

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국

(43) 국제공개일  
2016년 11월 3일 (03.11.2016)

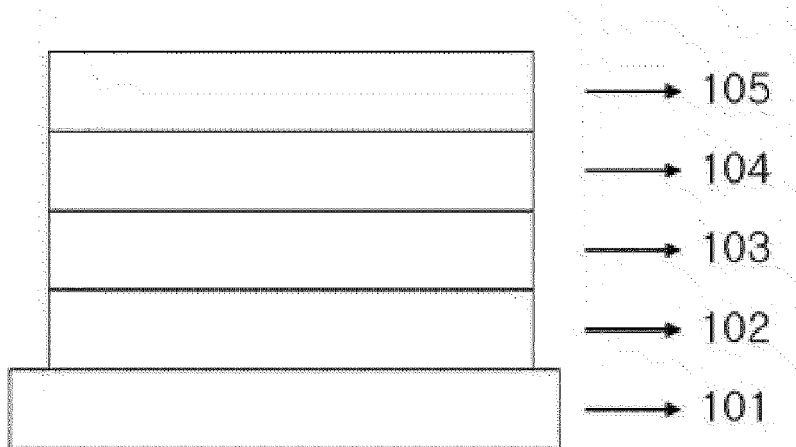


(10) 국제공개번호  
**WO 2016/175573 A2**

- (51) 국제특허분류:  
C07D 495/04 (2006.01) C07F 7/02 (2006.01)  
C07D 409/10 (2006.01) H01L 51/42 (2006.01)
  - (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/004447
  - (22) 국제출원일: 2016년 4월 28일 (28.04.2016)
  - (25) 출원언어: 한국어
  - (26) 공개언어: 한국어
  - (30) 우선권정보:  
10-2015-0059860 2015년 4월 28일 (28.04.2015) KR  
10-2016-0049483 2016년 4월 22일 (22.04.2016) KR
  - (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.)  
[KR/KR]; 07336 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).
  - (72) 발명자: 임보규 (LIM, Bogyu); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이재철 (LEE, Jaechol); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이지영 (LEE, Jiyoung); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김연신 (KIM, Younshin); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR).
  - (74) 대리인: 정순성 (CHUNG, Soon-Sung); 06253 서울시 강남구 강남대로 318, 타워 837 빌딩, 6층, Seoul (KR).
  - (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
  - (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- 공개:  
— 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

(54) Title: COMPOUND AND ORGANIC SOLAR CELL COMPRISING SAME

(54) 발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 태양 전지



(57) Abstract: The present specification relates to a compound and an organic solar cell comprising the same.

(57) 요약서: 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 태양 전지에 관한 것이다.

WO 2016/175573 A2

## 명세서

### 발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 태양 전지

#### 기술분야

- [1] 본 명세서는 2015년 4월 28일 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2015-0059860호 및 2016년 4월 22일 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2016-0049483호의 출원일 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- [2] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 태양 전지에 관한 것이다.

#### 배경기술

- [3] 태양전지는 광기전력효과(photovoltaic effect)를 응용함으로써 태양에너지를 직접 전기에너지로 변환할 수 있는 소자이다. 태양전지는 박막을 구성하는 물질에 따라 무기 태양전지와 유기 태양전지로 나뉘 수 있다. 전형적인 태양전지는 무기 반도체인 결정성 실리콘(Si)을 도핑(doping)하여 p-n 접합으로 만든 것이다. 빛을 흡수하여 생기는 전자와 정공은 p-n 접합점까지 확산되고 그 전계에 의하여 가속되어 전극으로 이동한다. 이 과정의 전력변환 효율은 외부 회로에 주어지는 전력과 태양전지에 들어간 태양전력의 비로 정의되며, 현재 표준화된 가상 태양 조사 조건으로 측정 시 24%정도까지 달성되었다. 그러나 종래 무기 태양전지는 이미 경제성과 재료상의 수급에서 한계를 보이고 있기 때문에, 가공이 쉬우며 저렴하고 다양한 가능성을 가지는 유기물 반도체 태양전지가 장기적인 대체 에너지원으로 각광받고 있다.
- [4] 태양전지는 태양 에너지로부터 가능한 많은 전기 에너지를 출력할 수 있도록 효율을 높이는 것이 중요하다. 이러한 태양전지의 효율을 높이기 위해서는 반도체 내부에서 가능한 많은 엑시톤을 생성하는 것도 중요하지만 생성된 전하를 손실됨 없이 외부로 끌어내는 것 또한 중요하다. 전하가 손실되는 원인 중의 하나가 생성된 전자 및 정공이 재결합(recombination)에 의해 소멸하는 것이다. 생성된 전자나 정공이 손실되지 않고 전극에 전달되기 위한 방법으로 다양한 방법이 제시되고 있으나, 대부분 추가 공정이 요구되고 이에 따라 제조 비용이 상승할 수 있다.

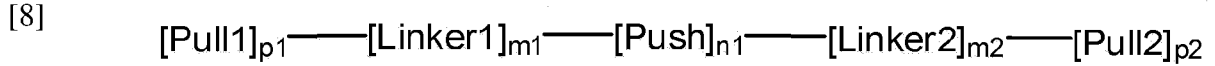
#### 발명의 상세한 설명

##### 기술적 과제

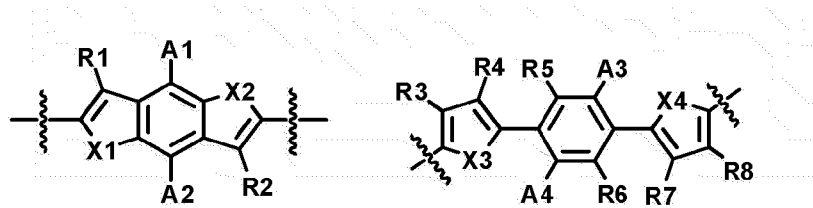
- [5] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 태양 전지를 제공하는 것을 목적으로 한다.

##### 과제 해결 수단

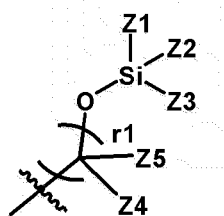
- [6] 본 명세서는 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [7] [화학식 1]

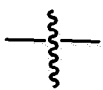


- [9] 상기 화학식 1에 있어서,
- [10] n1은 1 내지 3의 정수이고,
- [11] m1, m2, p1 및 p2는 각각 0 내지 3의 정수이며,
- [12] 상기 n1, m1, m2, p1 및 p2가 2 이상일 경우, 2 이상의 대괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,
- [13] 상기 p1이 0인 경우, 말단의 Linker1에 Pull1 대신 수소 또는 탄화수소가 결합되며,
- [14] 상기 p2가 0인 경우, 말단의 Linker2에 Pull2 대신 수소 또는 탄화수소가 결합되고,
- [15] Push는 하기 구조 중 어느 하나이며,
- [16]



- [17] 상기 구조에 있어서,
- [18] X1 내지 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 또는 Te이며,
- [19] R, R', R1 내지 R8, A3 및 A4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기가거나, 상기 R5 및 R6; 또는 A3 및 A4는 하기 화학식 2로 표시되며,
- [20] A1 및 A2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되며,
- [21] [화학식 2]
- [22]



- [23] 상기 화학식 2에 있어서,
- [24] r1은 0 내지 3의 정수이며,
- [25] r1이 2 이상일 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,
- [26] Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [27]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이고,
- [28] Linker1 및 Linker2는 서로 같거나 상이하며, 2가의 연결기이고,
- [29] Pull1 및 Pull2는 서로 같거나 상이하며, 전자 받개 구조이다.
- [30] 또한, 본 명세서는 1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 전술한 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지를 제공한다.

**발명의 효과**

- [31] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 전자 주개 성질을 갖는 Push와 전개 받개 성질을 갖는 Pull구조를 포함한다. 또한, 평면성이 우수한 상기 Push와 Pull을 연결하는 링커를 포함하며, 형성된 엑시톤(exciton)이 분자 내에서 빠르게 이동할 수 있어, 엑시톤의 분극을 극대화할 수 있으며, 낮은 밴드갭의 특성을 가질 수 있다.
- [32] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 상기 화학식 1의 Push에 벌키(Bulky)한 곁사슬(side chain)인 하기 화학식 2의 구조를 포함하여, 용해도 및 점도가 향상될 수 있으며, 상기 화합물 간의 상호작용을 저하시켜, 응집을 억제할 수 있으며 이로 인하여 하기 화학식 2가 포함된 상기 화학식 1을 도너(Donor)로 사용하여 억셉터(acceptor) 물질과 벌크-헤테로정션(Bulk-heterojunction) 필름을 형성할 때 도너의 사이즈가 거대해지는 것을 억제할 수 있다.
- [33] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 Push에 하기 화학식 2의 구조를 포함하므로, 화합물의 탄성을 부여할 수 있다.
- [34] 따라서, 상기 화합물은 유기 태양 전지의 유기물층 재료로 사용될 수 있으며, 이를 포함하는 유기 태양 전지는 개방 전압과 단락 전류의 상승 및/또는 효율 증가 등에서 우수한 특성을 나타낼 수 있다.

- [35] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 태양 전지에서 단독 또는 다른 물질과 혼합하여 사용이 가능하고, 효율의 향상, 화합물의 열적 안정성 등의 특성에 의한 소자의 수명 향상 등이 기대될 수 있다.


### 도면의 간단한 설명

- [36] 도 1은 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지를 나타낸 도이다.  
 [37] 도 2는 화합물 1-b의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [38] 도 3은 화합물 1-b의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [39] 도 4는 화합물 A의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [40] 도 5는 화합물 A의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [41] 도 6은 화합물 2-b의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [42] 도 7는 화합물 A-1의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [43] 도 8은 화합물 A-1의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [44] 도 9는 화합물 A-2의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [45] 도 10은 화합물 A-2의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [46] 도 11는 화합물 A-3의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [47] 도 12은 화합물 A-3의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [48] 도 13은 화합물 1의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [49] 도 14는 화합물 2의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [50] 도 15는 화합물 2의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [51] 도 16은 화합물 2의 UV-vis 흡수 스펙트럼을 나타낸 도이다.  
 [52] 도 17은 실험예 1에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.  
 [53] 도 18은 화합물 2의 포텐셜에 따른 커런트(Current)를 나타낸 도이다.  
 [54] 101: 기관  
 [55] 102: 제1 전극  
 [56] 103: 정공수송층  
 [57] 104: 광활성층  
 [58] 105: 제2 전극

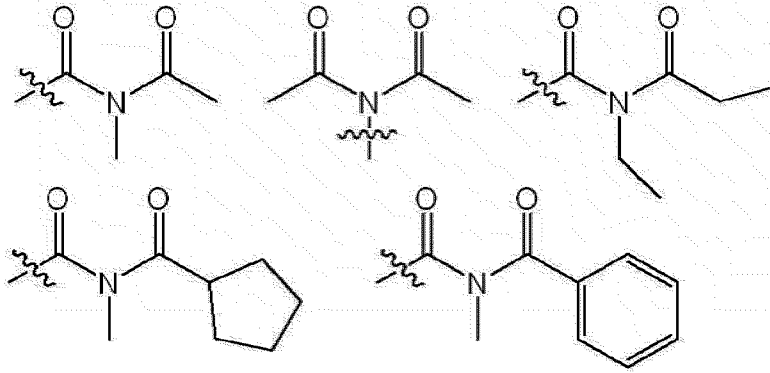
### 발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [59] 이하, 본 명세서에 대하여 상세히 설명한다.  
 [60] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.  
 [61] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.  
 [62] 본 명세서에 있어서, 어떤 부제가 다른 부제 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부제가 다른 부제에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부제 사이에 또 다른

부제가 존재하는 경우도 포함한다.

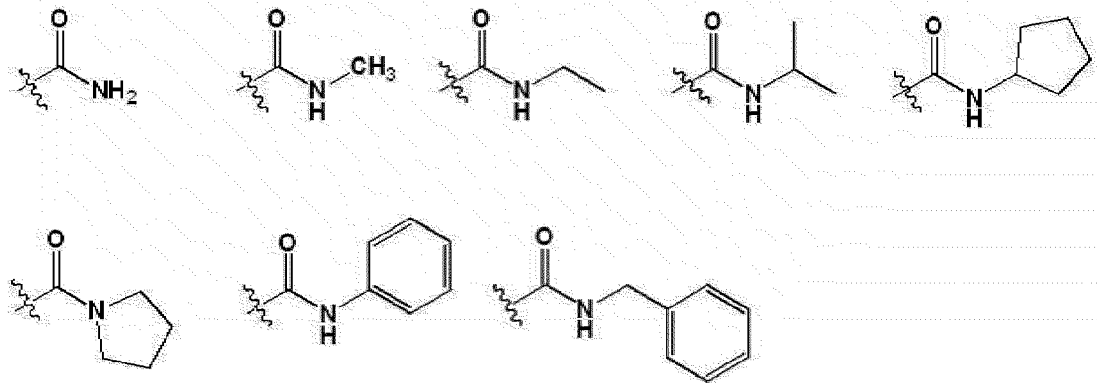
- [63] 본 명세서에 있어서, "인접한" 기는 해당 치환기가 치환된 원자와 직접 연결된 원자에 치환된 치환기, 해당 치환기와 입체구조적으로 가장 가깝게 위치한 치환기, 또는 해당 치환기가 치환된 원자에 치환된 다른 치환기를 의미할 수 있다. 예컨대, 벤젠고리에서 오르토(ortho)위치로 치환된 2개의 치환기 및 지방족 고리에서 동일 탄소에 치환된 2개의 치환기는 서로 "인접한" 기로 해석될 수 있다.
- [64] 본 명세서에 있어서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [65] 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [66] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 카르보닐기; 에스테르기; 히드록시기; 알킬기; 시클로알킬기; 알콕시기; 아릴옥시기; 알킬티옥시기; 아릴티옥시기; 알킬술폰시기; 아릴술폰시기; 알케닐기; 실릴기; 붕소기; 아민기; 아릴포스핀기; 포스핀옥사이드기; 아릴기; 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.
- [67] 본 명세서에 있어서,  는 다른 치환기 또는 결합부에 결합되는 부위를 의미한다.
- [68] 본 명세서에 있어서, 할로젠기는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 될 수 있다.
- [69] 본 명세서에 있어서, 이미드기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[70]



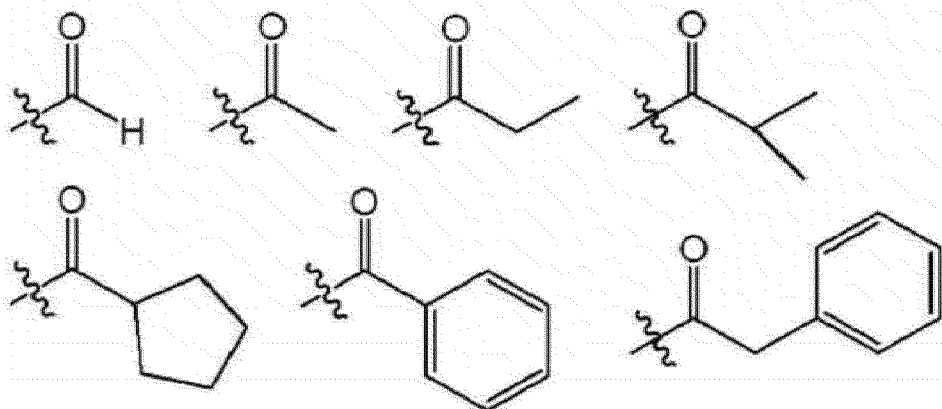
[71] 본 명세서에 있어서, 아미드기는 아미드기의 질소가 수소, 탄소수 1 내지 30의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[72]

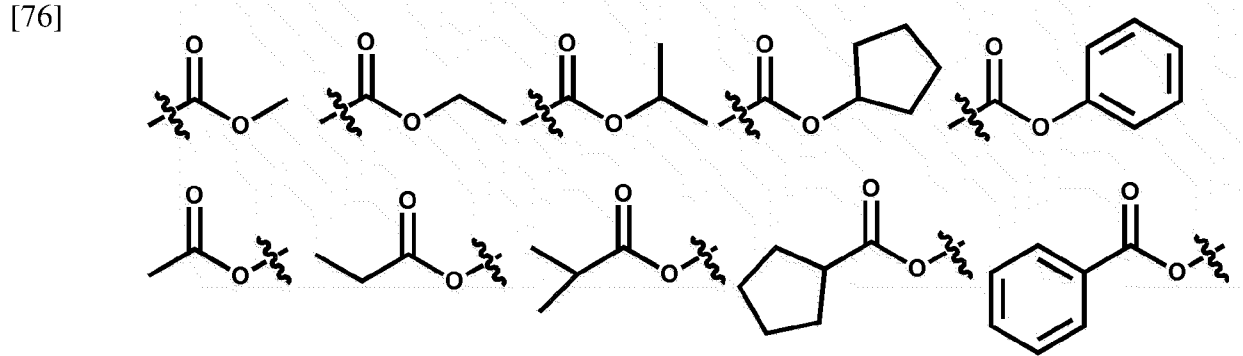


[73] 본 명세서에서 카르보닐기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[74]



[75] 본 명세서에 있어서, 에스테르기는 에스테르기의 산소가 탄소수 1 내지 25의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[77] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헵틸, 시클로헵틸메틸, 시클로헵틸메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헵틸, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헵틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸헵틸, 5-메틸헵틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[78] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 30인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헵틸, 3-메틸시클로헵틸, 4-메틸시클로헵틸, 2,3-디메틸시클로헵틸, 3,4,5-트리메틸시클로헵틸, 4-tert-부틸시클로헵틸, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[79] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헵틸옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[80] 본 명세서에 있어서, 아민기는 -NH<sub>2</sub>; 알킬아민기; N-아릴알킬아민기; 아릴아민기; N-아릴헤테로아릴아민기; N-알킬헤테로아릴아민기 및 헤테로아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는

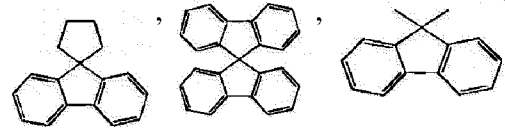
- 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 바이페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, N-페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, N-페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [81] 본 명세서에 있어서, N-알킬아릴아민아민기는 아민기의 N에 알킬기 및 아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [82] 본 명세서에 있어서, N-아릴헤테로아릴아민기는 아민기의 N에 아릴기 및 헤테로아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [83] 본 명세서에 있어서, N-알킬헤테로아릴아민기는 아민기의 N에 알킬기 및 헤테로아릴아민기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [84] 본 명세서에 있어서, 알킬아민기, N-아릴알킬아민기, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기, N-알킬헤테로아릴아민기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기, 에틸티옥시기, tert-부틸티옥시기, 헥실티옥시기, 옥틸티옥시기 등이 있고, 알킬술폭시기로는 메실, 에틸술폭시기, 프로필술폭시기, 부틸술폭시기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [85] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [86] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [87] 본 명세서에 있어서, 붕소기는 -BR<sub>100</sub>R<sub>101</sub>일 수 있으며, 상기 R<sub>100</sub> 및 R<sub>101</sub>은 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 단환 또는 다환의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 단환 또는 다환의 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.
- [88] 본 명세서에 있어서, 포스핀옥사이드기는 구체적으로 디페닐포스핀옥사이드기, 디나프틸포스핀옥사이드 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [89] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다.
- [90] 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나,

탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[91] 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 10 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[92] 본 명세서에 있어서, 상기 플루오레닐기는 치환될 수 있으며, 인접한 치환기들이 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[93] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,



등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[94] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기, 아릴숄폭시기, N-아릴알킬아민기, N-아릴헤테로아릴아민기 및 아릴포스핀기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 페녹시기, p-토릴옥시기, m-토릴옥시기, 3,5-디메틸-페녹시기, 2,4,6-트리메틸페녹시기, p-tert-부틸페녹시기, 3-바이페닐옥시기, 4-바이페닐옥시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 4-메틸-1-나프틸옥시기, 5-메틸-2-나프틸옥시기, 1-안트릴옥시기, 2-안트릴옥시기, 9-안트릴옥시기, 1-페난트릴옥시기, 3-페난트릴옥시기, 9-페난트릴옥시기 등이 있고, 아릴티옥시기로는 페닐티옥시기, 2-메틸페닐티옥시기, 4-tert-부틸페닐티옥시기 등이 있으며, 아릴숄폭시기로는 벤젠숄폭시기, p-톨루엔숄폭시기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[95] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아릴아민기가 있다. 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 단환식 아릴기일 수 있고, 다환식 아릴기일 수 있다. 상기 아릴기가 2 이상을 포함하는 아릴아민기는 단환식 아릴기, 다환식 아릴기, 또는 단환식 아릴기와 다환식 아릴기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[96] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 탄소가 아닌 원자, 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 O, N, Se 및 S 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 30인 것이 바람직하며, 상기 헤테로아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨라닐기, 피롤기,

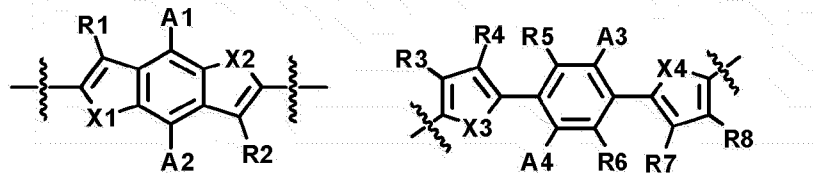
이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리딜기, 바이피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 트리아졸릴기, 아크리딜기, 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미딜기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌릴기, 카바졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티아졸릴기, 벤조카바졸릴기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조푸라닐기, 페난쓰롤리닐기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조푸라닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [97] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리헤테로아릴아민기가 있다. 상기 헤테로아릴기가 2 이상을 포함하는 헤테로아릴아민기는 단환식 헤테로아릴기, 다환식 헤테로아릴기, 또는 단환식 헤테로아릴기와 다환식 헤테로아릴기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기는 전술한 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [98] 본 명세서에 있어서, N-아릴헤테로아릴아민기 및 N-알킬헤테로아릴아민기 중의 헤테로아릴기의 예시는 전술한 헤테로아릴기의 예시와 같다.
- [99] 본 명세서에 있어서, 헤테로고리기는 단환 또는 다환일 수 있으며, 방향족, 지방족 또는 방향족과 지방족의 축합고리일 수 있으며, 상기 헤테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [100] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에 있어서, Push는 상기 헤테로환 화합물 내에서 산화(oxidation)특성을 갖는다.
- [101] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에 있어서, Pull1 및 Pull2는 상기 헤테로환 화합물 내에서 환원(reduction)특성을 갖는다.
- [102] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Push, Pull1 및 Pull2는 순환 전압 전류법(CV, cyclic voltammetry)을 이용하여 측정하였을 때, 상기 Push는 Pull1 및 Pull2와 비교하여 상대적으로 산화특성을 갖고, 상기 Pull1 및 Pull2는 Push와 비교하여 상대적으로 환원특성을 갖는다.
- [103] 다만, 본 명세서에 있어서, 산화특성 및 환원특성은 상대적인 것으로 상기 Push는 산화특성을 갖지만, 환원특성도 함께 가질 수 있고, 상기 Pull1 및 Pull2는 환원특성을 갖지만, 산화특성도 함께 가질 수 있다.
- [104] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물에서 Push는 상대적으로 전자 주개로서 작용하고, Pull1 및 Pull2는 전자 받개로서 작용한다.
- [105] 이 경우에 LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) 상태의 전자는 상대적으로 Pull1 및 Pull2에 집중(localization) 된다. 이로 인하여, Push 와 Pull1 및 Pull2사이에 분극이 존재한다.
- [106] 본 명세서는 상기 Push와 Pull1 및 Pull2사이에 상대적으로 평면성이 우수하고,

공액 구조(conjugation)를 갖는 Linker1 및 Linker2를 도입하여, 전자들이 화합물 내에서 빠르게 Pull1 및 Pull2 방향으로 이동시켜, 전자의 집중을 극대화시킬 수 있다. 이 경우, 형성된 엑시톤이 분자내에서 빠르게 이동할 수 있으며, 엑시톤의 분극을 극대화 할 수 있어, 낮은 밴드갭의 특성을 갖을 수 있다.

- [107] 본 명세서에 있어서, 에너지 준위는 에너지의 크기를 의미하는 것이다. 따라서, 진공준위로부터 마이너스(-) 방향으로 에너지 준위가 표시되는 경우에도, 에너지 준위는 해당 에너지 값의 절대값을 의미하는 것으로 해석된다. 예컨대, HOMO 에너지 준위란 진공준위로부터 최고 점유 분자 오비탈(highest occupied molecular orbital)까지의 거리를 의미한다. 또한, LUMO 에너지 준위란 진공준위로부터 최저 비점유 분자 오비탈(lowest unoccupied molecular orbital)까지의 거리를 의미한다.
- [108] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 Push에 벌키(Bulky)한 곁사슬(side chain)인 하기 화학식 2로 표시되는 구조를 포함하므로, 용해도 및 점도가 향상될 수 있다.
- [109] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 Push에 벌키(Bulky)한 곁사슬(side chain)인 하기 화학식 2로 표시되는 구조를 포함하므로, 소자 내의 전자공여물질(donor)의 근간(backbone)과 근간(backbone) 사이의 상호작용을 저하시켜, 응집을 억제할 수 있으며 이로 인하여 하기 화학식 2가 포함된 상기 화학식 1을 도너 (Donor)로 사용하여 억셉터 (acceptor) 물질과 벌크-헤테로정션 (Bulk-heterojunction) 필름을 형성할 때 도너의 사이즈가 거대해지는 것을 억제할 수 있다.
- [110] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 Push에 하기 화학식 2의 구조를 포함하므로, 화합물의 탄성을 부여할 수 있다. 이 경우, 플렉서블 소자의 재료로 사용될 수 있다.
- [111] 따라서, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물을 포함하는 유기 태양 전지를 비롯한 소자 내에서 높은 전류 및 높은 효율을 기대할 수 있다.
- [112] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Push는 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 및 치환 또는 비치환된 N, O, S, Si, Ge 중 1 이상을 포함하는 2가의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상을 포함한다.
- [113] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Push는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기; 및 치환 또는 비치환된 N, O, S, Si, Ge 중 1 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 30의 2가의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상을 포함한다.
- [114] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Push는 하기 구조 중 어느 하나이다.

[115]



[116]

상기 구조에 있어서,

[117]

X1 내지 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 또는 Te이며,

[118]

R, R', R1 내지 R8, A3 및 A4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이거나, 상기 R5 및 R6; 또는 A3 및 A4는 하기 화학식 2로 표시되며,

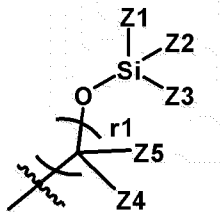
[119]

A1 및 A2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되고,

[120]

[화학식 2]

[121]



[122]

상기 화학식 2에 있어서,

[123]

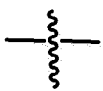
r1은 0 내지 3의 정수이며,

[124]

r1이 2 이상일 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,

[125]

Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[126]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

[127] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 2에 있어서, Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기이다.

[128] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기이다.

[129] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기이다.

[130] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 10의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기이다.

[131] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 n-헥실기이다.

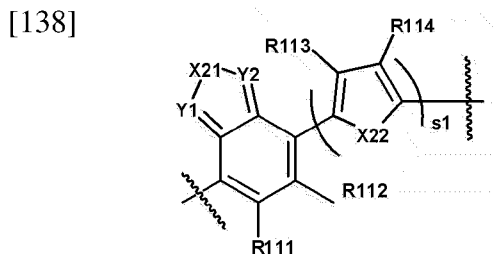
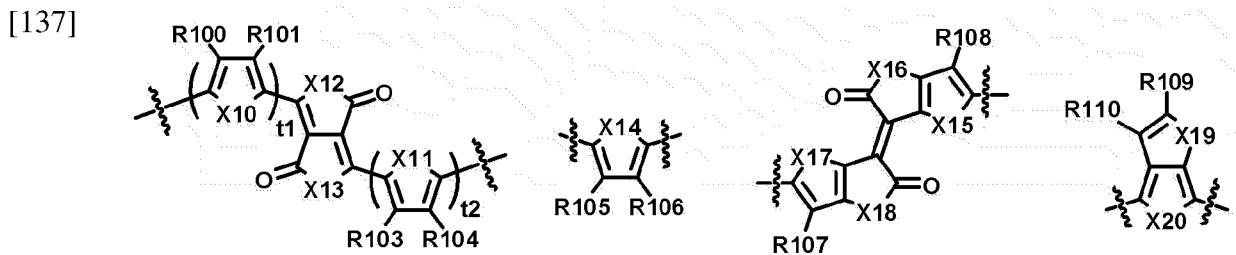
[132] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1은 n-헥실기이다.

[133] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z2는 n-헥실기이다.

[134] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z3은 n-헥실기이다.

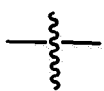
[135] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에 있어서, Linker1 및 Linker2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기; 및 치환 또는 비치환된 N, O, S, Si, Ge 중 1 이상을 포함하는 탄소수 2 내지 30의 2가의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상을 포함한다.

[136] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Linker1 및 Linker2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기 구조 중 어느 하나이다.



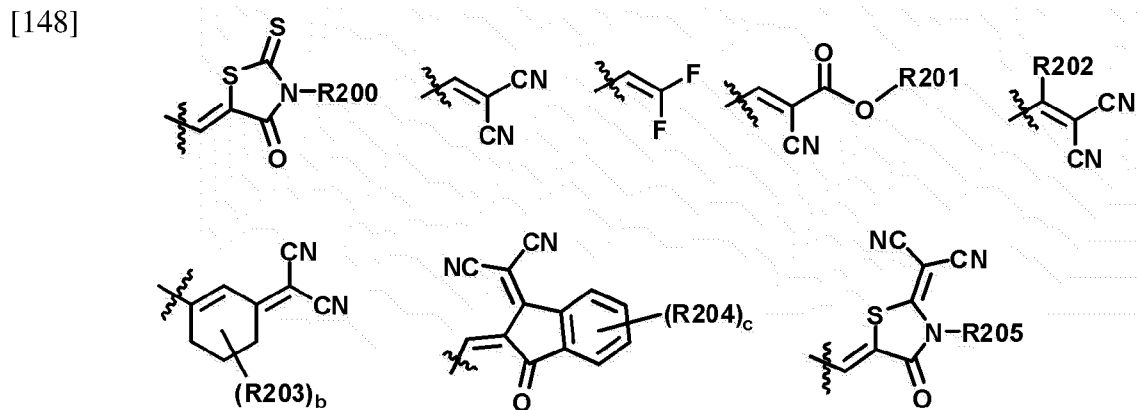
[139] 상기 구조에 있어서,

- [140] t1, t2 및 s1은 각각 1 내지 3의 정수이며,
- [141] t1, t2 및 s1가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,
- [142] X10 내지 X22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,
- [143] Y1 및 Y2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sup>"</sup>, N, SiR<sup>"</sup>, P 또는 GeR<sup>"</sup>이고,
- [144] R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub>, R<sup>"</sup> 및 R100 내지 R114는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[145]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

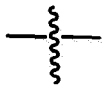
[146] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에 있어서, Pull1 및 Pull2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기이다.

[147] 상기 Pull1 및 Pull2은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기 구조 중 어느 하나이다.



- [149] 상기 구조에 있어서,
- [150] b는 1 내지 7의 정수이고,
- [151] c는 1 내지 4의 정수이며,
- [152] b 및 c가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,
- [153] R200 내지 R205는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는

비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[154]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

[155] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[156] [화학식 1-1]

[157] [Linker1]<sub>m3</sub>—[Push]<sub>n2</sub>—[Linker2]<sub>m4</sub>

[158] [화학식 1-2]

[159] [Pull1]<sub>p3</sub>—[Push]<sub>n3</sub>—[Pull2]<sub>p4</sub>

[160] [화학식 1-3]

[161] [Pull1]<sub>p5</sub>—[Linker1]<sub>m5</sub>—[Push]<sub>n4</sub>—[Linker2]<sub>m6</sub>—[Pull2]<sub>p6</sub>

[162] 상기 화학식 1-1 내지 1-3에 있어서,

[163] n2 내지 n4, m3 내지 m6 및 p3 내지 p6는 각각 1 내지 3의 정수이며,

[164] n2 내지 n4, m3 내지 m6 및 p3 내지 p6가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 대괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하며,

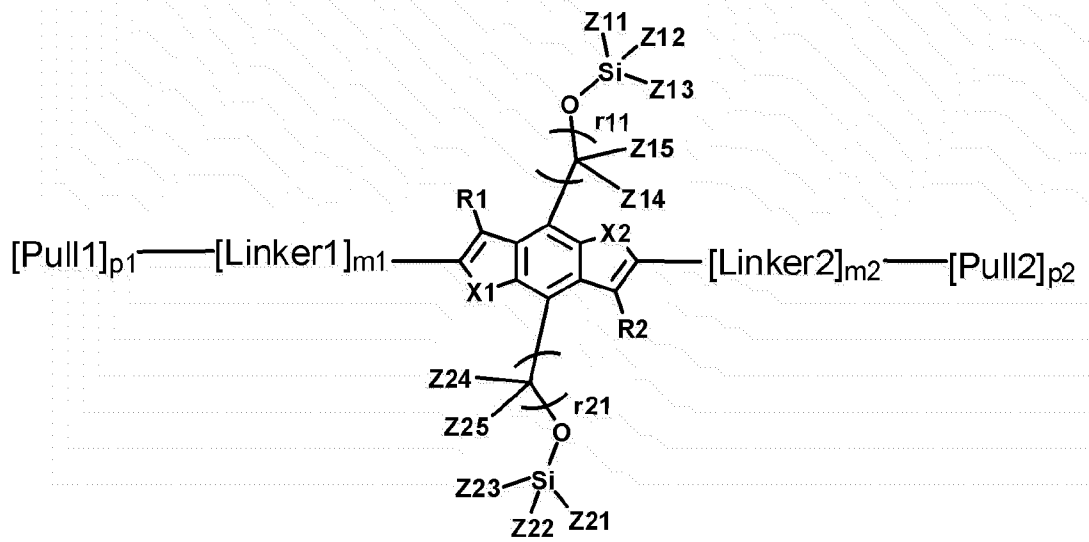
[165] Push, Linker1, Linker2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하고,

[166] 상기 Linker 1 및 Linker 2의 말단에는 수소가 결합된다.

[167] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-4 내지 1-6 어느 하나로 표시될 수 있다.

[168] [화학식 1-4]

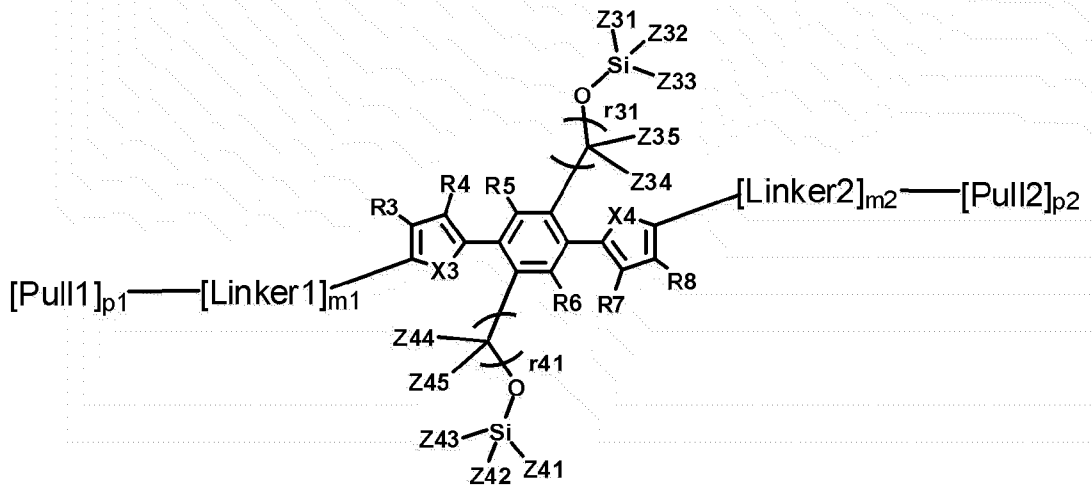
[169]



[170]

[화학식 1-5]

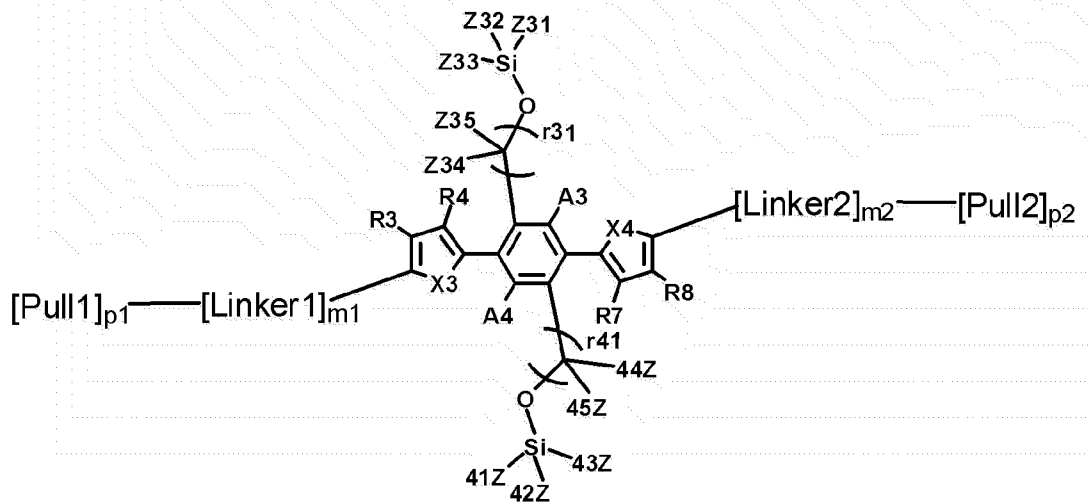
[171]



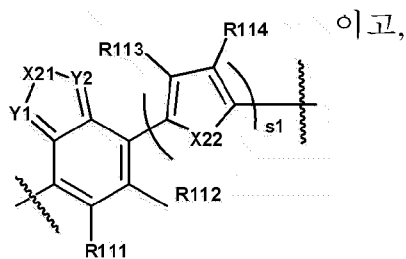
[172]

[화학식 1-6]

[173]



