33b)은 전자받개 물질을 포함할 수 있다. 본 구현예에서 제1 광활성층(33a)과 제2 광활성층(33b)은 도 1에 도시된 바와 같이 서로 분리된 층이다. 제1 광활성층(33a)과 제2 광활성층(33b)은 이중층 헤테로정선을 형성한다. 도 2는 벌크 헤테로정선(a)과 이중층 헤테로정선(b)의 단면을 비교하여 나타낸 다이어그램이다. 도 2를 참조하면, 벌크 헤테로정선(a)은 광활성층 내에서 전자주개 물질(D)과 전자받개 물질(A)이 서로 섞여있는 반면, 이중층 헤테로정선(b)은 전자주개 물질(D)과 전자받개 물질(A)이 각각의 층으로 분리되어 있다. 즉, 본 구현예의 광활성층(33)에서는 전자받개 물질이 제1 광활성층(33a)으로 침투하거나 전자주개 물질이 제2 광활성층(33b)으로 침투하지 않는다. 이와 같은 제1 광활성층(33a)과 제2 광활성층(33b)의 분리는 제2 광활성층(33b)을 용액 공정으로 형성시 제1 광활성층(33a)의 전자주개 물질을 용해시키지 않는 선택적 용매(orthogonal solvent)를 사용함으로써 달성할 수 있다.

[0038] 제1 광활성층(33a)의 전자주개 물질은 예를 들어 불소기로 치환된 PBDB-T를 포함할 수 있다. 제1 광활성층(33a)의 전자주개 물질은 구체적으로 PBDB-T-2F를 포함할 수 있다.



<PBDB-T-2F>

[0039]

[0040] 화합물 PBDB-T-2F는 고분자로서 n은 반복 단위를 나타낸다. 화합물 PBDB-T-2F의 중량평균 분자량(Mw)이 예를 들어 50-150 kDa 일 수 있다.

[0041] 제2 광활성층(33b)의 전자받개 물질은 작은 스톡스 이동(Stoke's shift)을 갖는 물질이다. 유기 반도체 물질의 엑시톤 확산 거리(L_D)는 아래의 식 (1)에 의하여 나타내질 수 있다.

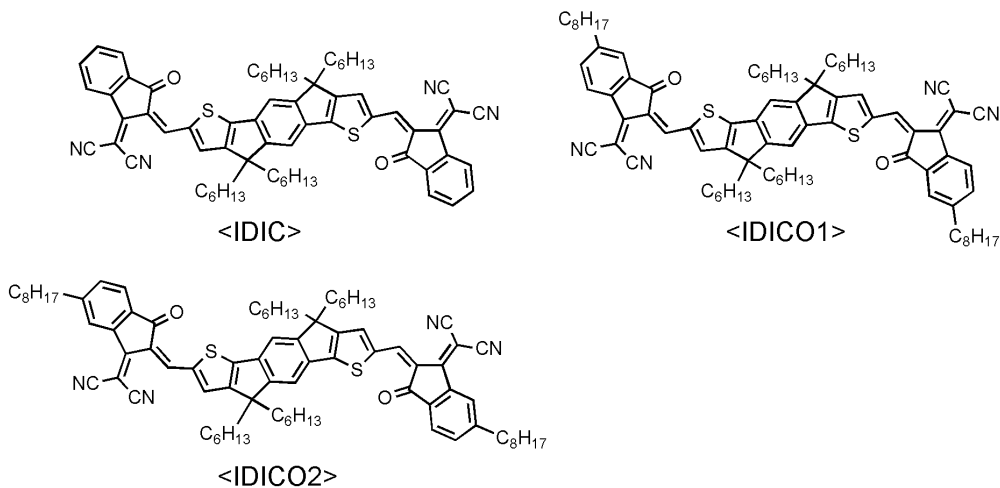
$$L_D = \sqrt{\tau_f D} = \frac{1}{d^2 \sqrt{6}} \sqrt{\frac{9 \Phi_{PL} \kappa^2 \tau_f}{128 \pi^2 n^4 \tau_0}} \quad (1)$$

[0042]

[0043] 상기 식에서 τ_f 는 광발광 수명이고, D는 엑시톤 확산 계수이고, d는 분자간 간격이고, ϕ_{PL} 은 광발광 양자 수율(PL quantum yield)이고, κ 는 배향 인자(orientation factor)이고, τ_0 은 고유 엑시톤 수명이고, n은 스펙트럼 가중치가 적용된 굴절율이고, J는 흡수 스펙트럼과 발광 스펙트럼의 오버랩이다. 스펙트럼 오버랩 J는 유기 반도체 물질의 스톡스 이동에 의하여 결정될 수 있다. 유기 반도체 물질의 흡수 스펙트럼에 대한 발광 스펙트럼의 적색 이동이 작을 경우, 즉, 스톡스 이동이 작을 경우 스펙트럼 오버랩(J)이 커진다. 그러면 유기 반도체 물질에서 발광된 빛이 다시 흡수되어 엑시톤 생성에 기여할 수 있는 자가 에너지 전이(self energy transfer)를 유도할 수 있다. 작은 스톡스 이동을 갖는 물질은 큰 스톡스 이동을 갖는 물질에 비하여 자가 에너지 전이의 기회가 많아 지기 때문에 긴 엑시톤 확산 거리(L_D)를 가질 수 있다.

[0044] 구체적으로 본 구현예에 따른 전자받개 물질은 30 내지 60 nm 범위의 스톡스 이동을 가질 수 있다. 예를 들어 본 구현예에 따른 전자받개 물질은 30 내지 50 nm 범위 또는 35 내지 50 nm의 스톡스 이동을 가질 수 있다. 전자받개 물질이 작은 스톡스 이동 값을 가짐으로써 긴 엑시톤 확산 거리를 확보할 수 있어서 본 구현예에 따른 유기태양전지는 높은 효율을 가질 수 있다.

[0045] 제2 광활성층(33b)의 전자받개 물질은 작은 스톡스 이동을 갖는 물질로서 예를 들어 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 상기 전자받개 물질은 예를 들어 상기 화학식 2 또는 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물일 수 있다. 상기 전자받개 물질은 예를 들어 화합물 IDIC, IDIC01, 또는 IDIC02를 포함할 수 있다.



[0046]

[0047] 상기 화합물 <IDIC01> 및 <IDIC02>에서 $-C_6H_{13}$ 기는 직쇄형의 헥실기이고, $-C_8H_{17}$ 기는 직쇄형의 옥틸기이다.

[0048] 제1 광활성층(33a)은 약 40 내지 50nm의 두께일 수 있다. 제2 광활성층(33b)은 약 20 내지 50nm의 두께일 수 있다.

[0049] 정공수송층(31)은 예를 들어 PEDOT:PSS를 포함할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자수송층(35)은 예를 들어 ZnO를 포함할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 정공수송층(31) 및 전자수송층(35)은 경우에 따라서 각각 생략되거나 복수의 층으로 형성될 수 있다.

[0050] 다음으로 일 구현예에 의한 유기태양전지의 제조 방법을 상세히 설명한다.

[0051] 기판 위에 제1 전극을 형성한다. 기판은 투명 기판일 수 있으며, 유리기판 또는 플라스틱 기판일 수 있다. 제1 전극은 애노드일 수 있다. 제1 전극은 인듐 주석 산화물(Indium tin oxide; ITO), 인듐 아연 산화물(Indium zinc oxide; IZO), 불소도핑 주석 산화물(fluorine-doped tin oxide; FTO), $ZnO-Ga_2O_3$, $ZnO-Al_2O_3$, $SnO_2-Sb_2O_3$ 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 제1 전극은 예를 들어 스퍼터, 열증착법 등의 방법에 의하여 형성할 수 있다.

[0052] 제1 전극 위에 정공 수송층을 형성할 수 있다. 정공 수송층은 예를 들어 PEDOT:PSS를 포함할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 정공 수송층은 예를 들어 스핀 코팅, 스크린 프린팅, 잉크젯 등의 방법에 의하여 형성할 수 있다.

[0053] 정공 수송층 위에 광활성층을 형성한다. 광활성층은 전자주개 물질을 포함하는 제1 광활성층을 형성한 후 전자받개 물질을 포함하는 제2 광활성층을 형성할 수 있다. 전자주개 물질은 예를 들어 PBDB-T-2F를 포함할 수

있다. 전자받개 물질은 적은 스톱스 이동을 갖는 물질, 예를 들어 10 내지 100 nm 범위의 스톱스 이동을 갖는 물질을 사용할 수 있다. 전자받개 물질은 예를 들어 IDIC, IDIC01, 또는 IDIC02를 포함할 수 있다. 전자받개 물질에 대하여 도 1과 관련한 앞의 설명을 더 참조한다.