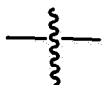
- [174] 상기 화학식 1-4 내지 1-6에 있어서,
- [175] m1, m2, p1, p2, Linker1, Linker2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하고,
- [176] X1 내지 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 또는 Te이며,
- [177] R, R', R1 내지 R8, A3 및 A4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [178] r11, r21, r31 및 r41은 각각 0 내지 3의 정수이며,
- [179] r11, r21, r31 및 r41이 2 이상일 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,
- [180] Z11 내지 Z15, Z21 내지 Z25, Z31 내지 Z35 및 Z41 내지 Z45는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [181] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에 있어서, 상기 Linker1은



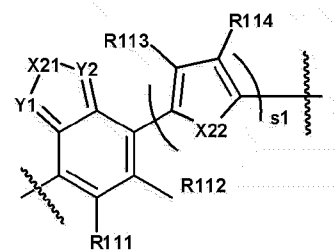
- [182] 상기 구조에 있어서,
- [183] s1은 1 내지 3의 정수이며,
- [184] s1이 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하며,
- [185] X21 및 X22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,
- [186] Y1 및 Y2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR'', N, SiR'', P 또는

GeR"이고,

- [187] R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub>, R" 및 R111 내지 R114는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

- [188]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

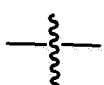
- [189] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Linker2는



이고,

- [190] 상기 구조에 있어서,
- [191] s1은 1 내지 3의 정수이며,
- [192] s1이 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하며,
- [193] X21 및 X22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,
- [194] Y1 및 Y2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR", N, SiR", P 또는 GeR"이고,

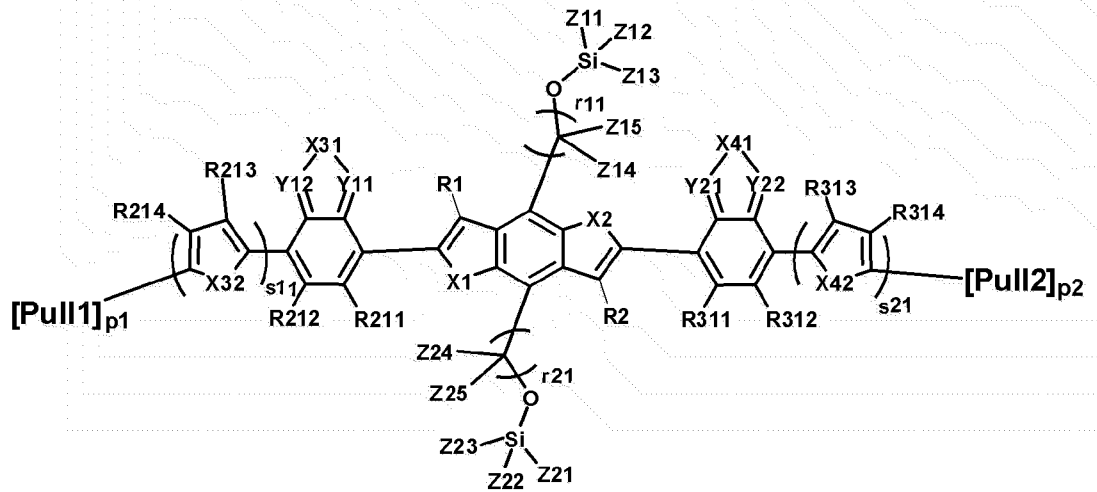
- [195] R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub>, R" 및 R111 내지 R114는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

- [196]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

- [197] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-7 내지 1-9 중 어느 하나로 표시된다.

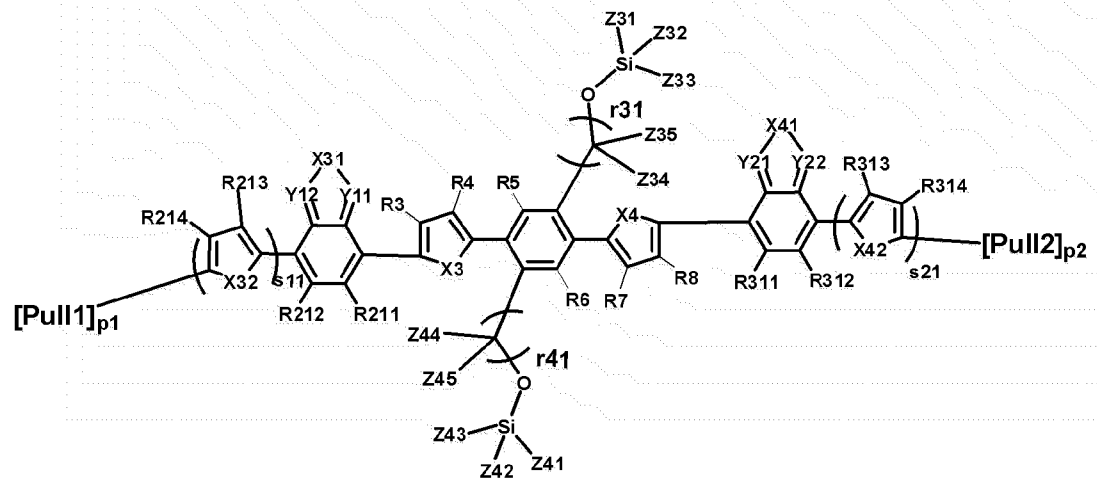
[198] [화학식 1-7]

[199]



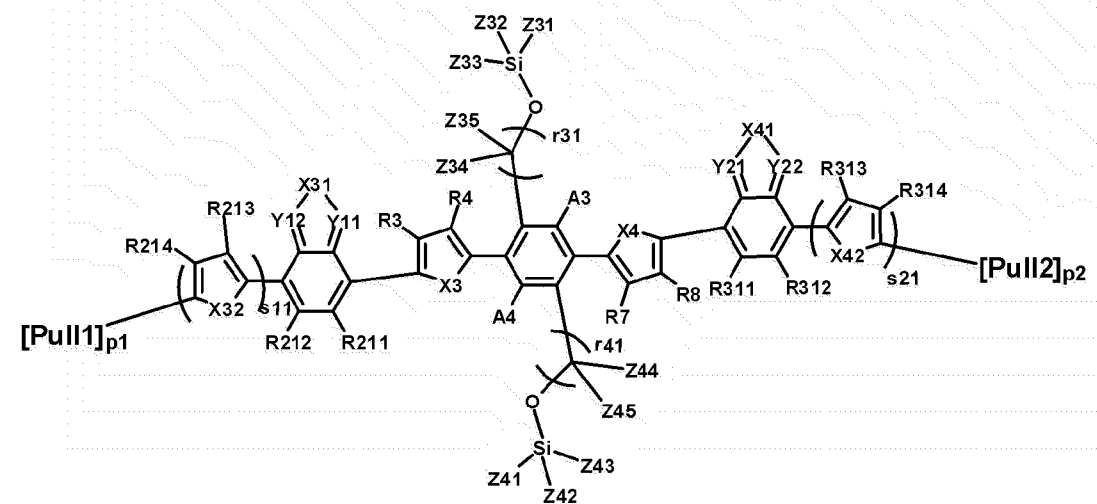
[200] [화학식 1-8]

[201]



[202] [화학식 1-9]

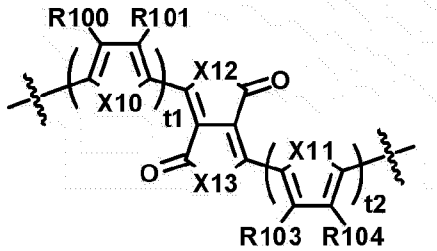
[203]



- [204] 상기 화학식 1-7 내지 1-9에 있어서,
- [205] p1, p2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하고,
- [206] X1 내지 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 또는 Te이며,
- [207] R, R', R1 내지 R8, A3 및 A4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [208] r11, r21, r31 및 r41은 각각 0 내지 3의 정수이며,
- [209] r11, r21, r31 및 r41이 2 이상일 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,
- [210] Z11 내지 Z15, Z21 내지 Z25, Z31 내지 Z35 및 Z41 내지 Z45는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,
- [211] s11 및 s21은 각각 1 내지 3의 정수이며,
- [212] s11 및 s21이 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하며,
- [213] X31, X32, X41 및 X42는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,
- [214] Y11, Y12, Y21 및 Y22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR", N, SiR", P 또는 GeR"이고,
- [215] R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub>, R" R211 내지 R214 및 R311 내지 R314는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된

아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된  
 헤테로고리기이다.

[216] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에 있어서, Linker1은  
 이고,



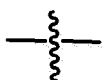
[217] 상기 구조에 있어서,

[218] t1 및 t2는 각각 1 내지 3의 정수이며,

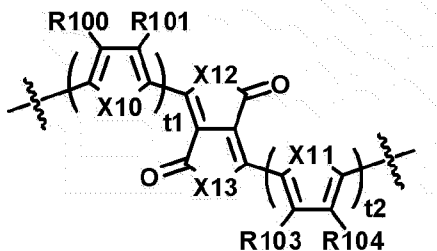
[219] t1 및 t2가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나  
 상이하고,

[220] X10 내지 X13는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>,  
 PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,

[221] R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub> 및 R100 내지 R104는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소;  
 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환  
 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된  
 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기;  
 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는  
 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된  
 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는  
 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[222]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

[223] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1에 있어서, Linker2는  
 이고,



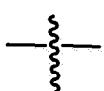
[224] 상기 구조에 있어서,

[225] t1 및 t2는 각각 1 내지 3의 정수이며,

[226] t1 및 t2가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나  
 상이하고,

[227] X10 내지 X13는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>,

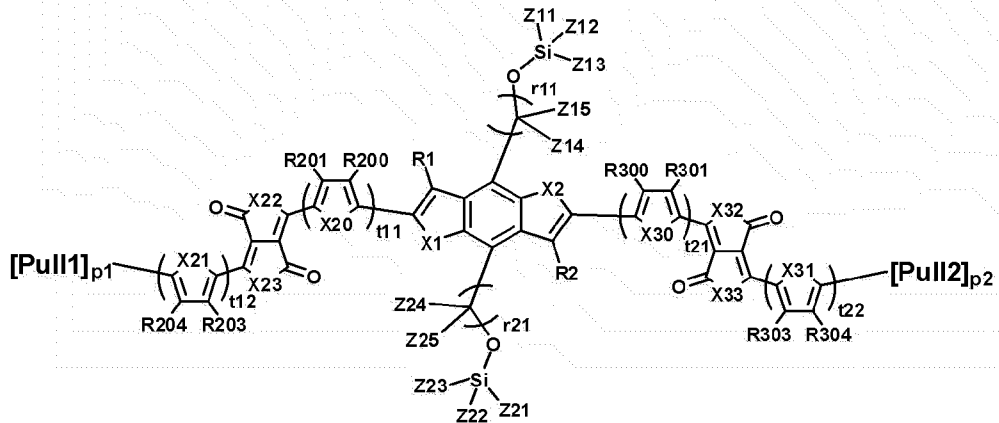
PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,

- [228] R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub> 및 R100 내지 R104는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,
- [229]  는 상기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

[230] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-10 내지 1-12 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

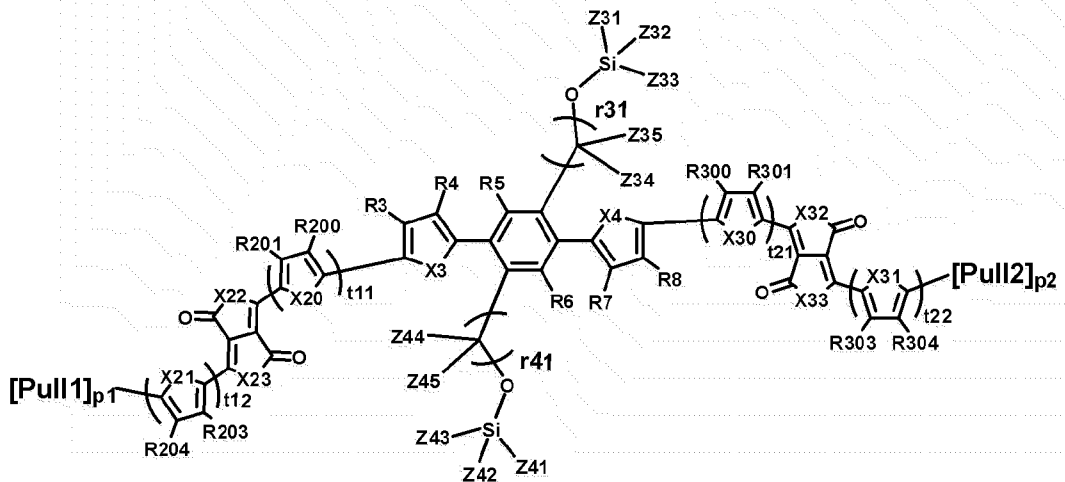
[231] [화학식 1-10]

[232]



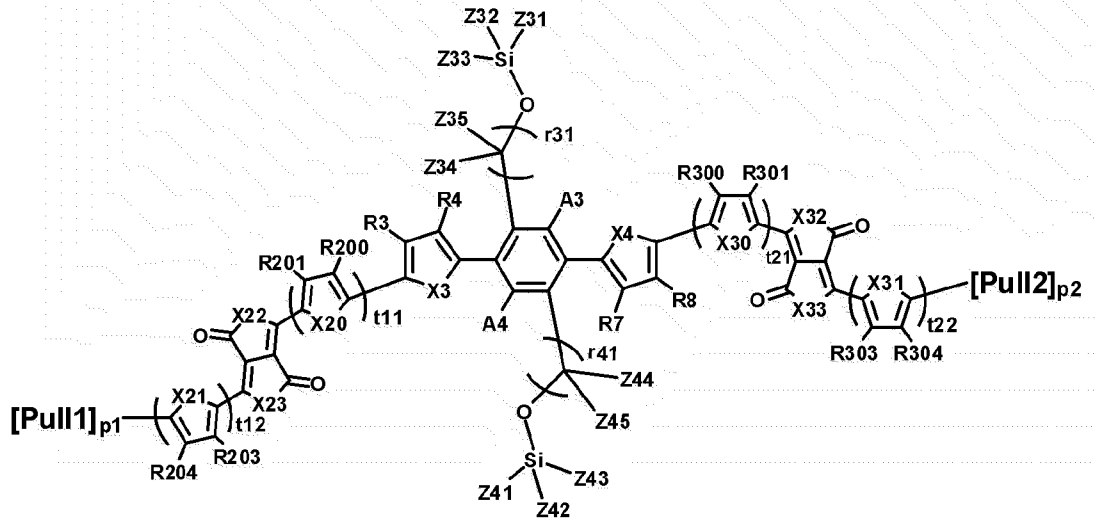
[233] [화학식 1-11]

[234]



[235] [화학식 1-12]

[236]



[237] 상기 화학식 1-10 내지 1-12에 있어서,

[238] p1, p2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하고,

[239] X1 내지 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 또는 Te이며,

[240] R, R', R1 내지 R8, A3 및 A4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[241] r11, r21, r31 및 r41은 각각 0 내지 3의 정수이며,

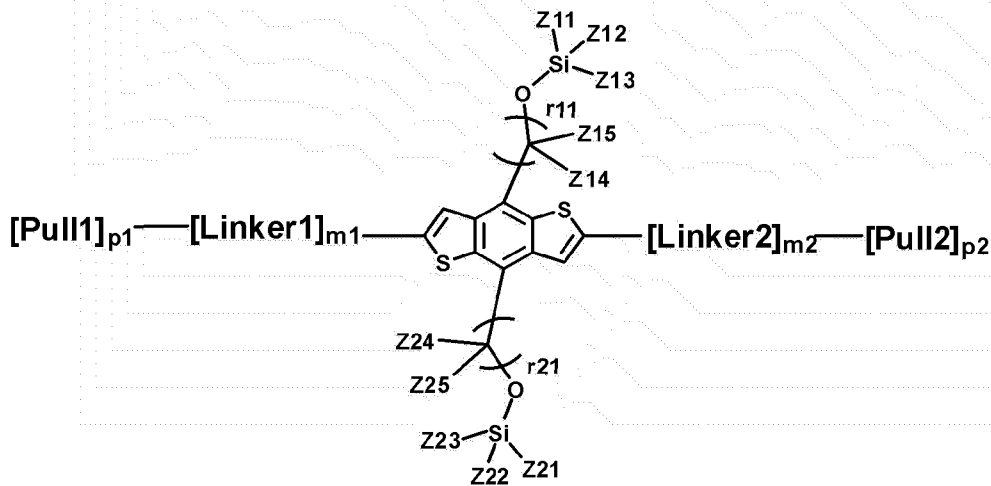
[242] r11, r21, r31 및 r41이 2 이상일 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,

[243] Z11 내지 Z15, Z21 내지 Z25, Z31 내지 Z35 및 Z41 내지 Z45는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이고,

- [244] t11, t12, t21 및 t22는 각각 1 내지 3의 정수이며,
- [245] t11, t12, t21 및 t22가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,
- [246] X20 내지 X23 및 X30 내지 X33은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>, R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,
- [247] R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub>, R200 내지 R204 및 R300 내지 R304는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.
- [248] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1-4 내지 1-6에 있어서, X1 내지 X4는 S이다.
- [249] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1-4에 있어서, R1 및 R2는 수소이다.
- [250] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1-5에 있어서, R3 내지 R8은 수소이다.
- [251] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1-6에 있어서, R3, R4, R7, R8, A3 및 A4는 수소이다.
- [252] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-13 내지 1-15 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

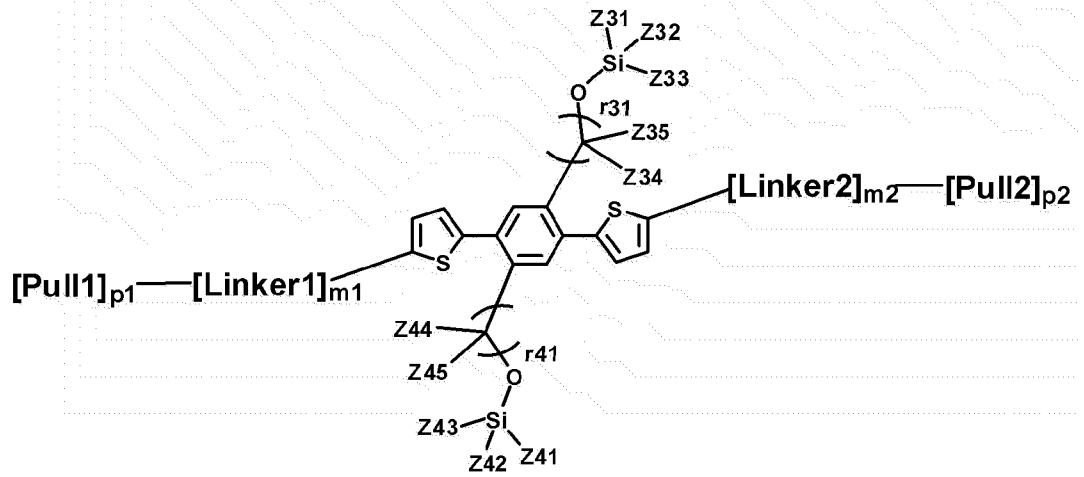
[253] [화학식 1-13]

[254]



[255] [화학식 1-14]

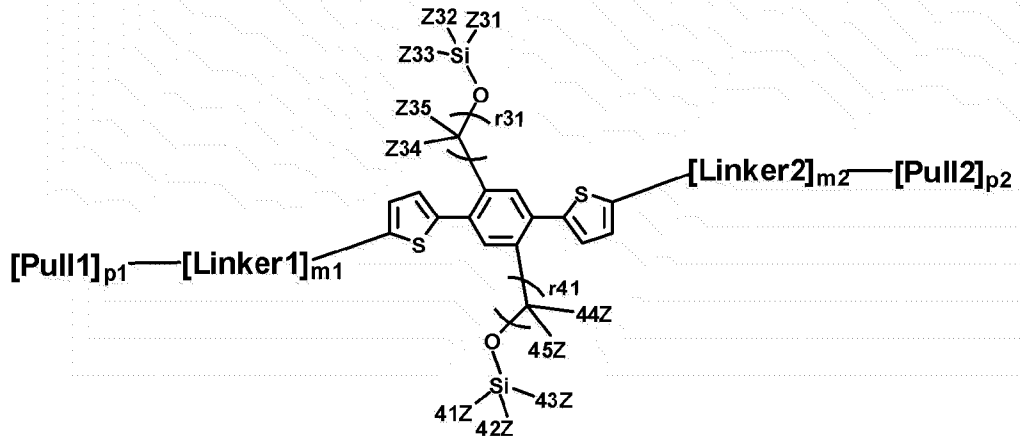
[256]



[257]

[화학식 1-15]

[258]



[259]

상기 화학식 1-13 내지 1-15에 있어서,

[260]

m1, m2, p1, p2, Linker1, Linker2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하고,

[261]

r11, r21, r31, r41, Z11 내지 Z15, Z21 내지 Z25, Z31 내지 Z35 및 Z41 내지 Z45의 정의는 상기 화학식 1-4 내지 1-6과 동일하다.

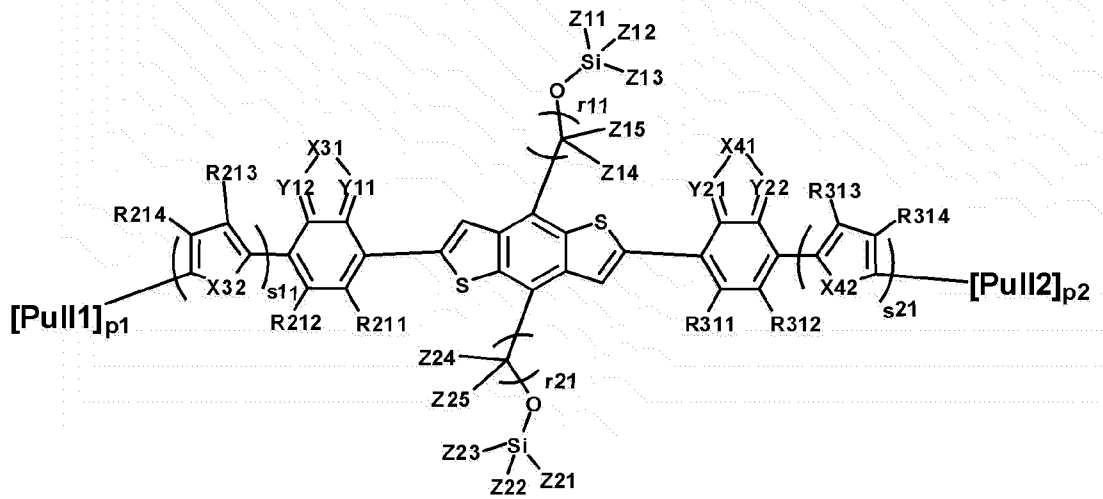
[262]

본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-16 내지 1-18 중 어느 하나로 표시된다.

[263]

[화학식 1-16]

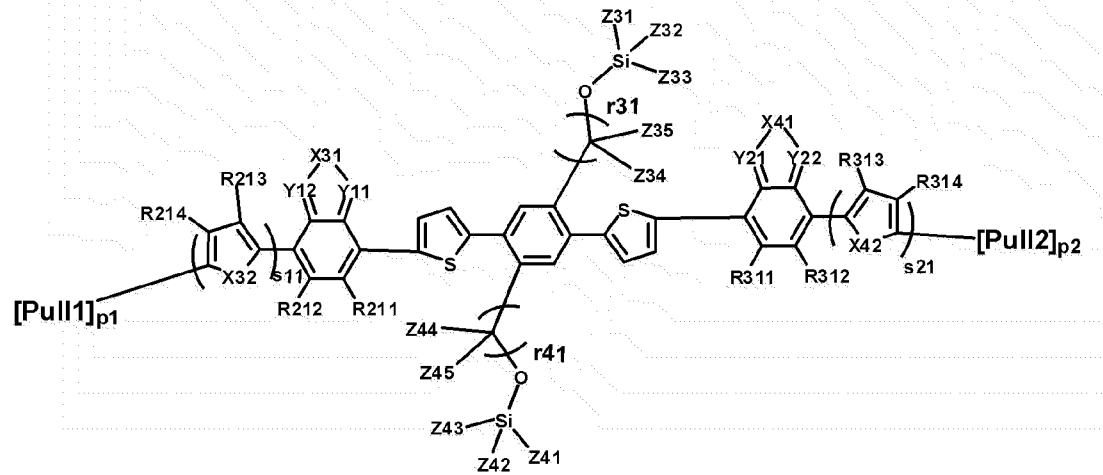
[264]



[265]

[화학식 1-17]

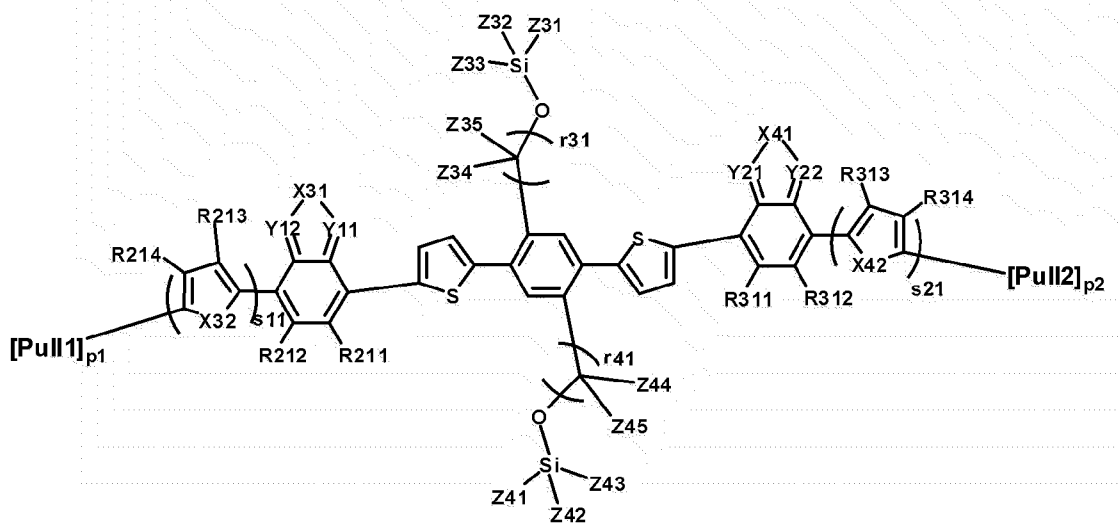
[266]



[267]

[화학식 1-18]

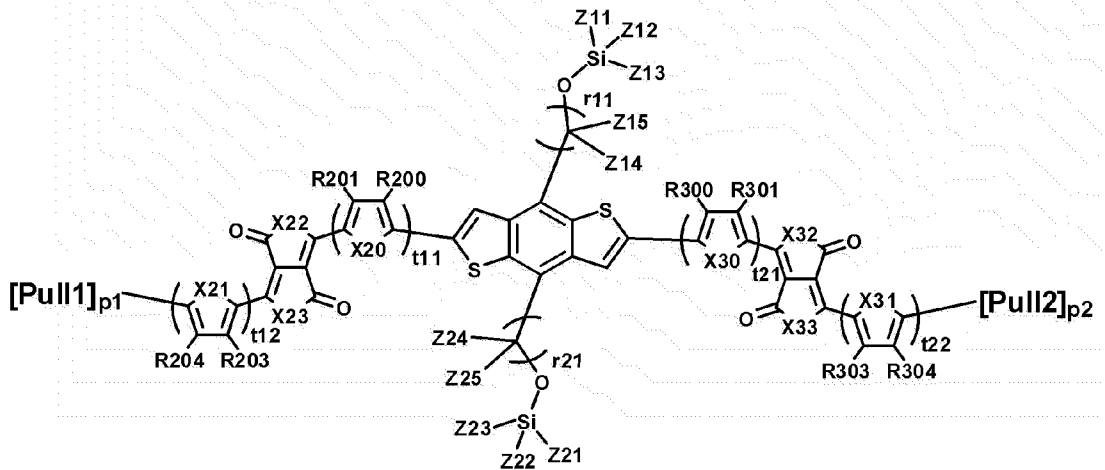
[268]



- [269] 상기 화학식 1-16 내지 1-18에 있어서,
- [270] p1, p2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하고,
- [271] r11, r21, r31, r41, Z11 내지 Z15, Z21 내지 Z25, Z31 내지 Z35 및 Z41 내지 Z45의 정의는 상기 화학식 1-4 내지 1-6과 동일하며,
- [272] s1, s21, X31, X32, X41, X42, Y11, Y12, Y21, Y22 및 R211 내지 R214 및 R311 내지 R314의 정의는 상기 화학식 1-7 내지 1-9와 동일하다.
- [273] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-19 내지 1-21 중 어느 하나로 표시된다.

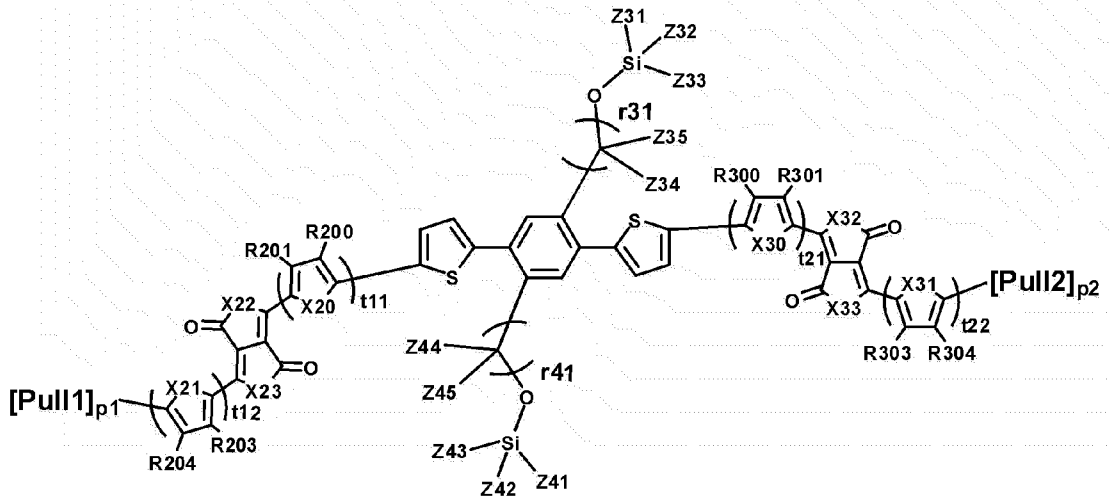
[274] [화학식 1-19]

[275]



[276] [화학식 1-20]

[277]

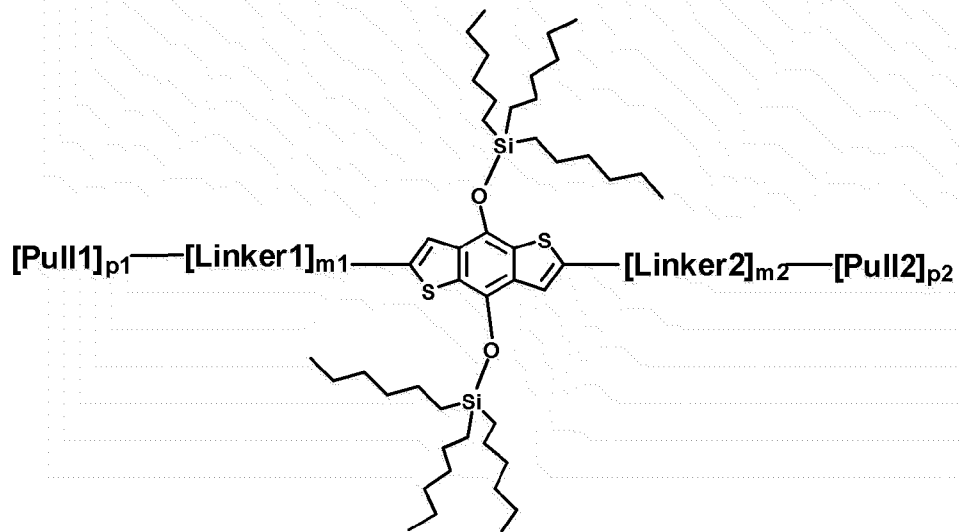


[278] [화학식 1-21]



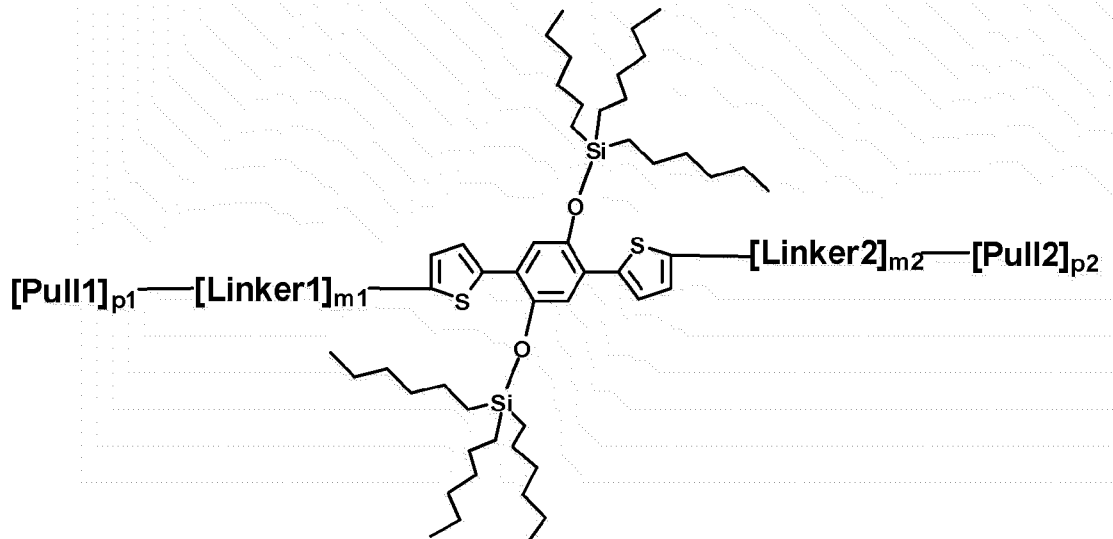
[292] [화학식 1-22]

[293]



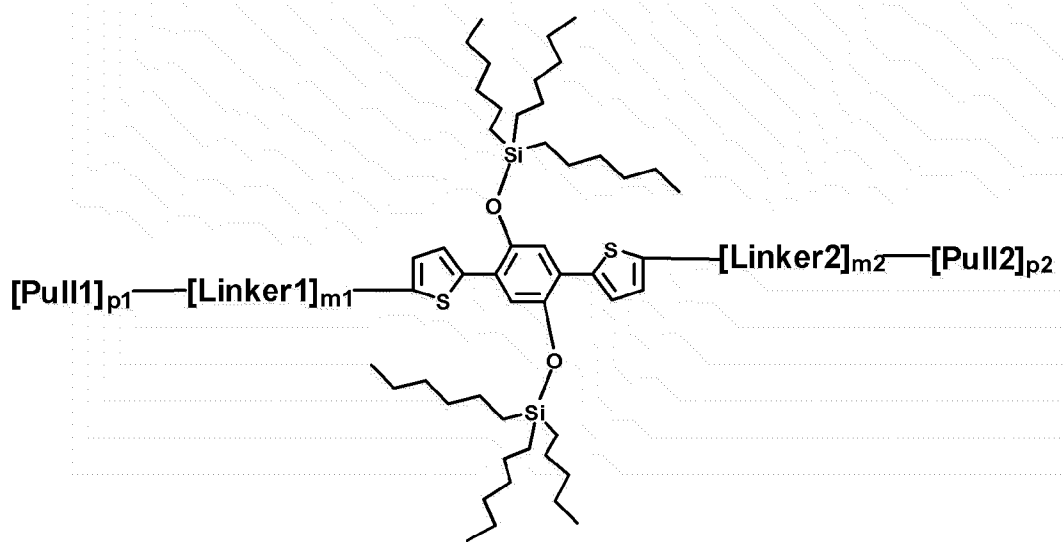
[294] [화학식 1-23]

[295]



[296] [화학식 1-24]

[297]



- [298] 상기 화학식 1-22 내지 1-24에 있어서,
- [299] m1, m2, p1, p2, Linker1, Linker2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하다.
- [300] 상기 화합물은 후술하는 제조예를 기초로 제조될 수 있다.
- [301] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 Linker1의 말단에 알데하이드기 및 할로젠기를 도입한 화합물을 도입하고, Linker2의 말단에 알데하이드기 및 할로젠기를 도입한 화합물; 및 Push를 결합시켜, 각각의 말단에 알데하이드기가 도입된 화합물을 제조한다. 그 후, Pull1 및 Pull2를 도입하여 화학식 1로 표시되는 화합물을 제조할 수 있다.
- [302] 본 명세서에 따른 화합물은 다단계 화학반응으로 제조할 수 있다. 알킬화 반응, 그리냐르(Grignard) 반응, 스즈끼(Suzuki) 커플링 반응 및 스틸(Stille) 커플링 반응 등을 통하여 모노머들을 제조한 후, 스틸 커플링 반응 등의 탄소-탄소 커플링 반응을 통하여 최종 화합물들을 제조할 수 있다. 도입하고자 하는 치환기가 보론산(boronic acid) 또는 보론산 에스터(boronic ester) 화합물인 경우에는 스즈끼 커플링 반응을 통해 제조할 수 있고, 도입하고자 하는 치환기가 트리부틸틴(tributyltin) 또는 트리메틸틴(trimethyltin) 화합물인 경우에는 스틸 커플링 반응을 통해 제조할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [303] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지를 제공한다.
- [304] 본 명세서의 일 실시예에 따른 유기 태양 전지는 제1 전극, 광활성층 및 제2 전극을 포함한다. 상기 유기 태양 전지는 기관, 정공수송층 및/또는 전자수송층이 더 포함될 수 있다.
- [305] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지가 외부 광원으로부터 광자를 받으면 전자 주개와 전자 받개 사이에서 전자와 정공이 발생한다. 발생된

정공은 전자 도너층을 통하여 양극으로 수송된다.