[0054] 광활성층은 용액 공정에 의하여 형성할 수 있다. 전자주개 물질을 제1 용매에 용해시킨 제1 용액을 정공 수송층 위에 스핀 코팅, 스크린 프린팅, 잉크젯 등의 방법에 의하여 도포하여 제1 광활성층을 형성할 수 있다. 이때 제1 용매로서 클로로 포름(CF), 디클로로 벤젠(DCB), 클로로 벤젠(CB), 1,8-옥탄디티올(ODT) 또는 이들의 조합을 사용할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자받개 물질을 제2 용매에 용해시킨 제2 용액을 제1 광활성층 위에 스핀 코팅, 스크린 프린팅, 잉크젯 등의 방법에 의하여 도포하여 제2 광활성층을 형성할 수 있다. 제2 용매는 제1 광활성층의 전자주개 물질을 용해시키지 못하는 물질을 사용한다. 제2 용매로서 예를 들어 디클로로메탄(DCM)을 사용할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 제1 광활성층은 약 40 내지 50nm의 두께로 형성할 수 있다. 제2 광활성층은 약 20 내지 50nm의 두께로 형성할 수 있다.

[0055] 제2 광활성층 형성시 사용한 제2 용매가 제2 광활성층 아래의 제1 광활성층을 용해시키지 않는 선택적 용매이므로 제1 광활성층과 제2 광활성층은 2차원 면을 경계로 한 분리된 층을 유지할 수 있다.

[0056] 광활성층 위에 전자 수송층을 형성할 수 있다. 전자 수송층은 예를 들어 ZnO를 포함할 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층은 예를 들어 스핀 코팅, 스크린 프린팅, 잉크젯 등의 방법에 의하여 형성할 수 있다.

[0057] 전자 수송층 위에 제2 전극을 형성한다. 제2 전극은 캐소드일 수 있다. 제2 전극은 알루미늄(Al), 금(Au), 은(Ag), 구리(Cu), 탄소(C), 탄소나노튜브(carbon nanotube), 전도성 고분자, 또는 이들의 조합으로 형성할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 제2 전극은 예를 들어 스퍼터 또는 열증착법에 의하여 형성할 수 있다. 선택적으로 제2 전극을 컬러 필터 기능을 갖는 반투명 전극으로 형성할 수 있다.

[0058] 특성 측정

[0059] 측정방법

[0060] 흡수 스펙트럼: Carry 5000 (Agilent) UV-VIS 스펙트로미터를 사용하여 흡수 스펙트럼을 측정하였다.

[0061] 발광 스펙트럼: Cary Eclipse (Varian) 형광 강도 측정기를 사용하여 발광 스펙트럼을 측정하였다.

[0062] GIWAXS 측정: 포항 가속기 연구소의 PLS-II 9A 빔 라인을 이용하여 GIWAXS 측정을 수행하였다.

[0063] TEM 이미지: JEOL JEM-2100 투과 전자 현미경을 사용하여 200kV에서 TEM 이미지를 얻었다.

[0064] 전류 밀도 대 전압(J-V): 소자의 전류 밀도-전압(J-V) 특성을 N₂로 채워진 글러브 박스에서 Keithley 2635A 계측기 및 솔라 시뮬레이터를 사용하여 얻었다. 측정된 소자의 면적은 4 mm² 이며 사용된 광의 세기는 100 mW/cm² 이다.

[0065] 개방 전압의 광 강도 의존성: 개방 전압(V_{oc})의 광 강도 의존성을 중성 밀도 필터(neutral density filter)를 사용하여 측정하였다.

[0066] 외부 양자 효율(EQE): 소자의 EQE를 대기 조건 하에서 제논(Xe) 램프의 단색광을 사용하는 PV 측정 QE 시스템을 사용하여 측정하였다. 강도를 표준 Si 광다이오드에 대해 보정하였다.

[0067] 시료

[0068] 시료 1 (PBDB-T-2F 단일층)

[0069] PBDB-T-2F를 클로로 벤젠(CB): 1,8-옥탄디티올(ODT) (99:1 부피비)에 10 mg/ml 의 농도로 용해시켰다. 이 PBDB-T-2F 용액을 유리기재 위에 스핀 코팅하고, N₂ 가스로 채워진 글러브 박스 내에서 100℃에서 5분 동안 어닐링하여 40-50 nm 두께의 PBDB-T-2F 층을 형성하였다.

[0070] 시료 2 (IDIC 단일층)

[0071] IDIC를 디클로로메탄(DCM)에 6 mg/ml 의 농도로 용해시켰다. IDIC 용액을 유리기재 위에 스핀 코팅하고, N₂ 가스로 채워진 글러브 박스 내에서 20 nm 두께의 IDIC 층을 형성하였다.

[0072] 시료 3 (IDIC01 단일층)

- [0073] IDIC 대신 IDIC01을 사용한 것을 제외하고, 시료 2와 동일한 방법을 사용하여 IDIC01 단일층을 형성하였다.
- [0074] 시료 4 (IDIC02 단일층)
- [0075] IDIC 대신 IDIC02를 사용한 것을 제외하고, 시료 2와 동일한 방법을 사용하여 IDIC02 단일층을 형성하였다.
- [0076] 시료 5 (NIDCS-HO 단일층)
- [0077] IDIC 대신 NIDCS-HO 를 사용한 것을 제외하고, 시료 2와 동일한 방법을 사용하여 NIDCS-HO 단일층을 형성하였다.
- [0078] 스펙트럼 오버랩 측정
- [0079] 도 3a 내지 도 3d는 각각 시료 2 내지 시료 5의 흡수 스펙트럼 및 발광 스펙트럼의 오버랩을 나타낸 그래프이다. 도 3e는 도 3a 내지 도 3d의 스펙트럼의 오버랩 면적을 파장에 따라 도시한 그래프이고, 도 3f는 흡수 계수 그래프이다.
- [0080] 도 3a 내지 도 3d를 참조하면, 시료2(IDIC), 시료3(IDIC01) 및 시료4(IDIC02)는 각각 48, 38 및 40nm의 작은 스톡스 이동(Stoke's Shift)를 갖는 반면, 시료5(NIDCS-HO)는 133nm의 큰 스톡스 이동을 갖는다. 도 3e를 참조하면, 스톡스 이동이 작을수록 큰 스펙트럼 오버랩을 갖는 것으로 나타난다. 앞의 식 (1)에 따르면 스펙트럼 오버랩이 크면 J 값이 커지고, 따라서 엑시톤 확산 길이(L_0)가 길어진다. 따라서 엑시톤 확산 길이(L_0)는 스톡스 이동 값이 작은 순서인 IDIC01, IDIC02, IDIC 및 NIDCS-HO 의 순서로 커질 것이 예상된다.
- [0081] 도 4는 PBDB-T-2F, IDIC, IDIC01, IDIC02 및 NIDCS-HO의 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 보여주는 다이어그램이다. 도 4를 참조하면, 전자 주개 및 받개 물질이 엑시톤을 분리하기에 적절하도록 에너지 레벨의 차이를 갖는다.
- [0082] 시료 6 (PBDB-T-2F/ IDIC 이중층)
- [0083] PBDB-T-2F를 클로로 벤젠(CB): 1,8-옥탄디올(ODT) (99:1 부피비)에 10 mg/ml 의 농도로 용해시켰다. IDIC를 디클로로메탄(DCM)에 6 mg/ml 의 농도로 용해시켰다. PBDB-T-2F 용액을 유리기판 위에 스핀 코팅하고, N₂ 가스로 채워진 글러브 박스 내에서 100℃에서 5분 동안 어닐링하여 40-50 nm 의 PBDB-T-2F 층을 형성하였다. IDIC 용액을 PBDB-T-2F 층 위에 스핀 코팅하고, N₂ 가스로 채워진 글러브 박스 내에서 20 nm 의 IDIC 층을 형성하여 PBDB-T-2F/ IDIC 이중층 구조를 형성하였다.
- [0084] 시료 7 (PBDB-T-2F/ IDIC01 이중층)
- [0085] IDIC 대신 IDIC01을 사용한 것을 제외하고, 시료 6과 동일한 방법을 사용하여 PBDB-T-2F / IDIC01 이중층 구조를 형성하였다.
- [0086] 시료 8 (PBDB-T-2F/ IDIC02 이중층)
- [0087] IDIC 대신 IDIC02를 사용한 것을 제외하고, 시료 6과 동일한 방법을 사용하여 PBDB-T-2F / IDIC02 이중층 구조를 형성하였다.
- [0088] 시료 9 (PBDB-T-2F/ NIDCS-HO 이중층)
- [0089] IDIC 대신 NIDCS-HO를 사용한 것을 제외하고, 시료 6과 동일한 방법을 사용하여 PBDB-T-2F / NIDCS-HO 이중층 구조를 형성하였다.
- [0090] X선 데이터
- [0091] 도 5 내지 도 8은 각각 PBDB-T-2F/IDIC, PBDB-T-2F/IDIC01, PBDB-T-2F/IDIC02, PBDB-T-2F/NIDCS-HO 이중층의 모폴로지를 확인하기 위한 시료 1 내지 9의 스침각 X선 산란(grazing incidence wide angle X-ray scattering, GIWAXS)의 이미지이다. 도 5 내지 도 8의 (a)는 PBDB-T-2F 단일층의 스침각 X선 산란 이미지이고, 도 5 내지 도 8의 (b)는 각각 IDIC0, IDIC01, IDIC02, NIDCS-HO 단일층의 스침각 X선 산란 이미지이다. 이때 X선의 입사각은 0.12° 내지 0.13° 이다.
- [0092] 도 5 내지 도 8의 (c) 및 (d)는 각각 PBDB-T-2F/IDIC, PBDB-T-2F/IDIC01, PBDB-T-2F/IDIC02, PBDB-T-2F/NIDCS-HO 이중층에 대한 높은 입사각(0.12 내지 0.135)과 낮은 입사각(0.06 내지 0.085)에서 X선 산란 이미