- [306] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 정공 수송층, 정공 주입층 또는 정공 수송과 정공 주입을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 정공 수송층, 정공 주입층 또는 정공 수송과 정공 주입을 동시에 하는 층은 상기 화합물을 포함한다.
- [307] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 전자주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는 층은 상기 화합물을 포함한다.
- [308] 도 1 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지를 나타낸 도이다.
- [309] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지가 외부 광원으로부터 광자를 받으면 전자 주개와 전자 받개 사이에서 전자와 정공이 발생한다. 발생된 정공은 전자 도너층을 통하여 양극으로 수송된다.
- [310] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 부가적인 유기물층을 더 포함할 수 있다. 상기 유기 태양 전지는 여러 기능을 동시에 갖는 유기물을 사용하여 유기물층의 수를 감소시킬 수 있다.
- [311] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 애노드이고, 상기 제2 전극은 캐소드이다. 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 캐소드이고, 상기 제2 전극은 애노드이다.
- [312] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 유기 태양 전지는 캐소드, 광활성층 및 애노드 순으로 배열될 수도 있고, 애노드, 광활성층 및 캐소드 순으로 배열될 수도 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [313] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 애노드, 정공수송층, 광활성층, 전자수송층 및 캐소드 순으로 배열될 수도 있고, 캐소드, 전자수송층, 광활성층, 정공수송층 및 애노드 순으로 배열될 수도 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [314] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 노멀(Normal)구조이다. 상기 노멀구조에서 기판, 애노드, 광활성층을 포함하는 유기물층 및 캐소드의 순서로 적층될 수 있다.
- [315] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 인버티드(Inverted) 구조이다. 상기 인버티드 구조에서는 기판, 캐소드, 광활성층을 포함하는 유기물층 및 애노드의 순서로 적층될 수 있다.
- [316] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 탠덤 (tandem) 구조이다.
- [317] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기태양 전지는 광활성층이 1층 또는 2층 이상일 수 있다. 상기 탠덤 구조에서는 광활성층을 2 이상 포함할 수 있다.
- [318] 또 하나의 실시상태에 있어서, 버퍼층이 광활성층과 정공수송층 사이 또는 광활성층과 전자수송층 사이에 구비될 수 있다. 이때, 정공 주입층이 애노드와

정공수송층사이에 더 구비될 수 있다. 또한, 전자주입층이 캐소드와 전자수송층사이에 더 구비될 수 있다.

- [319] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 광활성층은 전자 주개 및 받개로 이루어진 군에서 선택되는 1 또는 2 이상을 포함하고, 상기 전자 주개물질은 상기 화합물을 포함한다.
- [320] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자 받개 물질은 풀러렌, 풀러렌 유도체, 바소쿠프로인, 반도체성 원소, 반도체성 화합물 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 구체적으로 풀러렌(fullerene), 풀러렌 유도체(PCBM((6,6)-phenyl-C61-butyrac acid-methylester) 또는 PCBCR((6,6)-phenyl-C61-butyrac acid-cholesteryl ester), 페릴렌(perylene) PBI(polybenzimidazole), 및 PTCBI(3,4,9,10-perylene-tetracarboxylic bis-benzimidazole)로 이루어진 군에서 선택되는 1 또는 2 이상의 화합물이다.
- [321] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자 주개 및 전자 받개는 벌크 헤테로 정션(BHJ)을 구성한다.
- [322] 벌크 헤테로 정션이란 광활성층에서 전자 주개 물질과 전자 받개 물질이 서로 섞여 있는 것을 의미한다.
- [323] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 광활성층은 n 형 유기물층 및 p 형 유기물층을 포함하는 이층 박막(bilayer) 구조이며, 상기 p형 유기물층은 상기 화합물을 포함한다.
- [324] 본 명세서에서 상기 기판은 투명성, 표면평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리기판 또는 투명 플라스틱 기판이 될 수 있으나, 이에 한정되지 않으며, 유기 태양 전지에 통상적으로 사용되는 기판이면 제한되지 않는다. 구체적으로 유리 또는 PET(polyethylene terephthalate), PEN(polyethylene naphthalate), PP(polypropylene), PI(polyimide), TAC(triacetyl cellulose) 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [325] 상기 애노드 전극은 투명하고 전도성이 우수한 물질이 될 수 있으나, 이에 한정되지 않는다. 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는  $\text{SnO}_2 : \text{Sb}$ 와 같은 금속과 산화물의 조합; 및 폴리(3-메틸싸이오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)싸이오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [326] 상기 애노드 전극의 형성 방법은 특별히 한정되지 않으나, 예컨대 스퍼터링, E-빔, 열증착, 스펀코팅, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅, 닥터 블레이드 또는 그라비아 프린팅법을 사용하여 기판의 일면에 도포되거나 필름형태로 코팅됨으로써 형성될 수 있다.
- [327] 상기 애노드 전극을 기판 상에 형성하는 경우, 이는 세정, 수분제거 및 친수성 개질 과정을 거칠 수 있다.

- [328] 예컨대, 패터닝된 ITO 기판을 세정제, 아세톤, 이소프로필 알코올(IPA)로 순차적으로 세정한 다음, 수분 제거를 위해 가열판에서 100~150°C에서 1~30분간, 바람직하게는 120°C에서 10분간 건조하고, 기판이 완전히 세정되면 기판 표면을 친수성으로 개질한다.
- [329] 상기와 같은 표면 개질을 통해 접합 표면 전위를 광활성층의 표면 전위에 적합한 수준으로 유지할 수 있다. 또한, 개질 시 애노드 전극 위에 고분자 박막의 형성이 용이해지고, 박막의 품질이 향상될 수도 있다.
- [330] 애노드 전극의 위한 전처리 기술로는 a) 평행 평판형 방전을 이용한 표면 산화법, b) 진공상태에서 UV 자외선을 이용하여 생성된 오존을 통해 표면을 산화하는 방법, 및 c) 플라즈마에 의해 생성된 산소 라디칼을 이용하여 산화하는 방법 등이 있다.
- [331] 애노드 전극 또는 기판의 상태에 따라 상기 방법 중 한가지를 선택할 수 있다. 다만, 어느 방법을 이용하든지 공통적으로 애노드 전극 또는 기판 표면의 산소이탈을 방지하고 수분 및 유기물의 잔류를 최대한 억제하는 것이 바람직하다. 이 때, 전처리의 실질적인 효과를 극대화할 수 있다.
- [332] 구체적인 예로서, UV를 이용하여 생성된 오존을 통해 표면을 산화하는 방법을 사용할 수 있다. 이 때, 초음파 세정 후 패터닝된 ITO 기판을 가열판(hot plate)에서 베이킹(baking)하여 잘 건조시킨 다음, 챔버에 투입하고, UV 램프를 작동시켜 산소 가스가 UV 광과 반응하여 발생하는 오존에 의하여 패터닝된 ITO 기판을 세정할 수 있다.
- [333] 그러나, 본 명세서에 있어서의 패터닝된 ITO 기판의 표면 개질 방법은 특별히 한정시킬 필요는 없으며, 기판을 산화시키는 방법이라면 어떠한 방법도 무방하다.
- [334] 상기 캐소드 전극은 일함수가 작은 금속이 될 수 있으나, 이에 한정되지 않는다. 구체적으로 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 또는 LiF/Al, LiO<sub>2</sub>/Al, LiF/Fe, Al:Li, Al:BaF<sub>2</sub>, Al:BaF<sub>2</sub>:Ba와 같은 다층 구조의 물질이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [335] 상기 캐소드 전극은 5x10<sup>-7</sup>torr 이하의 진공도를 보이는 열증착기 내부에서 증착되어 형성될 수 있으나, 이 방법에만 한정되는 것은 아니다.
- [336] 상기 정공수송층 및/또는 전자수송층 물질은 광활성층에서 분리된 전자와 정공을 전극으로 효율적으로 전달시키는 역할을 담당하며, 물질을 특별히 제한하지는 않는다.
- [337] 상기 정공수송층 물질은 PEDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene) doped with poly(styrenesulfonic acid)), 몰리브덴 산화물(MoO<sub>x</sub>); 바나듐 산화물(V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>); 니켈 산화물(NiO); 및 텅스텐 산화물(WO<sub>x</sub>) 등이 될 수 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [338] 상기 전자수송층 물질은 전자추출금속 산화물(electron-extracting metal

oxides)이 될 수 있으며, 구체적으로 8-히드록시퀴놀린의 금속착물; Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물; Liq를 포함한 금속착물; LiF; Ca; 티타늄 산화물(TiO<sub>x</sub>); 아연 산화물(ZnO); 및 세슘 카보네이트(Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) 등이 될 수 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[339] 광활성층은 전자공여체 및/또는 전자수용체와 같은 광활성 물질을 유기용매에 용해시킨 후 용액을 스핀 코팅, 딥코팅, 스크린 프린팅, 스프레이 코팅, 닥터 블레이드, 브러쉬 페인팅 등의 방법으로 형성할 수 있으나, 이들 방법에만 한정되는 것은 아니다.

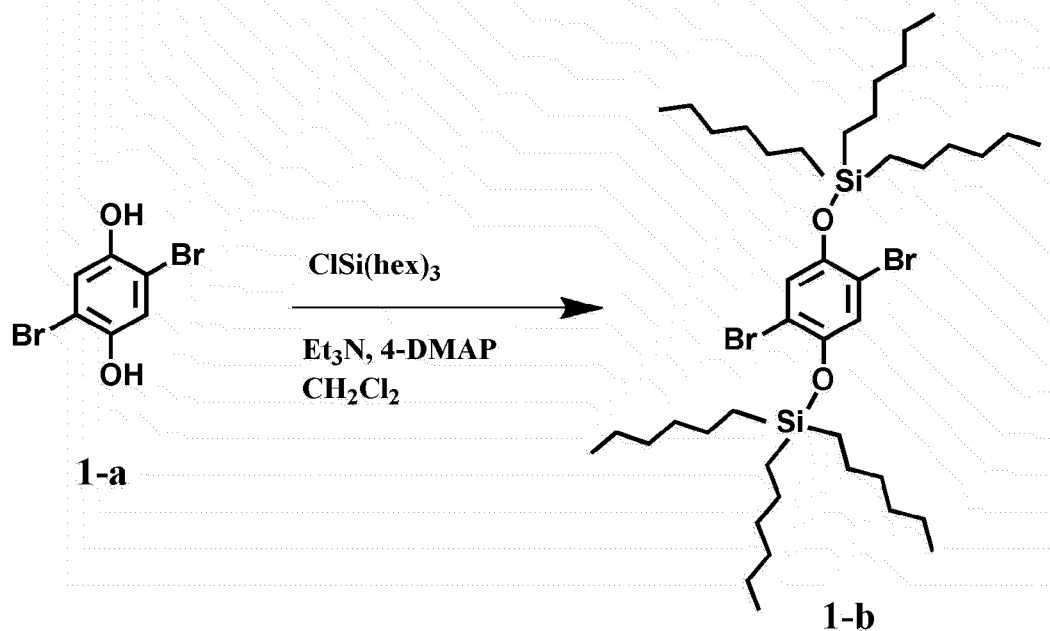
**발명의 실시를 위한 형태**

[340] 상기 화합물의 제조 방법 및 이를 포함하는 유기 태양 전지의 제조는 이하 제조예 및 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 실시예는 본 명세서를 예시하기 위한 것이며, 본 명세서의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[341] 제조예 1. 화합물 A-1의 제조

[342] (1) 화합물 1-b의 제조

[343]



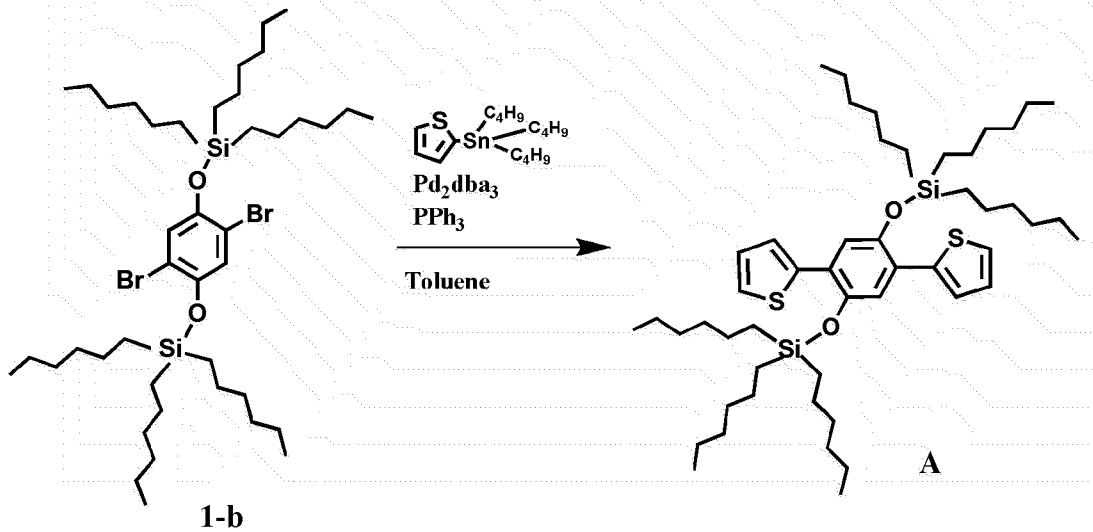
[344] 30mL 클로로포름에 1-a(2g, 7.47mmol)과 4-디메틸아미노피리딘(0.36g, 2.92mmol)을 녹인 뒤, 0°C로 내린 후, 트리에틸아민(3mL, 21.51mmol)과 클로로(트리헥실)(7.46mL, 20.37mmol)을 주입하고, 상온에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 후, 반응물을 100mL 물에 넣고, 디클로로메탄으로 추출하였다. 그 후, 마그네슘설페이트로 잔여 물을 제거한 후, 감압 하에 용매를 제거하였다. 잔류 생성물을 실리카 컬럼(헥산:디클로로메탄)으로 정제하여, 투명한 오일 1-b를 얻었다. (수율: 94%)

[345] 도 2는 화합물 1-b의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[346] 도 3은 화합물 1-b의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[347] (2) 화합물 A의 제조

[348]



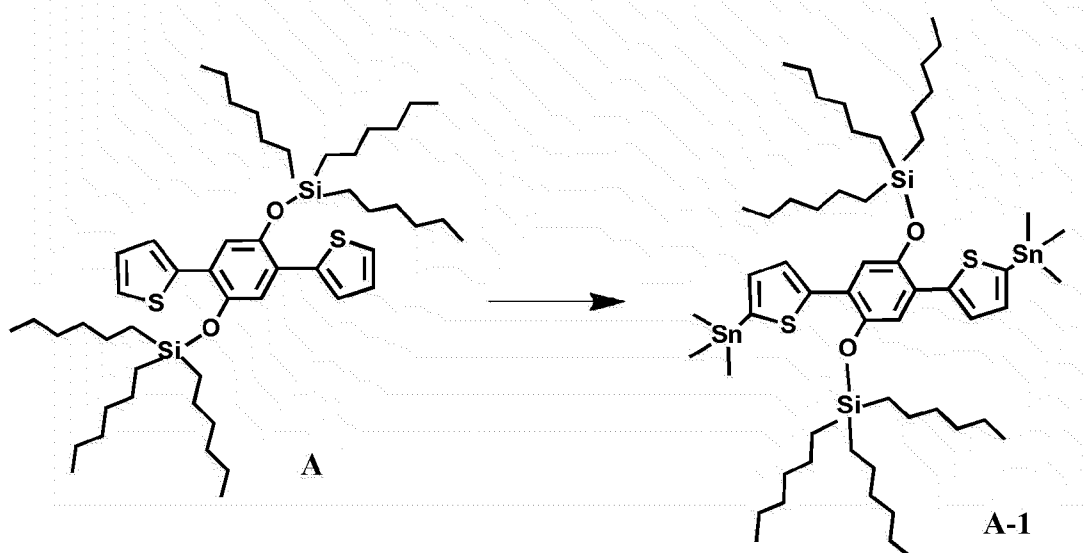
[349] 70mL 톨루엔에 1-b(5g, 6mmol)과 트리뷰틸틴-티오펜(9.33g, 25mmol)을 녹인 뒤, 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium)(0)촉매(0.458g, 0.5mmol)와 트리페닐포스핀 리간드(0.52g, 2mmol)을 넣고, 110°C에서 48시간 동안 교반하였다. 반응 후, 디클로로메탄으로 반응물을 추출하였다. 그 후, 마그네슘설페이트로 잔여 물을 제거한 후, 감압 하에 용매를 제거하였다. 잔류 생성물을 실리카 컬럼(헥산:디클로로메탄)으로 정제하여, 투명한 오일 A를 얻었다. (수율: 59%)

[350] 도 4는 화합물 A의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[351] 도 5는 화합물 A의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[352] (3) 화합물 A-1의 제조

[353]



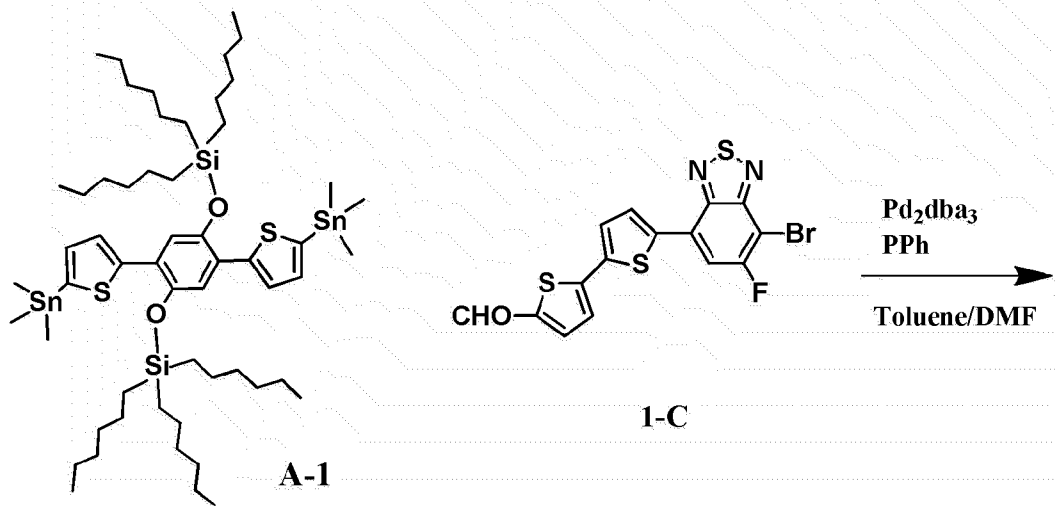
[354] 100 mL 테트라하이드로퓨란에 A (3.0 g, 3.55 mmol)을 녹인 뒤 -78 °C에서 2 M 리튬 디아이소프로필아마이드 (5.325 mL, 10.65 mmol)을 서서히 주입 후, -78 °C에서 2시간 교반한다. 동일 온도에서 트리메틸틴 클로라이드(Trimethyltin chloride) (11 mL, 11 mmol)을 넣어주고, 상온으로 서서히 올렸다. 이 용액을 DCM으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub> (Magnesium sulfate)로 잔여 물을 제거 후, 감압 하에 용매를 제거하였다. 잔류 생성물을 실리카 컬럼(silica column, eluent: n-hexane)을 통해서 노란색의 액체 A-1를 얻었다. (수율: 83%)

[355] 도 7은 화합물 A-1의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.