지이다. 높은 입사각에서는 X선이 시료의 아래층까지 관통하므로, 이중층에서 아래층 및 위층 모두에 관한 정보를 알 수 있다. 한편, 낮은 입사각에서는 X선이 시료의 위층만 투과할 수 있으므로, 이중층 중 위층에 관한 정보를 알 수 있다.

- [0093] 도 5 내지 도 8을 참조하면, 도 5(c) 내지 도 8(c)의 높은 입사각 이미지는 이중층을 구성하는 PBDB-T-2F/전자받개 물질에서 나오는 결정 정보를 함께 보여준다. 반면, 도 5(d) 내지 도 8(d)의 낮은 입사각 이미지는 전자받개 단일 물질의 결정 정보와 동일한 결과를 보여준다. 이로부터 시료 6 내지 시료 9의 이중층의 위층이 각각 IDIC, IDIC01, IDIC02, NIDCS-HO로 이루어져 있음을 알 수 있다.
- [0094] 유기태양전지 소자
- [0095] 실시예 1 (PBDB-T-2F/IDIC 2중층)
- [0096] ITO 전극이 패터닝된 기판(ITO 기판)을 순차적으로 증류수, 아세톤 및 이소프로판올로 초음파 처리하여 세정하고, 건조시켰다. ITO 기판 위에 PEDOT:PSS 층을 스핀 코팅하고 공기 중 140℃에서 10분 동안 어닐링하여 40 nm의 PEDOT:PSS 층을 형성하였다.
- [0097] PBDB-T-2F를 클로로 벤젠(CB): 1,8-옥탄디티올(ODT) (99:1 부피비)에 10 mg/ml의 농도로 용해시켰다. IDIC를 디클로로메탄(DCM)에 6 mg/ml의 농도로 용해시켰다. PBDB-T-2F 용액을 PEDOT:PSS 층 위에 스핀 코팅하고, N₂ 가스로 채워진 글러브 박스 내에서 100℃에서 5분 동안 어닐링하여 50 nm의 PBDB-T-2F 층을 형성하였다. IDIC 용액을 PBDB-T-2F 층 위에 스핀 코팅하여 20 nm의 IDIC 층을 형성하였다.
- [0098] 메탄올에 분산된 ZnO 나노입자를 IDIC 층 위에 5 nm의 두께로 스핀 코팅하였다. ZnO 위에 Ag 전극층을 열증발법에 의하여 100 nm의 두께로 형성하였다. Ag 전극층에 의하여 활성 영역이 13.5 mm²으로 정의되는 유기태양전지 소자를 제작하였다.
- [0099] 유리기판/ ITO 150 nm/ PEDOT:PSS 40 nm/ PBDB-T-2F 50 nm/ IDIC 30 nm/ ZnO 5 nm/ Ag 100 nm
- [0100] 실시예 2 (PBDB-T-2F/IDIC01 2중층)
- [0101] IDIC 대신 IDIC01를 사용한 것을 제외하고, 실시예 1과 동일한 방법을 사용하여 유기태양전지 소자를 제작하였다.
- [0102] 유리기판/ ITO 150 nm/ PEDOT:PSS 40 nm/ PBDB-T-2F 50 nm/ IDIC01 20 nm/ ZnO 5 nm/ Ag 100 nm
- [0103] 실시예 3 (PBDB-T-2F/IDIC02 2중층)
- [0104] IDIC 대신 IDIC02를 사용한 것을 제외하고, 실시예 1과 동일한 방법을 사용하여 유기태양전지 소자를 제작하였다.
- [0105] 유리기판/ ITO 150 nm/ PEDOT:PSS 40 nm/ PBDB-T-2F 50 nm/ IDIC02 18 nm/ ZnO 5 nm/ Ag 100 nm
- [0106] 비교예 1 (PBDB-T-2F/NIDCS-HO 2중층)
- [0107] IDIC 대신 NIDCS-HO를 사용한 것을 제외하고, 실시예 1과 동일한 방법을 사용하여 유기태양전지 소자를 제작하였다.
- [0108] 유리기판/ ITO 150 nm/ PEDOT:PSS 40 nm/ PBDB-T-2F 50 nm/ NIDCS-HO 33 nm/ ZnO 5 nm/ Ag 100 nm
- [0109] 비교예 2 (PBDB-T-2F/IDIC 벌크헥테로정선)
- [0110] ITO 전극이 패터닝된 기판(ITO 기판)을 순차적으로 증류수, 아세톤 및 이소프로판올로 초음파 처리하여 세정하고, 건조시켰다. ITO 기판 위에 PEDOT:PSS 층을 스핀 코팅하고 공기 중 140℃에서 10분 동안 어닐링하여 40 nm의 PEDOT:PSS 층을 형성하였다.
- [0111] PBDB-T-2F:IDIC (1:1 w/w)를 클로로 벤젠(CB): 1,8-옥탄디티올(ODT) (99:1 부피비)에 10 mg/ml의 농도로 용해시켰다. PBDB-T-2F:IDIC 용액을 PEDOT:PSS 층 위에 스핀 코팅하고, N₂ 가스로 채워진 글러브 박스 내에서 100℃에서 5분 동안 어닐링하여 113 nm의 PBDB-T-2F:IDIC 층을 형성하였다.
- [0112] 메탄올에 분산된 ZnO 나노입자를 IDIC 층 위에 5 nm의 두께로 스핀 코팅하였다. ZnO 위에 Ag 전극층을 열증발법에 의하여 100 nm의 두께로 형성하였다. Ag 전극층에 의하여 활성 영역이 13.5 mm²으로 정의되는 유기태양전

지 소자를 제작하였다.

[0113] 유리기판/ ITO 150 nm/ PEDOT:PSS 40 nm/ PBDB-T-2F:IDIC 113 nm/ ZnO 5 nm/ Ag 100 nm

[0114] 비교예 3 (PBDB-T-2F/IDIC01 벌크헥테로정션)

[0115] PBDB-T-2F:IDIC01 (1:1 w/w)를 1,2-다이클로로 벤젠 (1,2-dichlorobenzene)에 녹인 후, 비교예 2와 동일한 방법을 사용하여 유기태양전지 소자를 제작하였다.

[0116] 비교예 4 (PBDB-T-2F/IDIC02 벌크헥테로정션)

[0117] PBDB-T-2F:IDIC02 (1:1 w/w)를 클로로 벤젠에 녹인 후, 비교예 2와 동일한 방법을 사용하여 유기태양전지 소자를 제작하였다.

[0118] 비교예 5 (PBDB-T-2F/ NIDCS-HO 벌크헥테로정션)

[0119] IDIC02 대신 NIDCS-HO를 사용한 것을 제외하고, 비교예 4와 동일한 방법을 사용하여 유기태양전지 소자를 제작하였다.

[0120] 단면 프로파일

[0121] 도 9는 실시예 1의 소자의 TEM(transmission electron microscopy) 사진이다. 도 9를 참조하면, 실시예 1의 소자에서 IDIC 층이 PBDB-T-2F층과 분리되어 평평하게 형성되어 있다. 이는 이중층 시료에 대하여 스침각 X선 산란 이미지에서 확인한 바와 일치한다. 이러한 이중층은 IDIC 층 형성시 선택적 용매(orthogonal solvent)를 사용함으로써 PBDB-T-2F층에 영향을 미치지 않기 때문에 가능한 것으로 여겨진다.

[0122] 엑시톤 확산 거리(L_D)

[0123] 엑시톤-엑시톤 소멸(exiton-exiton annihilation) 방법을 통하여 PBDB-T-2F, IDIC, IDIC01, IDIC02 및 NIDCS-HO의 엑시톤 확산거리(L_D)를 측정한 값을 아래의 표 1에 나타내었다. 표 1에 엑시톤 확산 계수(D)와 스톡스 이동 값을 함께 나타내었다.

표 1

	PBDB-T-2F	IDIC	IDIC01	IDIC02	NIDCS-HO
$D [cm^2 s^{-1}]$	7.2×10^{-2}	1×10^{-1}	8×10^{-2}	8.9×10^{-2}	1.1×10^{-3}
$L_D [nm]$	35.8	35	20.3	23.5	8.68
스톡스 이동[nm]	55	48	38	40	133

[0125] 표 1을 참조하면, NIDCS-HO에 비하여 IDIC, IDIC01 및 IDIC02의 엑시톤 확산거리(L_D)가 2배 이상 크며, 또한 스톡스 이동 값이 작을수록 엑시톤 확산거리(L_D)가 크게 나타난다.

[0126] 소자 데이터

[0127] 도 10 및 도 11은 각각 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지 소자의 전류 밀도 대 전압의 그래프 및 파장에 따른 외부 양자 효율(EQE)의 그래프이다. 도 12 및 도 13은 각각 비교예 2 내지 5의 유기태양전지 소자의 전류 밀도 대 전압의 그래프 및 파장에 따른 외부 양자 효율(EQE)의 그래프이다. 도 10 내지 도 13의 그래프로부터의 유기태양전지의 소자 파라미터를 표 2에 나타내었다.

표 2

	전자받개 물질	J_{sc} [mA cm ⁻²]	V_{oc} [V]	FF	PCE [%] ^{a)}
실시예 1	IDIC	14.1	0.96	0.71	9.59 (9.30 ± 0.17)
실시예 2	IDIC01	13.6	1.02	0.69	9.51 (9.14 ± 0.28)

실시예 3	IDIC02	13.7	1.01	0.66	9.15 (8.93 ± 0.13)
비교예 1	NIDCS-HO	6.46	1.13	0.35	2.57 (2.32 ± 0.20)
비교예 2	IDIC	14.4	0.95	0.72	9.87 (9.62 ± 0.15)
비교예 3	IDIC01	11.8	1.01	0.64	7.57 (7.33 ± 0.17)
비교예 4	IDIC02	13.8	1.00	0.66	9.19 (8.70 ± 0.28)
비교예 5	NIDCS-HO	6.35	1.23	0.61	4.78 (4.29 ± 0.22)

^{a)} 각 실시예 및 비교예의 소자 10개에 대하여 측정된 PCE의 평균 및 표준 편차이다.

도 10, 도 11 및 표 2를 참조하면, IDIC 및 그 유도체를 사용하는 이중층 구조를 갖는 실시예 1 내지 3의 유기 태양전지는 모두 전력변환효율(PCE)이 9% 대의 값을 갖는다. 도 12, 도 13 및 표 1을 참조하면, 동일한 물질에 대한 벌크 헤테로 구조를 갖는 비교예 2 내지 4의 유기태양전지의 전력변환효율(PCE) 역시 9% 또는 7% 대의 값을 나타내어 본 구현예의 이중층 구조가 헤테로정선 구조에 필적하는 전력변환효율을 갖는 것을 알 수 있다.

또한, 실시예 1 내지 3의 유기태양전지의 단락 전류 밀도(J_{sc})와 채움율(FF) 역시 같은 물질을 사용하는 비교예 3 내지 5의 유기태양전지의 단락 전류 밀도(J_{sc})와 채움율과 유사한 값을 갖는다. 반면, NIDCS-HO를 사용하는 비교예 2 및 비교예 7은 전력변환효율(PCE), 단락 전류 밀도(J_{sc}) 및 채움율 모두 가장 낮은 값을 갖는다. 이는 표 1에 나타는 바와 같이 높은 스톡스 이동값을 갖는 NIDCS-HO의 엑시톤 확산 거리(L_0)가 짧기 때문으로 여겨진다.

도 14 및 도 15는 각각 실시예 1 내지 3 및 비교예 1 내지 7의 유기태양전지 소자에서 같은 물질에 대하여 이중층 구조 대 헤테로정선 구조의 채움율 및 전력변환효율(PCE)의 비를 나타낸 그래프이다. 도 14 및 15를 참조하면, 실시예 2(IDIC01) 및 실시예 3(IDIC02)의 유기태양전지 소자가 전력변환효율(PCE)의 비와 채움율(FF) 비가 1 이상으로 가장 높다. 다음으로 전력변환효율(PCE)의 비와 채움율(FF) 비가 실시예 1(IDIC) 및 비교예 2(NIDCS-HO)의 순서로 낮아지며, 비교예 2(NIDCS-HO)가 0.5 대의 가장 낮은 값을 갖는다. 이로부터 동일한 물질에 대하여 이중층 구조 대 벌크헤테로 구조의 전력변환효율(PCE)과 채움율(FF)의 비가 큰 순서는 스톡스 이동값이 작은 순서와 일치하는 것으로 나타난다. 이는 광활성층 내의 엑시톤의 확산이 스톡스 이동이 작을수록 효과적으로 일어나는 것을 뒷받침한다.

도 16은 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지의 개방 전압(V_{oc}) 대 광강도의 그래프이다. 도 16을 참조하면, 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 그래프에서 도출된 kT/q 의 계수는 0.98-1.11로서 모두 1에 가까운 값을 갖는다. kT/q 의 계수가 1에 가까울수록 트랩에 의한 전하 운반자의 재결합이 적음을 의미한다.

도 17 내지 도 20은 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지 소자의 조사한 광의 강도에 따른 정규화된 광전류 밀도 대 전압의 그래프이다. 도 17 내지 도 20의 그래프에서 광전류 밀도(J_{ph})는 조명 하에서 측정된 전류 밀도(J_{total})와 암흑 조건에서 측정된 전류 밀도(J_{dark})의 차이로서 광에 의한 전류 밀도만을 나타내고, 전압(V)은 소자에 인가한 전압을 나타낸다. 도 17 내지 도 20의 그래프에서 광전류 밀도(J_{ph})를 역 포화(reverse saturation) 광전류($J_{ph sat}$)로 정규화하였으며, 이는 전하 수집 확률($P_c(I, V) = J_{ph} / J_{ph sat}$)을 나타낼 수 있다. 도 17 내지 도 20을 참조하면, 실시예 1 내지 3의 소자의 전하 수집 확률($P_c(I, V)$)의 커브는 조사한 광의 세기에 관계없이 거의 동일하며, -0.5V에서 V_{MPP} 지점까지 포화상태를 잘 유지하고 있다. 이로부터 실시예 1 내지 3의 IDIC, IDIC01 및 IDIC02에 의하여 전하가 재결합 없이 전극으로 효율적으로 추출됨을 알 수 있다. 반면, NIDCS-HO를 사용한 비교예 1의 경우 전하 수집 확률($P_c(I, V)$)의 커브는 조사된 광의 세기에 따라서 퍼져 있으며, 이는 NIDCS-HO에서는 짧은 엑시톤 확산 거리(LD)로 인하여 전하의 재결합이 일어나기 때문으로 여겨진다.

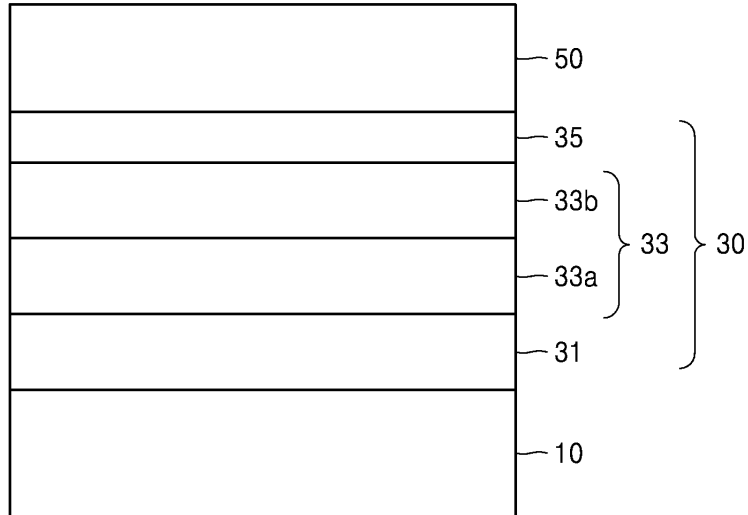
도 21은 실시예 1 내지 3 및 비교예 1의 유기태양전지의 광전류 밀도(J_{ph}) 대 유효 전압(V_{eff})의 그래프이다. 유효 전압(V_{eff})은 광전류 밀도(J_{ph})가 0일때 전압에서 인가 전압을 뺀 값을 의미한다. 도 21의 그래프에서 실시예

1 내지 3의 유기태양전지가 비교예 1의 유기태양전지에 비하여 더 빠르고 완전한 광전류의 포화를 보여준다. 이러한 실시예 1 내지 3의 광전류의 포화는 전자와 정공이 분리되고 전극에 수집되는 효율이 우수함을 보여준다.