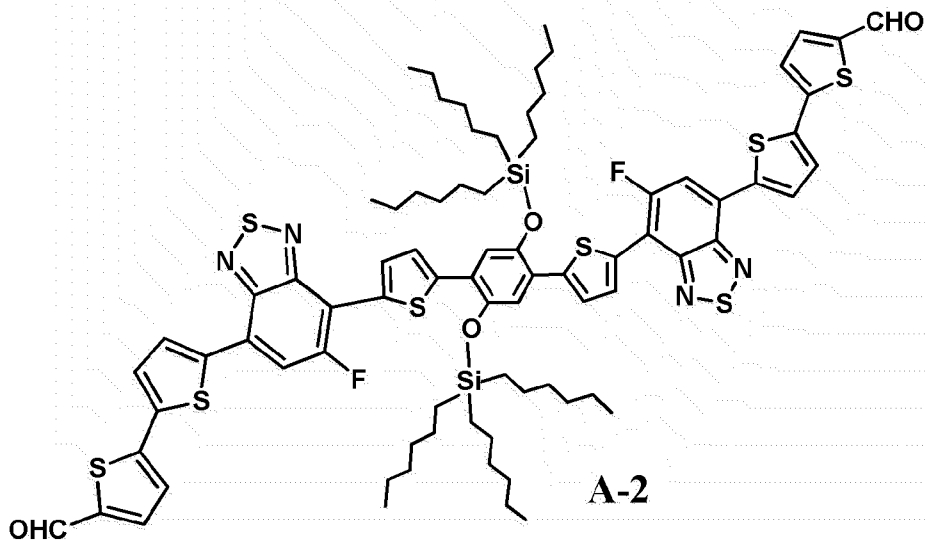
[356] 도 8은 화합물 A-1의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[357] (4) 화합물 A-2의 제조

[358]



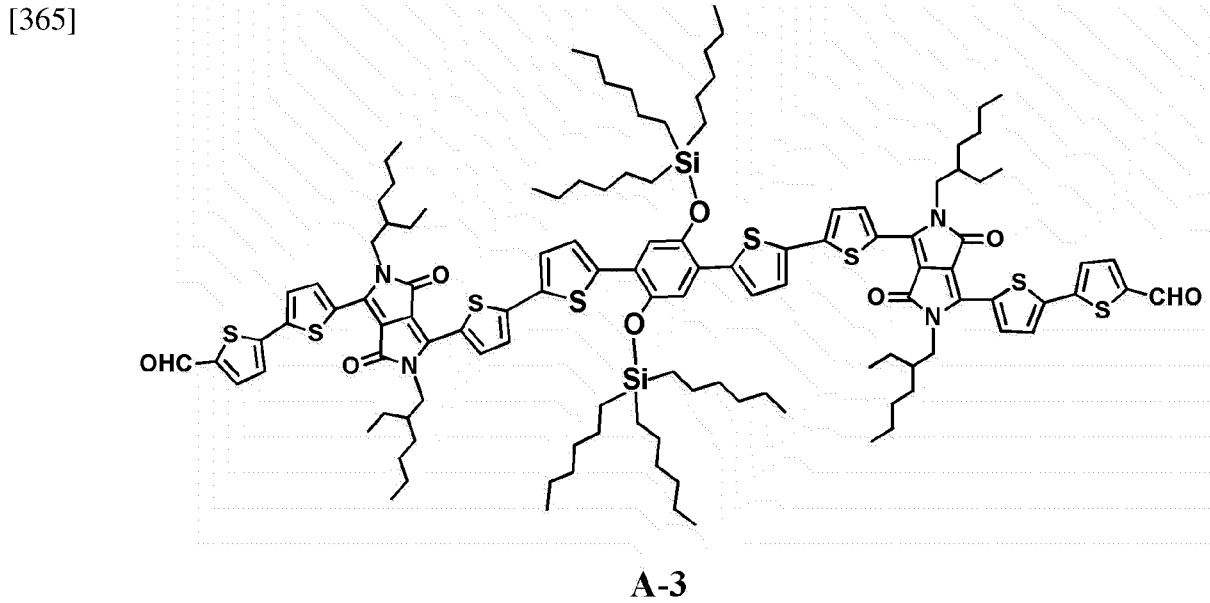
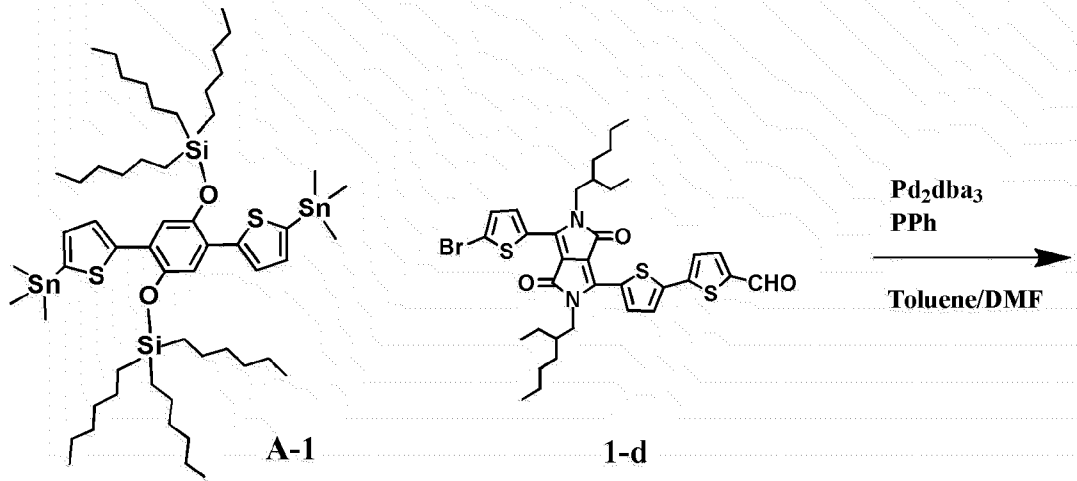
[359]



[360] 40 mL 톨루엔과 4mL 디메틸포름아미드에 1-c (0.808 g, 1.9 mmol)과 A-1 (0.99 g, 0.85 mmol)을 녹이고,

트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐((Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium)(0) 촉매 (0.0385 g, 0.042 mmol)와 트리페닐포스핀 리간드 (0.0441 g, 0.168 mmol)을 넣고, 110 에서 48시간 교반하였다. 반응 후, 이 용액을 디클로로메탄으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub> (Magnesium sulfate)로 잔여 물을 제거 후, 감압 하에 용매를 제거하였다. 잔류 생성물을 실리카 컬럼(silica column, eluent: chloroform)을 통해서 빨간색의 고체 A-2를 얻었다. (수율: 45%)

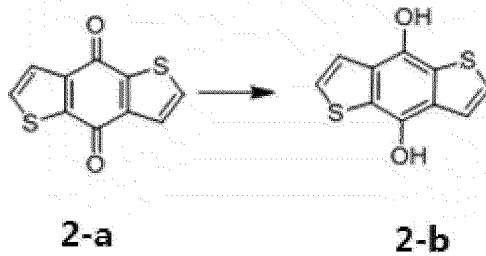
- [361] 도 9는 화합물 A-2의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [362] 도 10은 화합물 A-2의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다,
- [363] 제조예 2. 화합물 A-3의 제조
- [364]



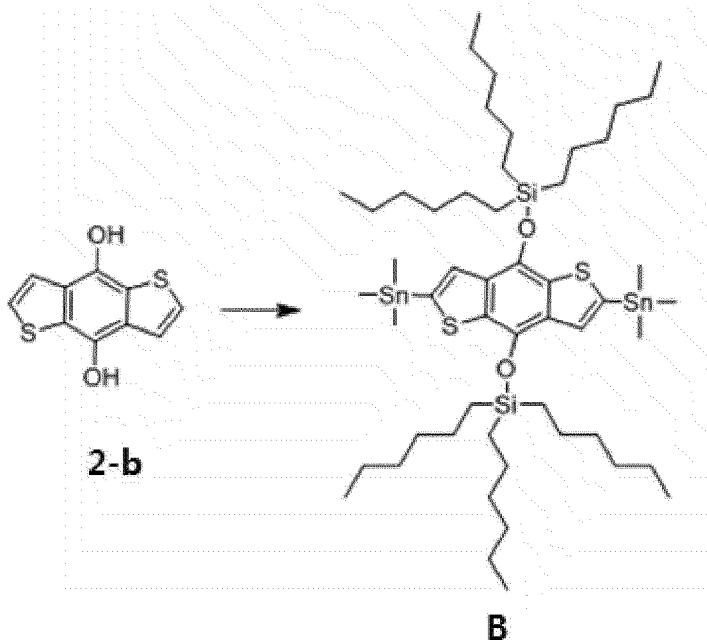
- [366] 30 mL 톨루엔과 10mL 디메틸포름아마이드에 DPP (1.48 g, 2.08 mmol)과 A-1 (0.93 g, 0.80 mmol)을 녹이고, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 촉매 (0.0289 g, 0.025 mmol)을 넣고, 110 °C에서 48시간 교반하였다. 반응 후, 이 용액을 디클로로메탄으로 추출한 후, MgSO<sub>4</sub> (Magnesium sulfate)로 잔여 물을 제거 후,

감압 하에 용매를 제거하였다. 잔류 생성물을 실리카 컬럼(silica column, eluent: chloroform)을 통해서 빨간색의 고체 A-3을 얻었다. (수율: 49%)

- [367] 도 11은 화합물 A-3의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [368] 도 12는 화합물 A-3의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [369] 제조예 3. 화합물 B의 제조
- [370] (1) 화합물 2-b의 제조
- [371]

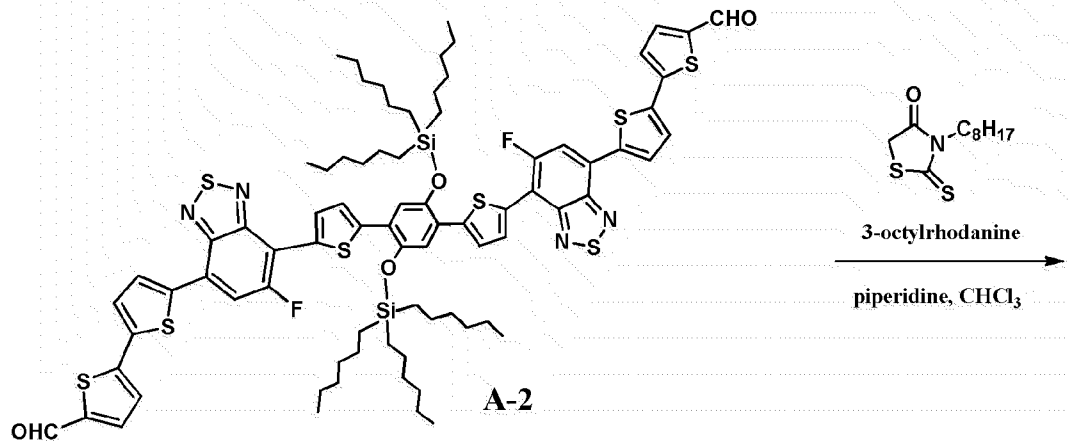


- [372] 200mL 에탄올에 2-a(13.95g, 0.063mmol)을 첨가한 현탁액을 교반하며, 얼음/물 수조(ice/water bath)에서 냉각시키면서, NaBH<sub>4</sub>(5.27g, 0.139mmol)을 한번에 첨가하였다. 상기 반응물을 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 그 후, 250mL HCl을 부어주어 반응을 종결한 후, 크루드(Crude) 생성물을 여과하고, 충분한 양의 물로 세척한 후, 70°C에서 감압하여 건조하였다. 건조 후, 녹색 고체 2-b를 얻었다. (수율: 98%)
- [373] 도 6은 화합물 2-b의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [374] (2) 화합물 B의 제조
- [375]

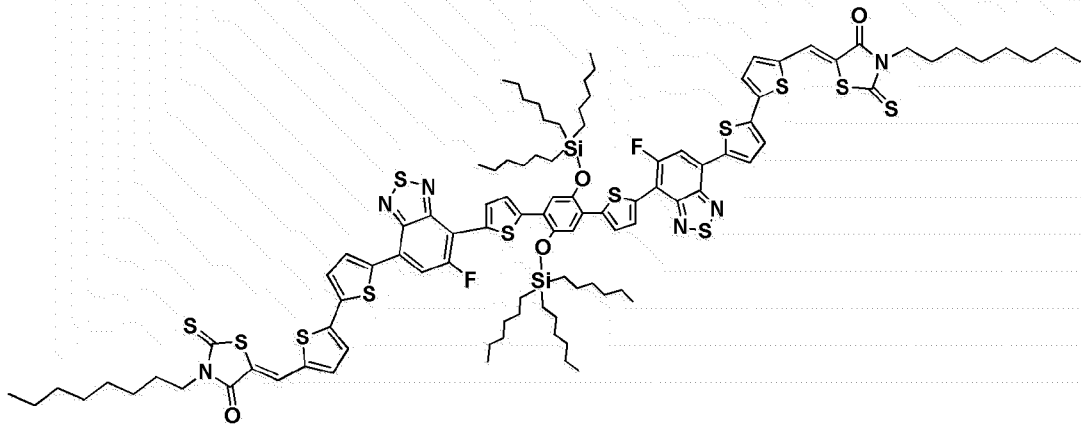


- [376] 상기 제조예 1에서 1-b 대신 2-b를 사용하는 것을 제외하고는 상기 제조예 1과 동일하게 제조하였다.
- [377] 제조예 4. 화합물 1의 제조

[378]



[379]



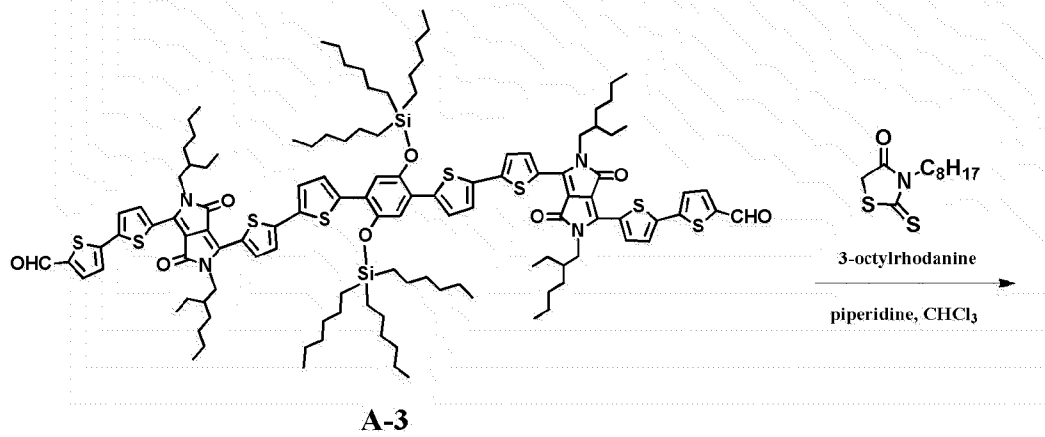
[380]  $\text{CHCl}_3$  40mL에 상기 화합물 A-2(0.153g, 0.1 mmol)와 3-옥틸로다닌 (0.245g, 1 mmol)을 녹이고 상온에서 피퍼리딘 세 방울을 넣고 24시간 동안 환류하였다. 반응 후, DCM으로 추출한 후,  $\text{MgSO}_4$ 로 잔여 물을 제거 후, 감압 하에 용매를 제거하였다. 잔류 생성물을 실리카 컬럼(eluent:  $\text{CHCl}_2$  to  $\text{CHCl}_3$ )을

[381] 통해서 어두운 갈색의 고체를 얻었다. 얻어진 고체를  $\text{CHCl}_3$ 와 n-헥산으로 3회 재결정을 통해 화합물 1을 얻었다. (수율: 56%)

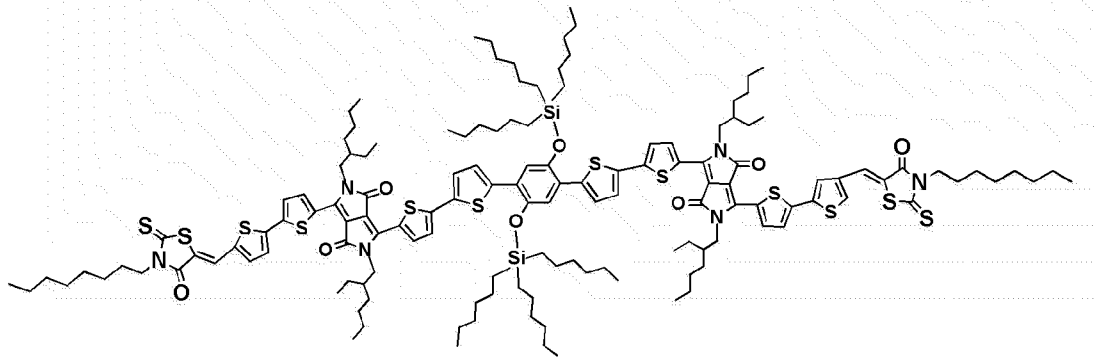
[382] 도 13은 화합물 1의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[383] 제조예 5. 화합물 2의 제조

[384]



[385]



[386]  $\text{CHCl}_3$  40mL에 상기 화합물 A-3(0.42g, 0.2 mmol)와 3-옥틸로다닌 (0.368g, 1.5 mmol)을 녹이고 상온에서 피퍼리딘 세 방울을 넣고 24시간 동안 환류하였다. 반응 후, DCM으로 추출한 후,  $\text{MgSO}_4$ 로 잔여 물을 제거 후, 감압 하에 용매를 제거하였다. 잔류 생성물을 실리카 컬럼 (eluent:  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  to  $\text{CHCl}_3$ )을 통해서 어두운 갈색의 고체를 얻었다. 얻어진 고체를  $\text{CHCl}_3$ 와 n-헥산으로 3회 재결정을 통해 화합물 2를 얻었다. (수율: 60.5%)

[387] 도 14는 화합물 2의 MS 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[388] 도 15는 화합물 2의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[389] 도 16은 화합물 2의 UV-vis 흡수 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[390] 구체적으로 도 16의 UV 흡광 스펙트럼은 필름 상태 및 용액상태의 화합물 2의 흡수 스펙트럼으로, UV-Vis 흡수 스펙트럼(UV-Vis absorption spectrometer)를 이용하여 분석하였으며, 하기 표 1에 그 결과를 나타내었다.

[391] [표1]

	$\lambda_{\text{max}}$ (CB)(nm)	$\lambda_{\text{max}}$ (film)(nm)	$\lambda_{\text{Op.BG}}$ (eV)	$\lambda_{\text{Ec.BG}}$ (eV)	HOMO(eV)
화합물 2	690	770	1.38	1.47	5.20

[392] 도 18은 화합물 2의 포텐션(Potential)에 따른 전류(Current)를 나타낸 도이다.

[393] 실험예 1. 유기 태양 전지의 제조

- [394] 상기 화합물 2와 PC<sub>70</sub>BM 을 1:1.25로 클로로벤젠(Chlorobenzene, CB)에 녹여 복합 용액(composit solution)을 제조하였다. 이때, 농도는 4 wt%로 조절하였으며, 유기 태양전지는 ITO/ZnO/광활성층/MoO<sub>3</sub>/Ag 의 인버티드 구조로 하였다.
- [395] ITO는 바타입(bar type)으로 1.5 × 1.5 cm<sup>2</sup>가 코팅된 유리 기판은 증류수,
- [396] 아세톤, 2-프로판올을 이용하여 초음파 세척하고, ITO 표면을 10 분 동안 오존 처리한 후 산화 아연 전구체(ZnO precursor solution: ZnO nanoparticle 25mg/ml inbutanol)를 만들고, 이 산화아연(ZnO) 용액을 4000 rpm으로 40초간 스핀 코팅(spin-coating) 한 후, 100°C 에서 10분간 열처리하여 남아있는 용매를 제거하여 전자수송층을 완성하였다. 광활성층의 코팅을 위해서 화합물 2와 PC<sub>70</sub>BM의 복합 용액을 1000rpm으로 20초간 스핀 코팅하였다. 열증착기에서 MoO<sub>3</sub>를 0.2 Å/s의 속도로 10 nm의 두께로 증착하여 정공수송층을 제조하였다. 상기 순으로 제조 후 열증착기 내부에서 Ag를 1 Å/s의 속도로 100 nm 증착하여 역방향 구조의 유기 태양전지를 제조하였다.
- [397] 상기 실험예 1에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5)조건에서 측정하고, 하기 표 2에 그 결과를 나타내었다.

[398] [표2]

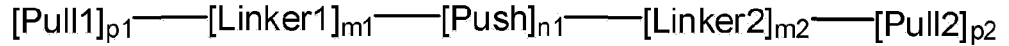
	Voc (V)	Jsc (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE (%)
실험예 1	0.81	10.78	62.7	5.47

- [399] 도 17은 실험예 1에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.
- [400] 상기 Voc는 개방전압을, Jsc는 단락전류를, FF는 충전율(Fill factor)를, PCE(η)는 에너지 변환 효율을 의미한다. 개방전압과 단락전류는 각각 전압-전류
- [401] 밀도 곡선의 4사분면에서 X축과 Y축 절편이며, 이 두 값이 높을수록 태양전지의 효율은 바람직하게 높아진다. 또한 충전율(Fill factor)은 곡선 내부에 그릴 수 있는 직사각형의 넓이를 단락전류와 개방전압의 곱으로 나눈 값이다. 이 세 가지 값을 조사된 빛의 세기로 나누면 에너지 변환 효율을 구할 수 있으며, 높은 값일수록 바람직하다. 상기 표 2의 결과로 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체는 높은 효율을 나타내는 것을 확인할 수 있다.

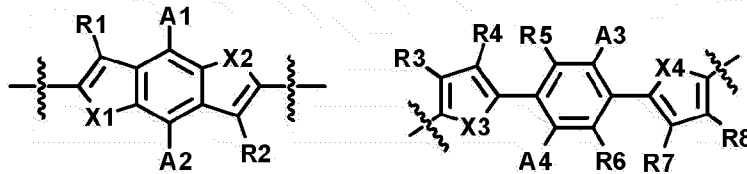
### 청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

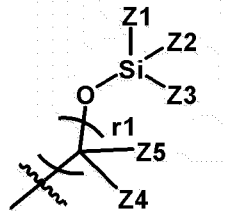
[화학식 1]



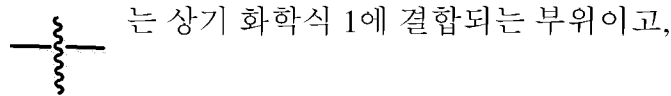
상기 화학식 1에 있어서,  
 n1은 1 내지 3의 정수이고,  
 m1, m2, p1 및 p2는 각각 0 내지 3의 정수이며,  
 상기 n1, m1, m2, p1 및 p2가 2 이상일 경우, 2 이상의 대괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,  
 상기 p1이 0인 경우, 말단의 Linker1에 Pull1 대신 수소 또는 탄화수소가 결합되며,  
 상기 p2가 0인 경우, 말단의 Linker2에 Pull2 대신 수소 또는 탄화수소가 결합되고,  
 Push는 하기 구조 중 어느 하나이며,



상기 구조에 있어서,  
 X1 내지 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 또는 Te이며,  
 R, R', R1 내지 R8, A3 및 A4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기가거나, 상기 R5 및 R6; 또는 A3 및 A4는 하기 화학식 2로 표시되며,  
 A1 및 A2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되며,  
 [화학식 2]



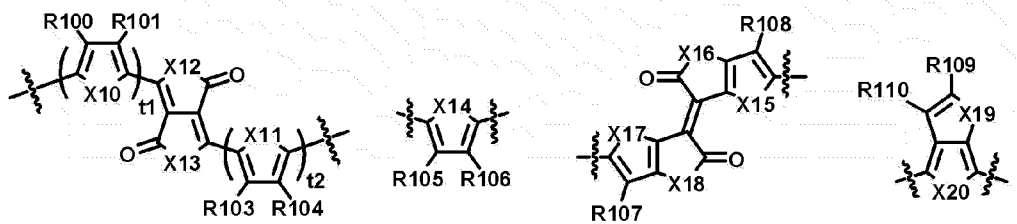
상기 화학식 2에 있어서,  
 r1은 0 내지 3의 정수이며,  
 r1이 2 이상일 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,  
 Z1 내지 Z5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소;  
 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환  
 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는  
 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된  
 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된  
 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된  
 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환  
 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는  
 비치환된 헤테로고리기이며,

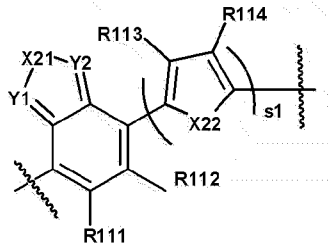


Linker1 및 Linker2는 서로 같거나 상이하며, 2개의 연결기이고,  
 Pull1 및 Pull2는 서로 같거나 상이하며, 전자 받개 구조이다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서,  
 상기 Pull1 및 Pull2는 상기 화합물 내에서 환원(reduction)특성을 갖는  
 것인 화합물.

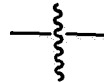
[청구항 3] 청구항 1에 있어서,  
 상기 Linker1 및 Linker2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기  
 구조 중 어느 하나인 것인 화합물:





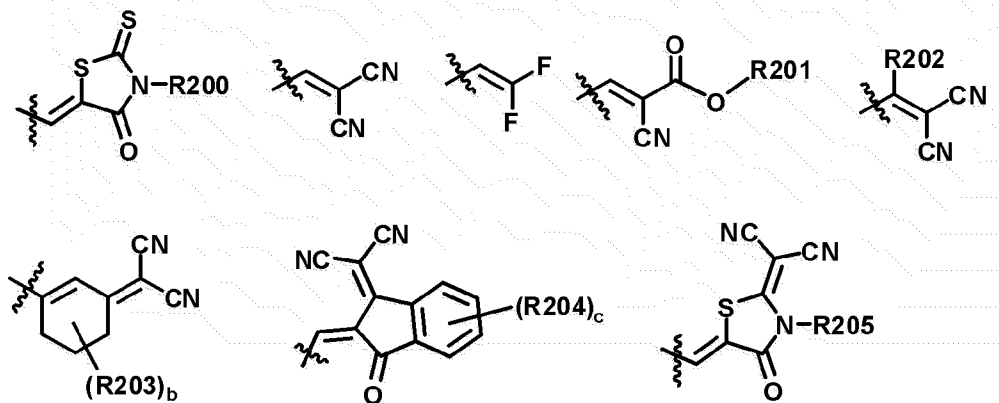
상기 구조에 있어서,  
 s1은 1 내지 3의 정수이며,  
 s1이 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하며,  
 X10 내지 X22는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, NR<sub>a</sub>, O, SiR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, PR<sub>a</sub>, S, GeR<sub>a</sub>R<sub>b</sub>, Se 또는 Te이며,  
 Y1 및 Y2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR<sup>"</sup>, N, SiR<sup>"</sup>, P 또는 GeR<sup>"</sup>이고,

R<sub>a</sub>, R<sub>b</sub>, R<sup>"</sup> 및 R101 내지 R114는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소가; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

 는 기 화학식 1에 결합되는 부위이다.

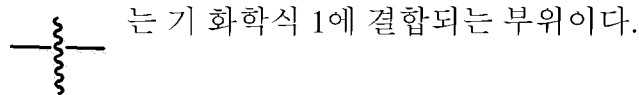
[청구항 4]

청구항 1에 있어서,  
 상기 Pull1 및 Pull2은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기 구조 중 어느 하나인 것인 화합물:



상기 구조에 있어서,

b는 1 내지 7의 정수이고,  
 c는 1 내지 4의 정수이며,  
 b 및 c가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나  
 상이하고,  
 R200 내지 R205는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소;  
 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환  
 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는  
 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된  
 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된  
 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된  
 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환  
 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는  
 비치환된 헤테로고리기이며,



[청구항 5] 청구항 1에 있어서,  
 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-1 내지 1-3 중 어느 하나로 표시되는 것인  
 화합물:

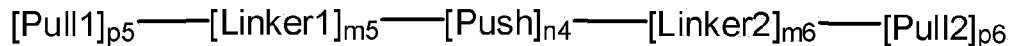
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]



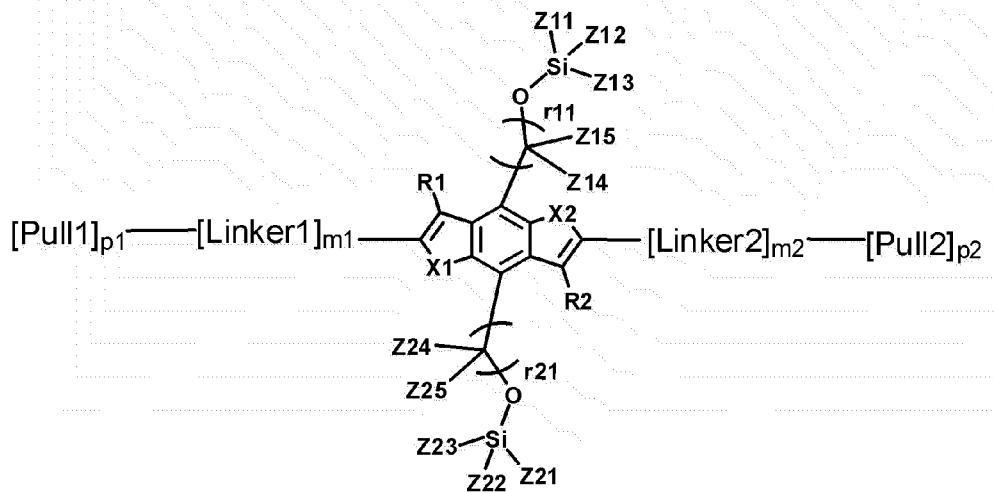
[화학식 1-3]



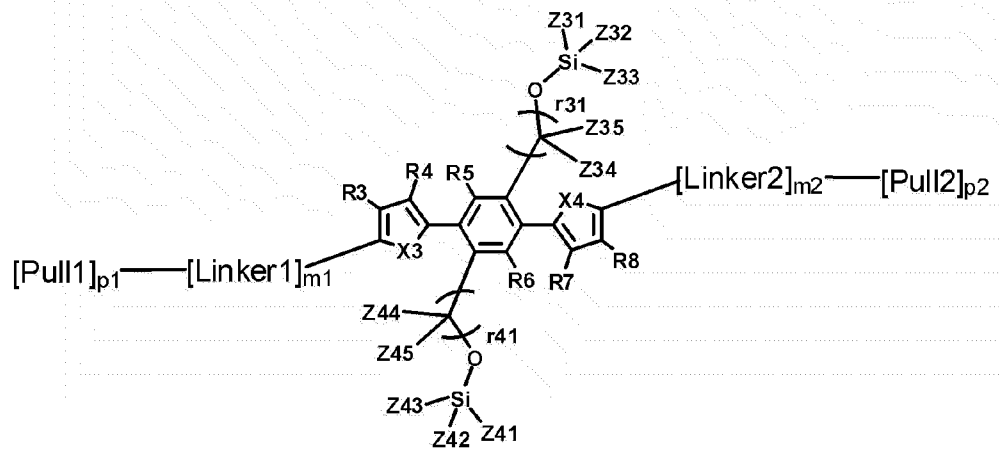
상기 화학식 1-1 내지 1-3에 있어서,  
 n2 내지 n4, m3 내지 m6 및 p3 내지 p6는 각각 1 내지 3의 정수이며,  
 n2 내지 n4, m3 내지 m6 및 p3 내지 p6가 각각 2 이상인 경우, 2 이상의  
 대괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하며,  
 Push, Linker1, Linker2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과 동일하고,  
 상기 Linker 1 및 Linker 2의 말단에는 수소가 결합된다.

[청구항 6] 청구항 1에 있어서,  
 상기 화학식 1은 하기 화학식 1-4 내지 1-6 중 어느 하나로 표시되는 것인  
 화합물:

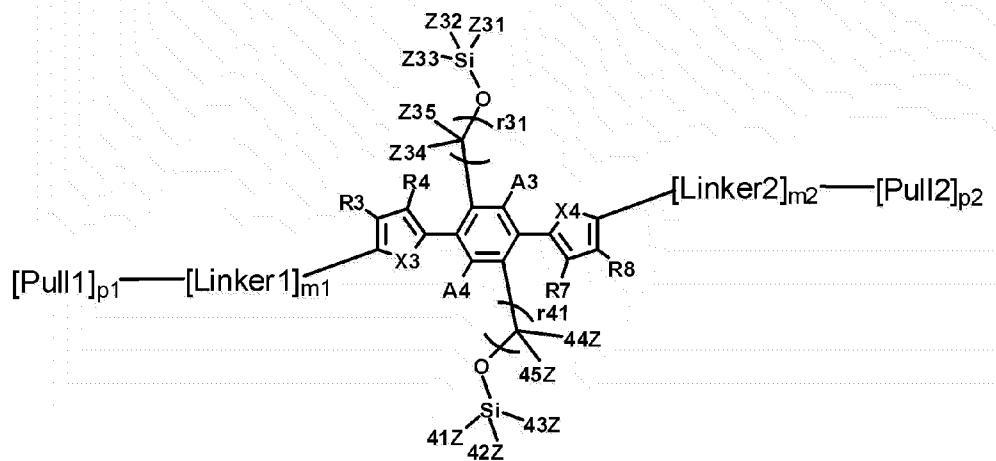
[화학식 1-4]



[화학식 1-5]



[화학식 1-6]



상기 화학식 1-4 내지 1-6에 있어서,  
 m1, m2, p1, p2, Linker1, Linker2, Pull1 및 Pull2의 정의는 상기 화학식 1과

동일하고,

X1 내지 X4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 또는 Te이며,

R, R', R1 내지 R8, A3 및 A4는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기;

히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된

시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된

아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된

아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는 비치환된

아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기;

치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는

비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

r11, r21, r31 및 r41은 각각 0 내지 3의 정수이며,

r11, r21, r31 및 r41이 2 이상일 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 같거나 상이하고,

Z11 내지 Z15, Z21 내지 Z25, Z31 내지 Z35 및 Z41 내지 Z45는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; 니트릴기; 니트로기;

이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는

비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는

비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는

비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폰시기; 치환 또는

비치환된 아릴술폰시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는

비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된

아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된

헤테로고리기이다.

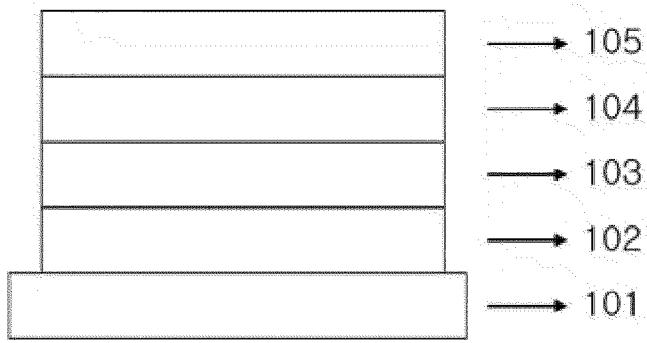
[청구항 7] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 6 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지.

[청구항 8] 청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 정공 수송층, 정공 주입층 또는 정공 수송과 정공 주입을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 정공 수송층, 정공 주입층 또는 정공 수송과 정공 주입을 동시에 하는 층은 상기 화합물을 포함하는 유기 태양 전지.

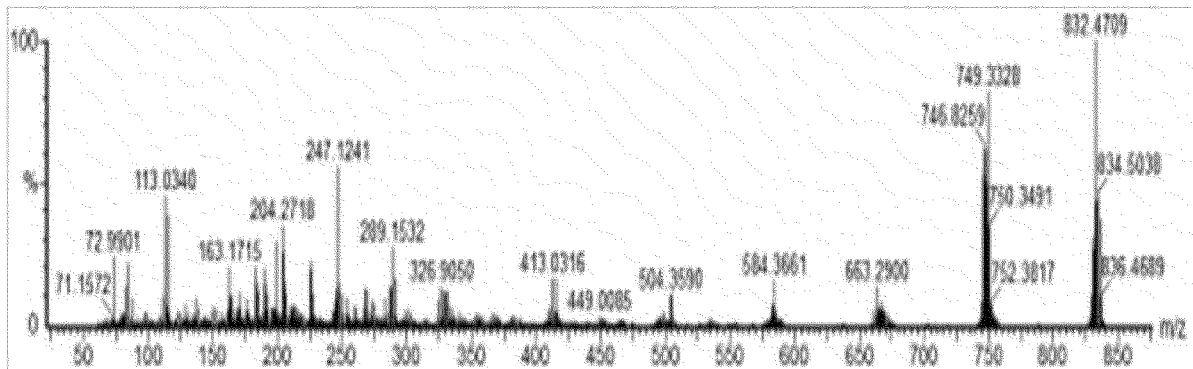
[청구항 9] 청구항 7에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 전자주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는

- 층은 상기 화합물을 포함하는 유기 태양 전지.
- [청구항 10] 청구항 7에 있어서,  
상기 광활성층은 전자 주개 및 전자 받개로 이루어진 군에서 선택되는 1 또는 2 이상을 포함하고,  
상기 전자 주개는 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지.
- [청구항 11] 청구항 10에 있어서,  
상기 전자 주개 및 전자 받개는 벌크 헤테로 정션(BHJ)을 구성하는 것인 유기 태양 전지.
- [청구항 12] 청구항 7에 있어서,  
상기 광활성층은 n형 유기물층 및 p형 유기물층을 포함하는 이중 박막(bilayer)구조이며,  
상기 p형 유기물층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지.