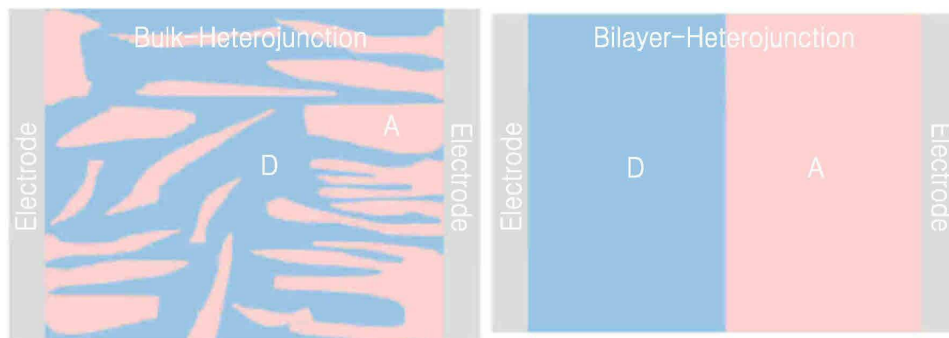
[0136]

도면

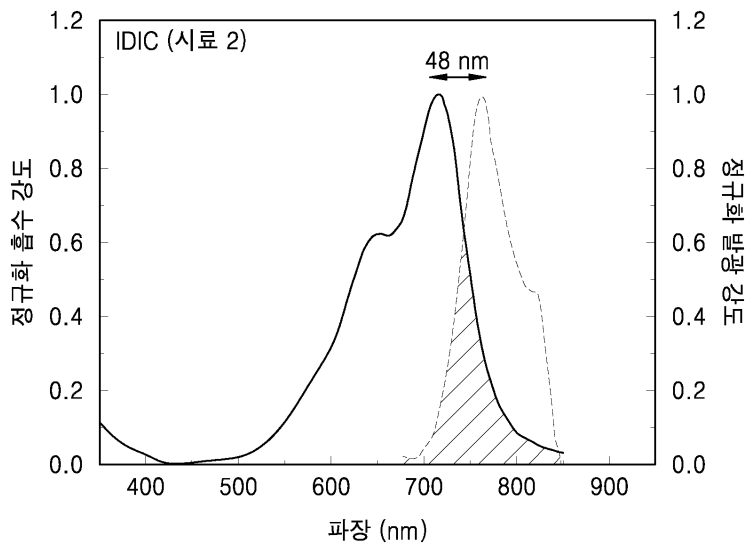
도면1



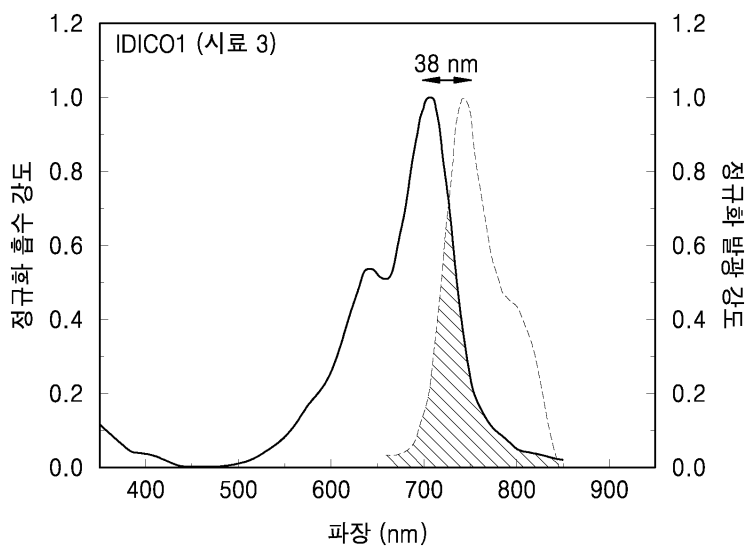
도면2



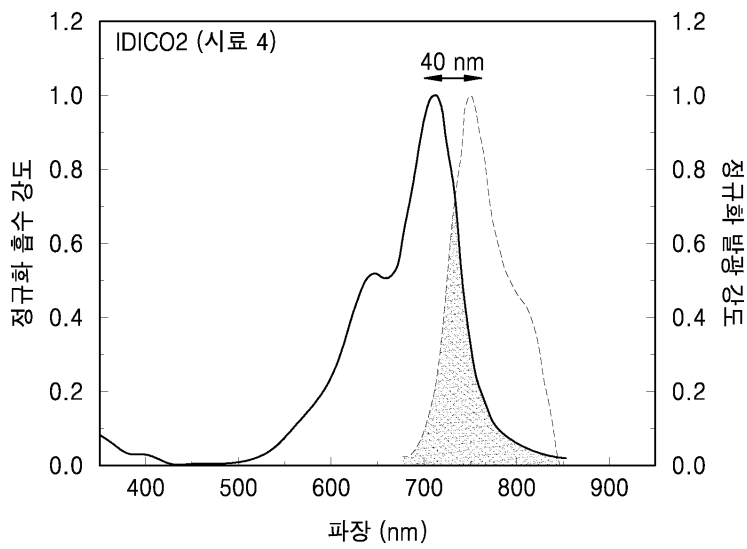
도면3a



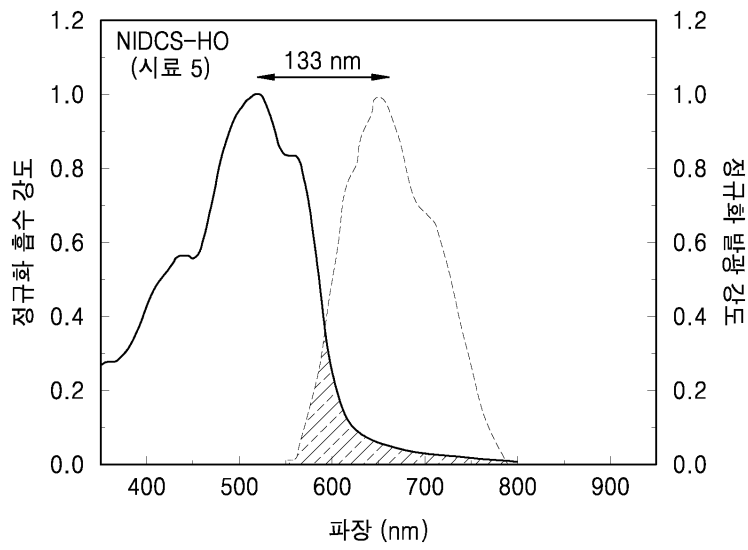
도면3b



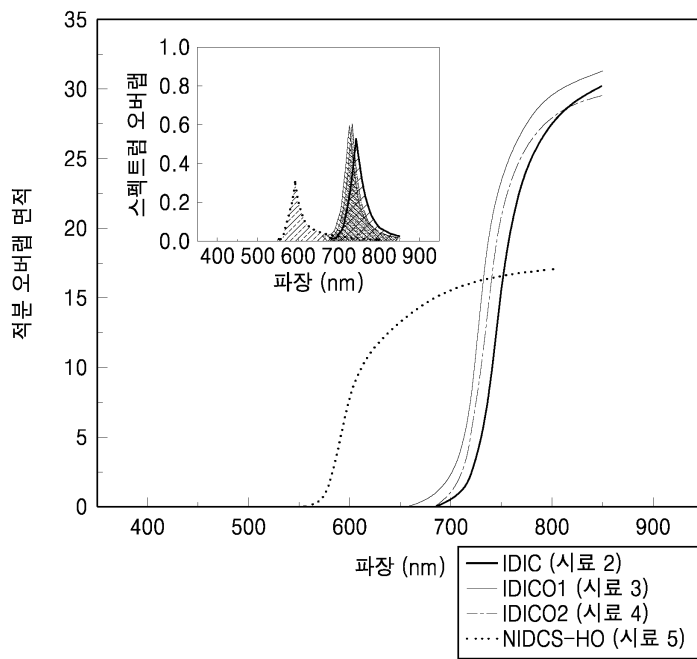
도면3c



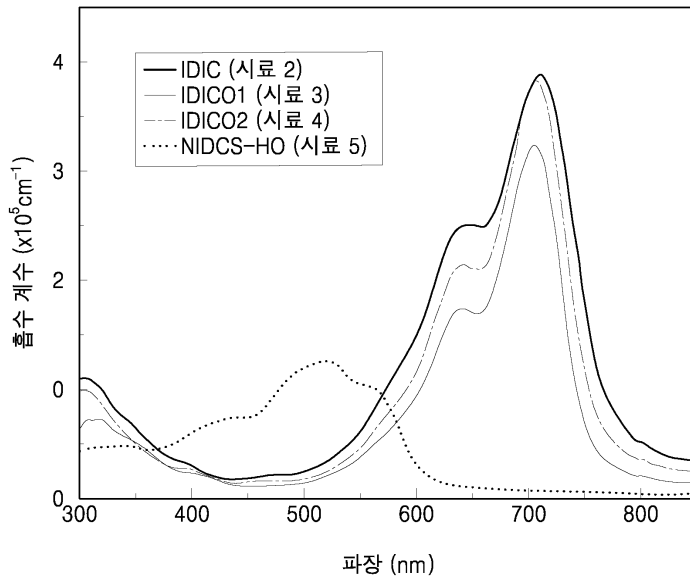
도면3d



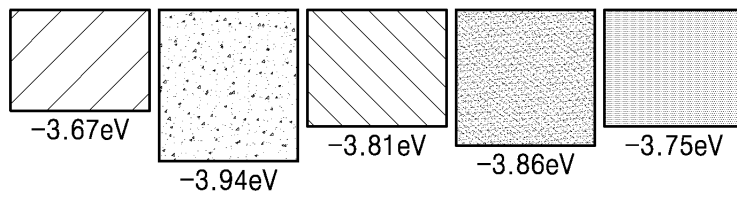
도면3e



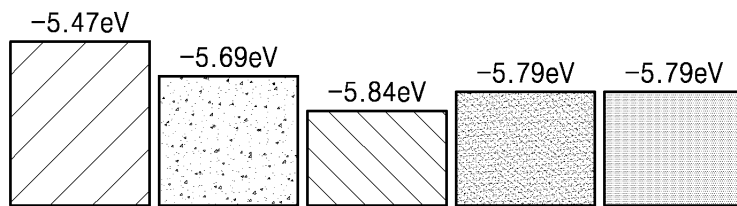
도면3f



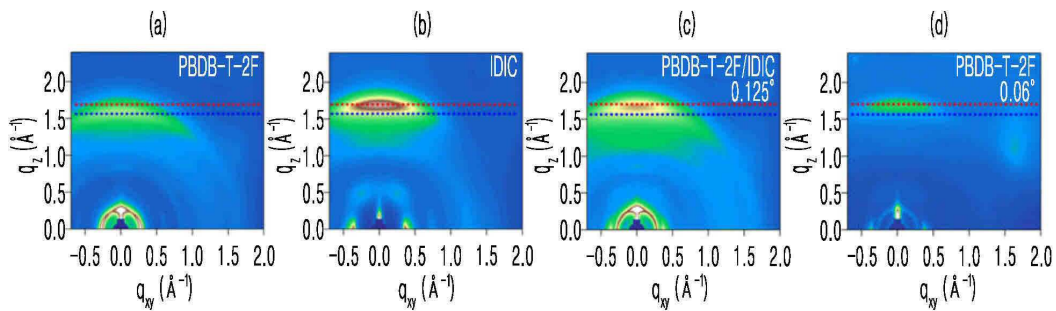
도면4



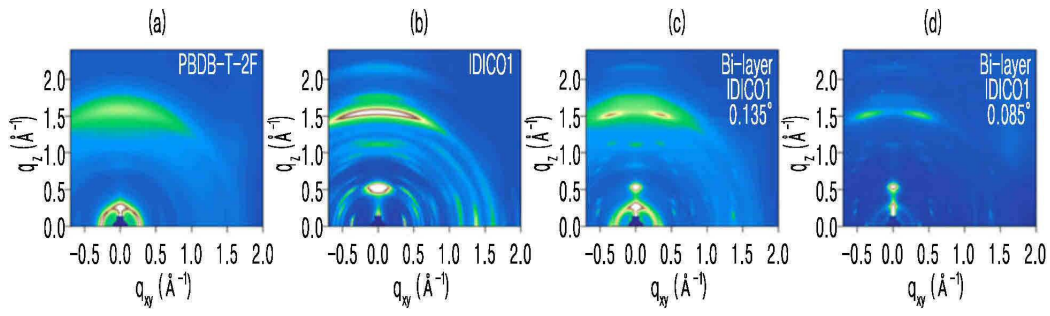
PBDB-T-2F IDIC IDIC01 IDIC02 NIDCS-HO



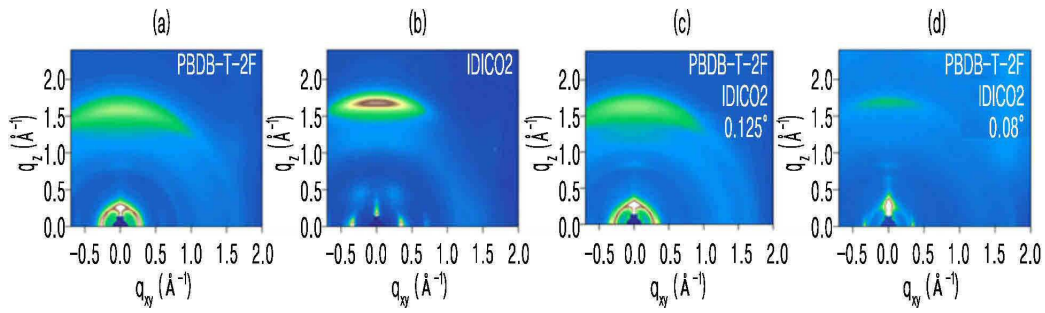
도면5



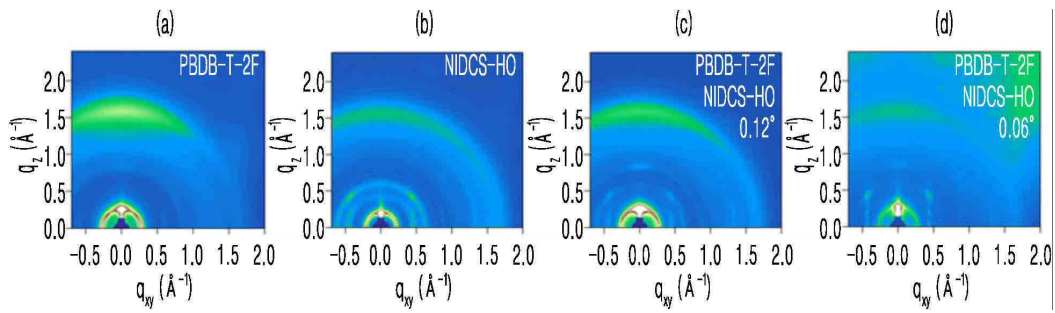
도면6



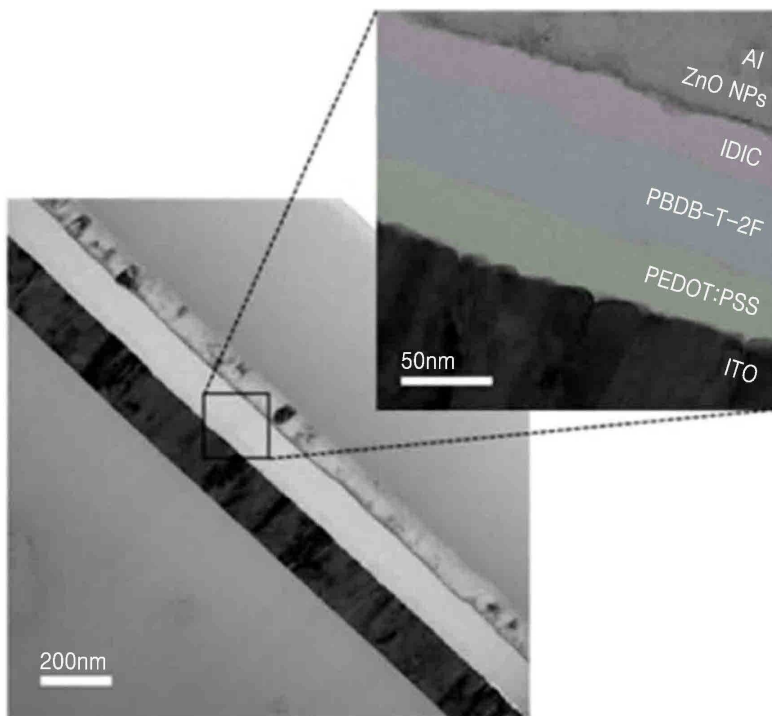
도면7



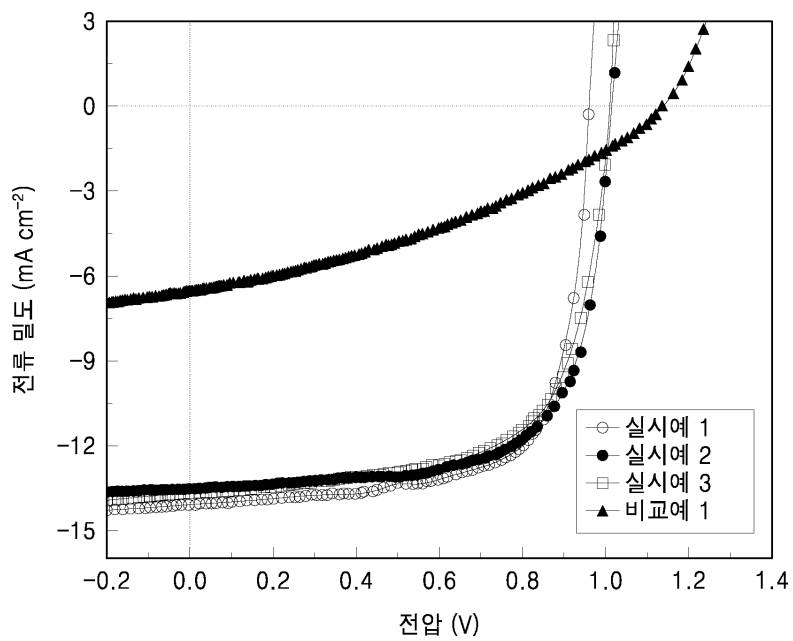
도면8



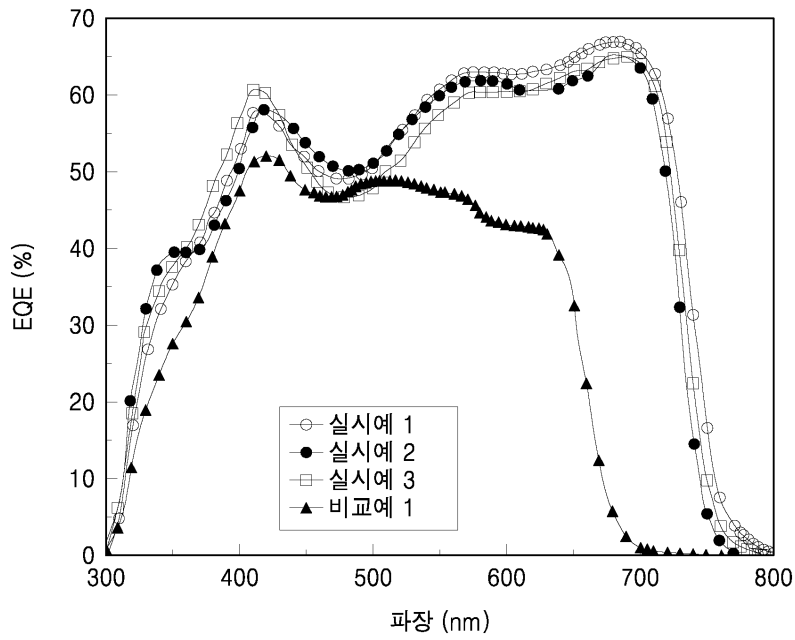
도면9



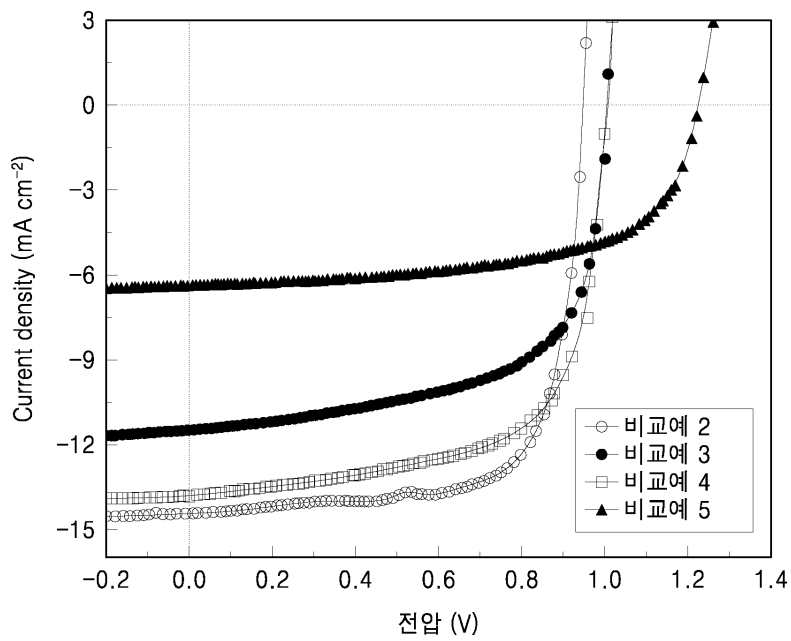
도면10



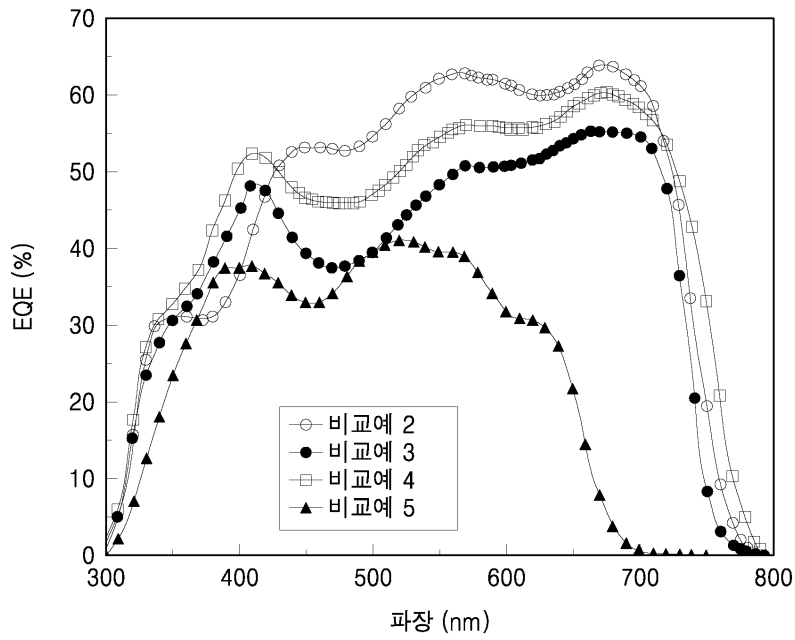
도면11



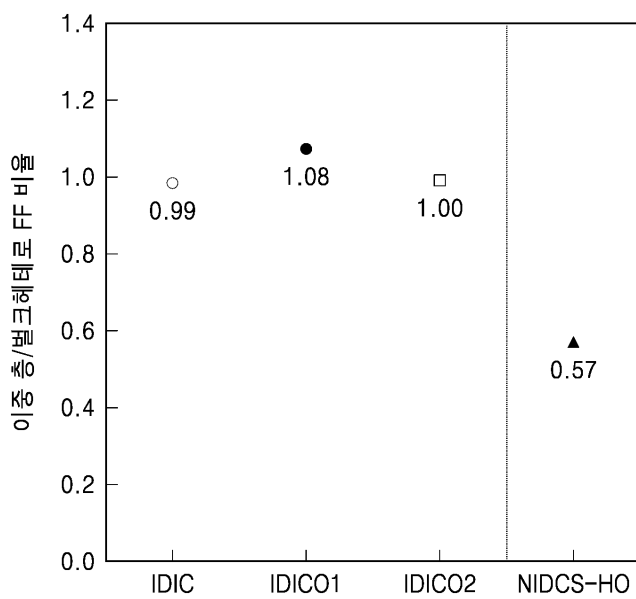
도면12



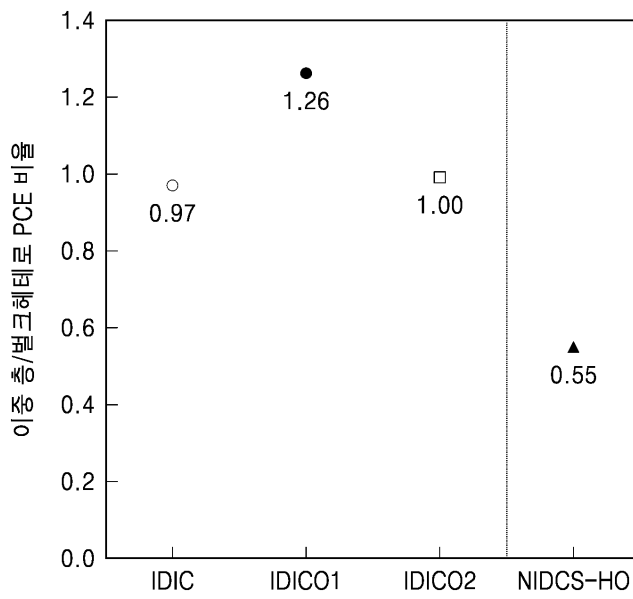
도면13



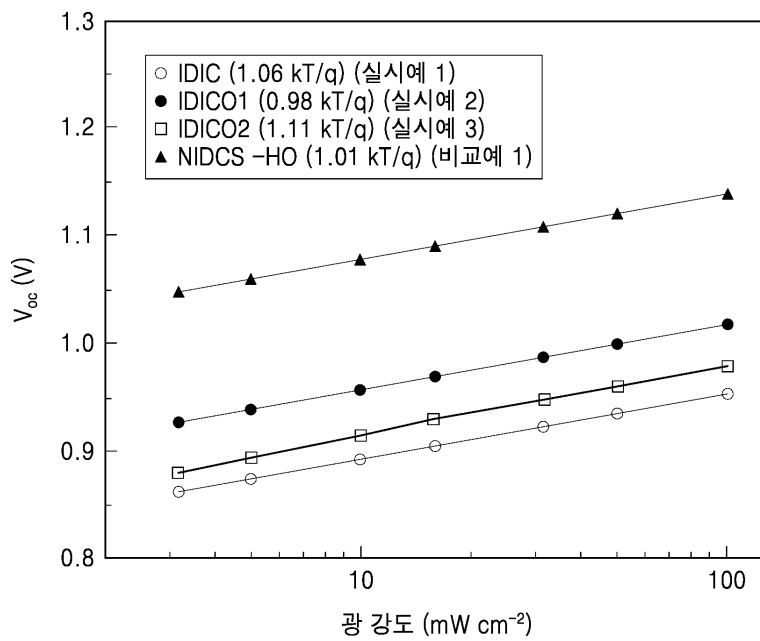
도면14



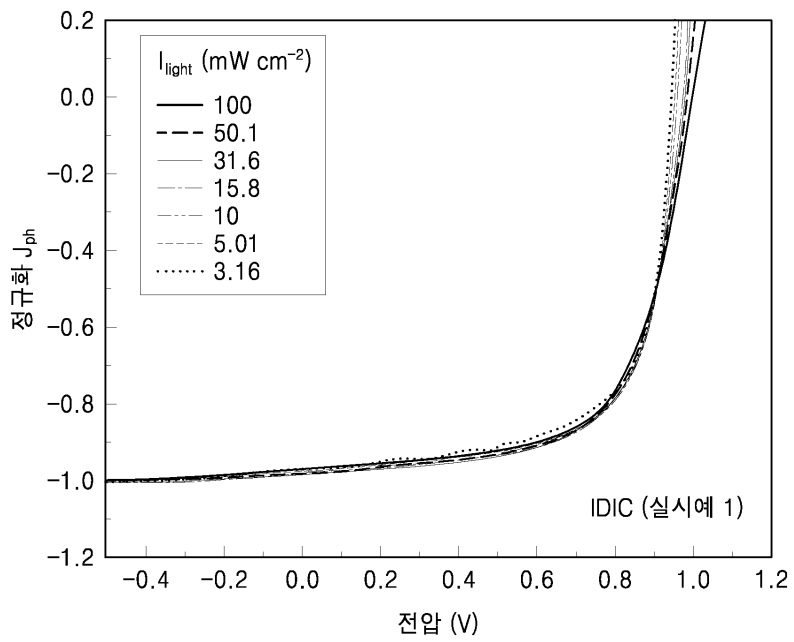
도면15



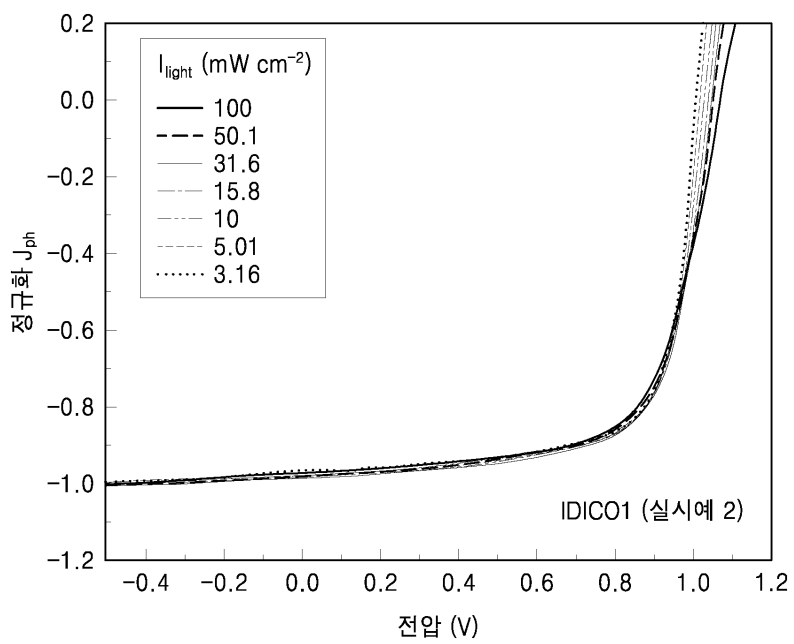
도면16



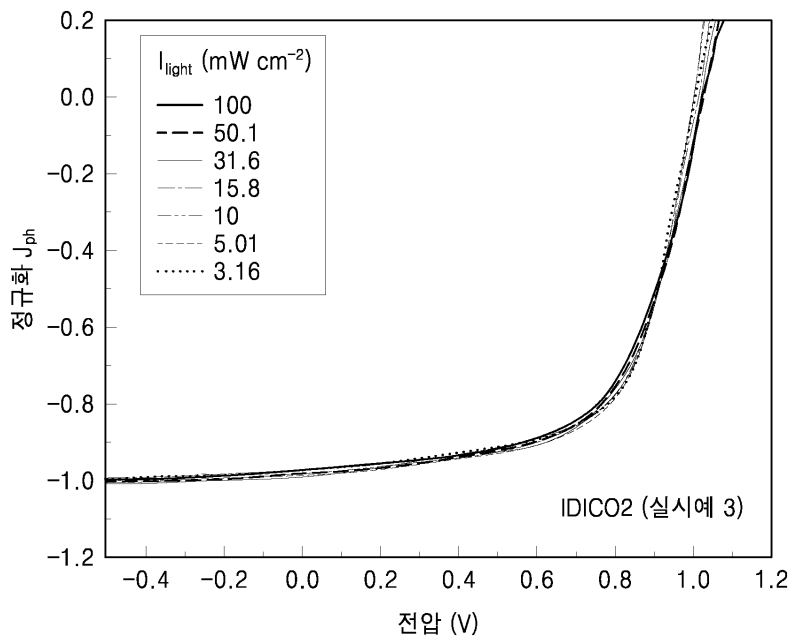
도면17



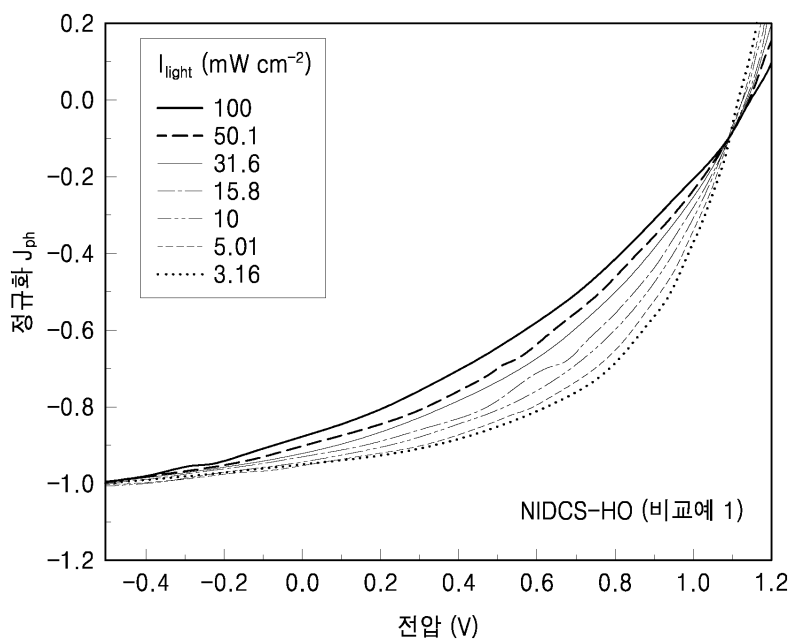
도면18



도면19



도면20



도면21