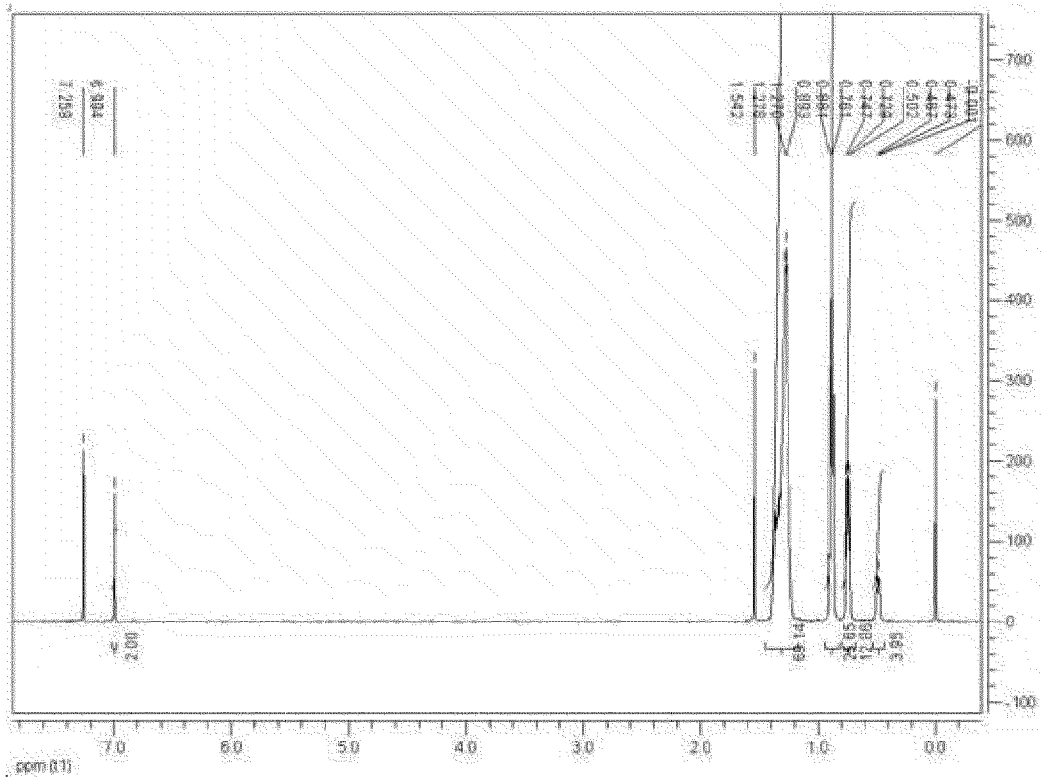
[도1]



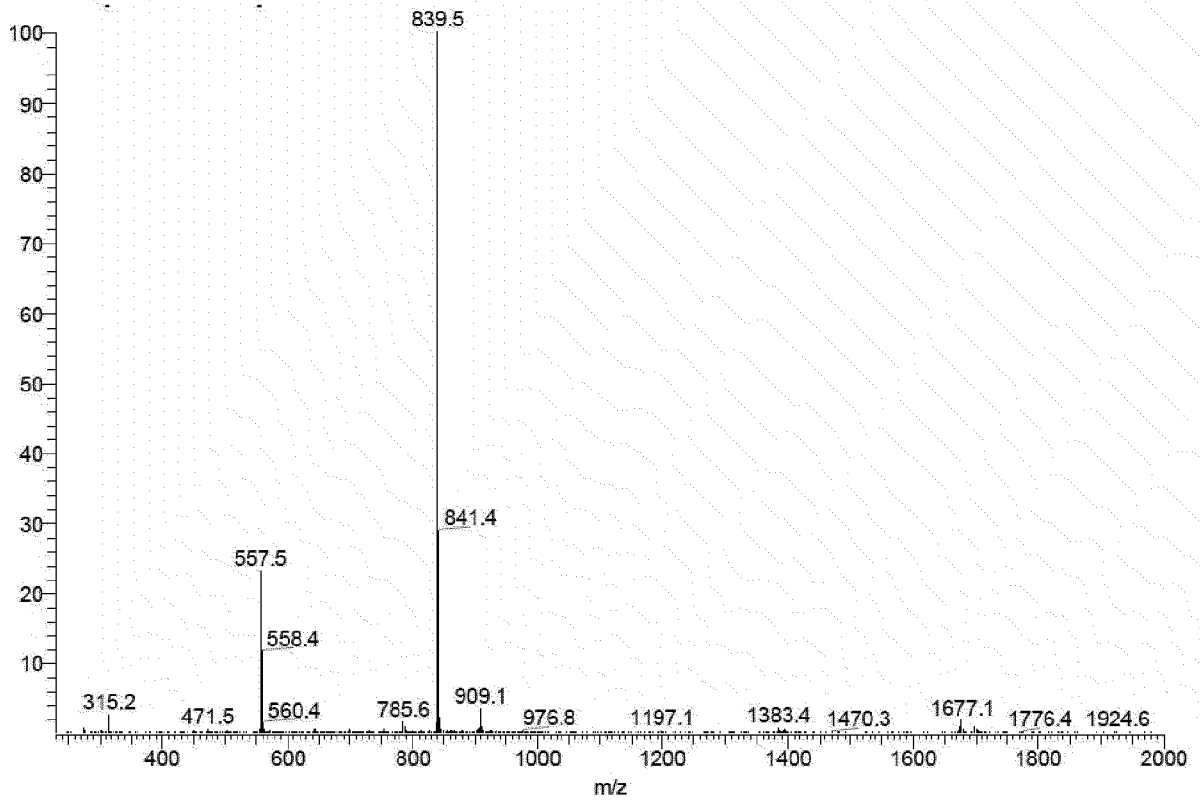
[도2]



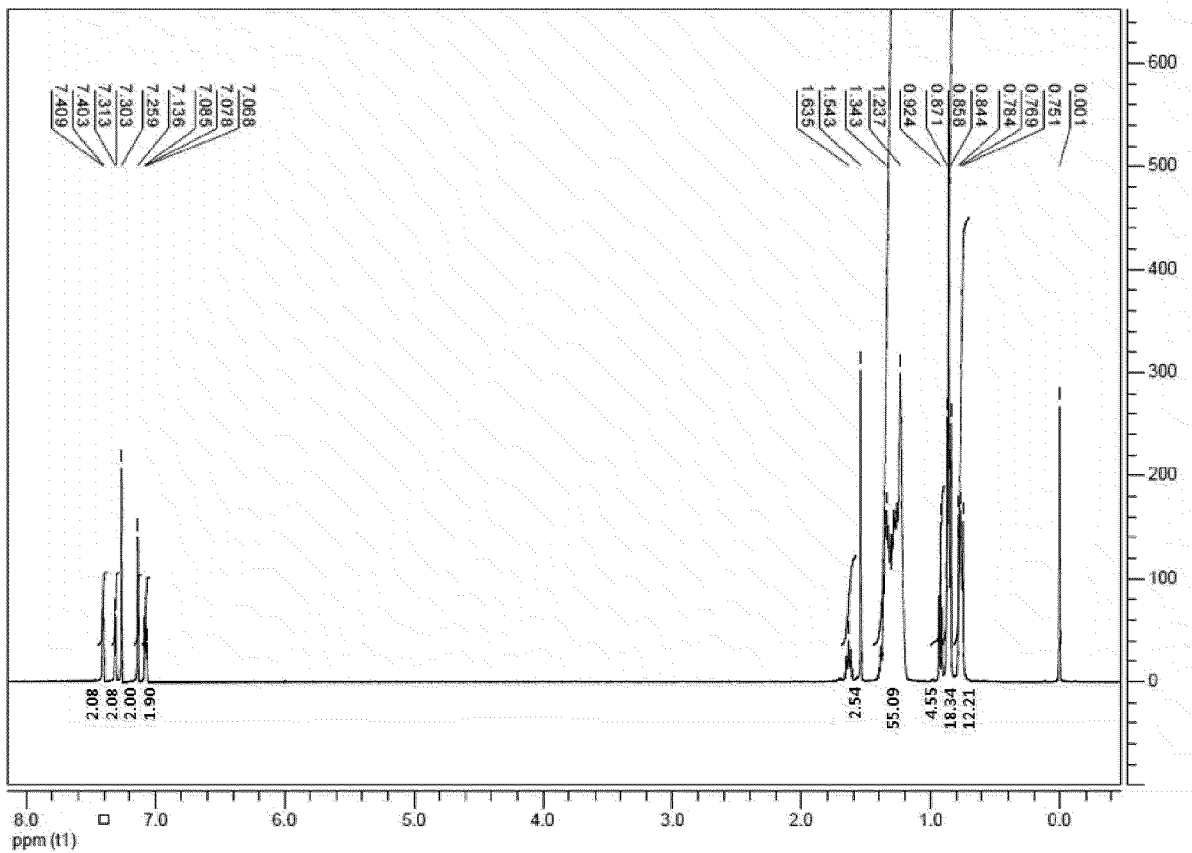
[도3]



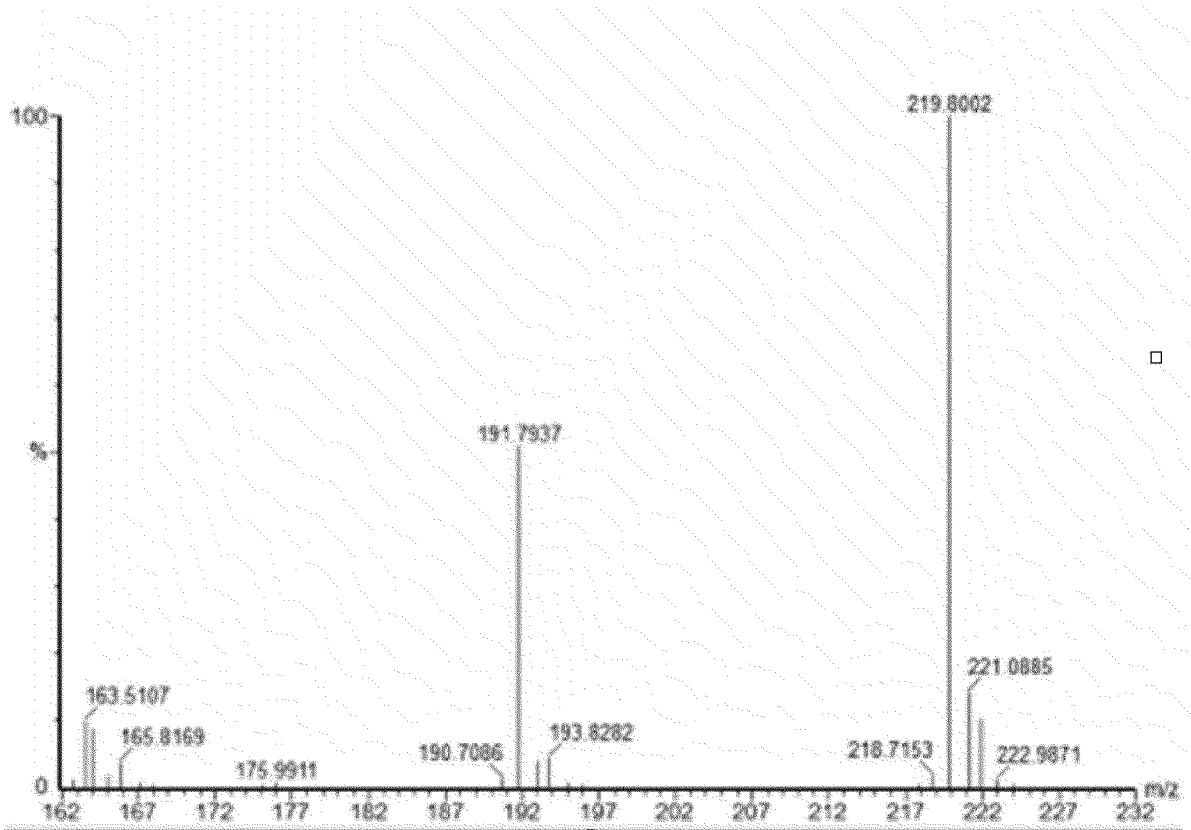
[도4]



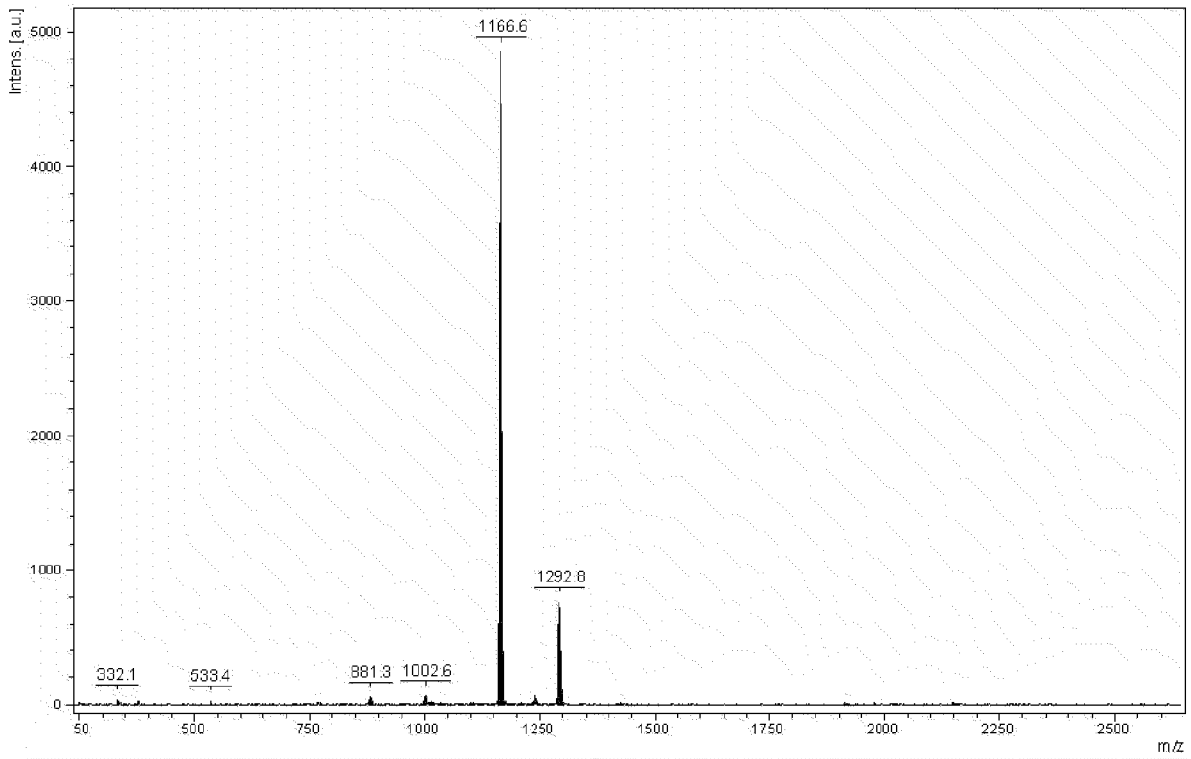
[도5]



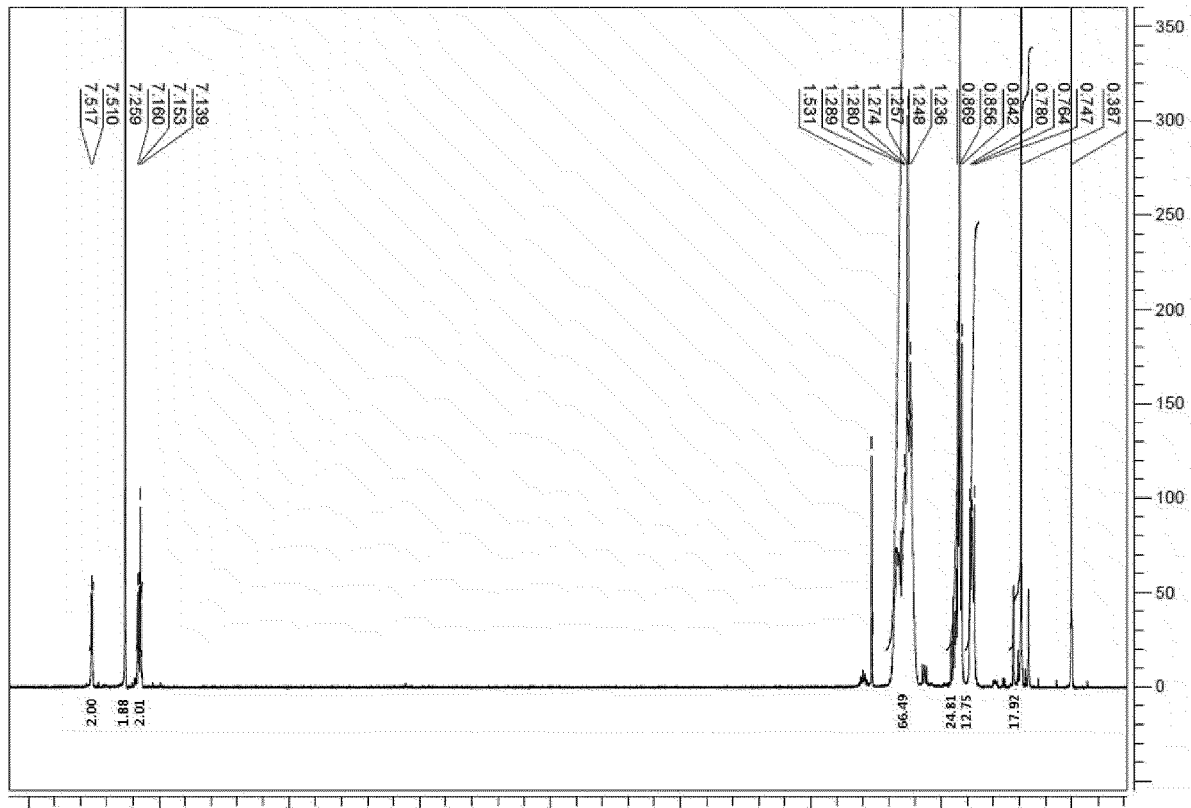
[도6]



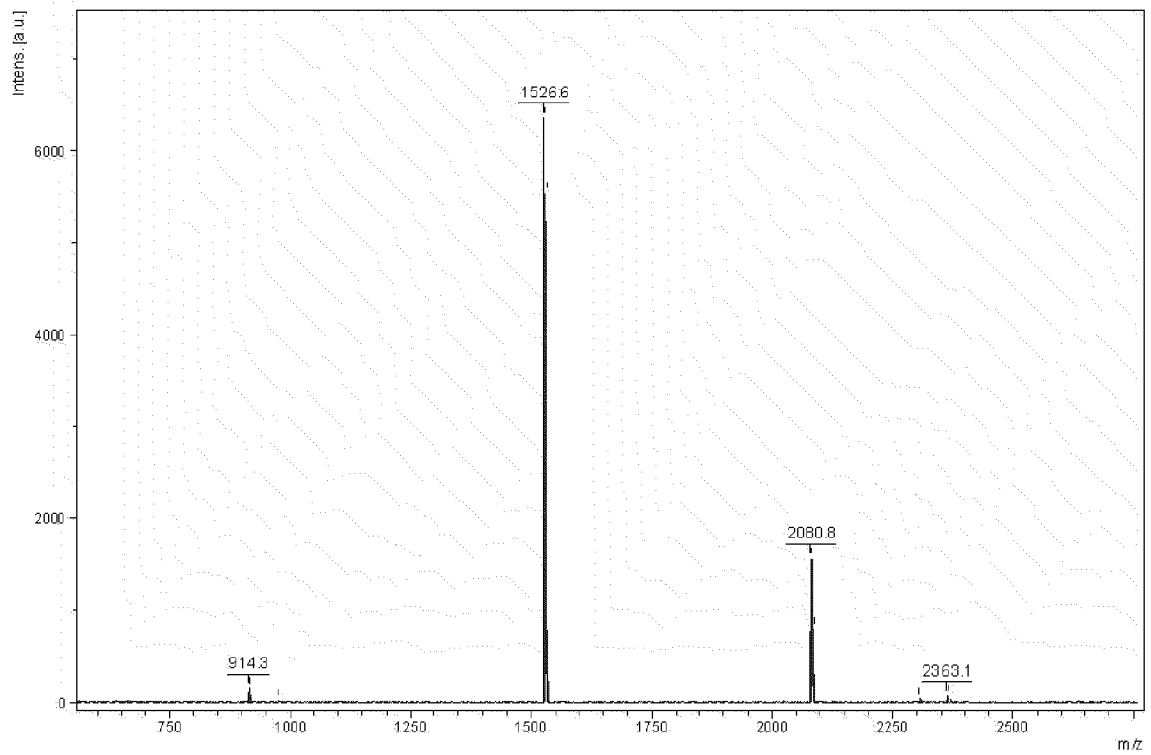
[도7]



[도8]

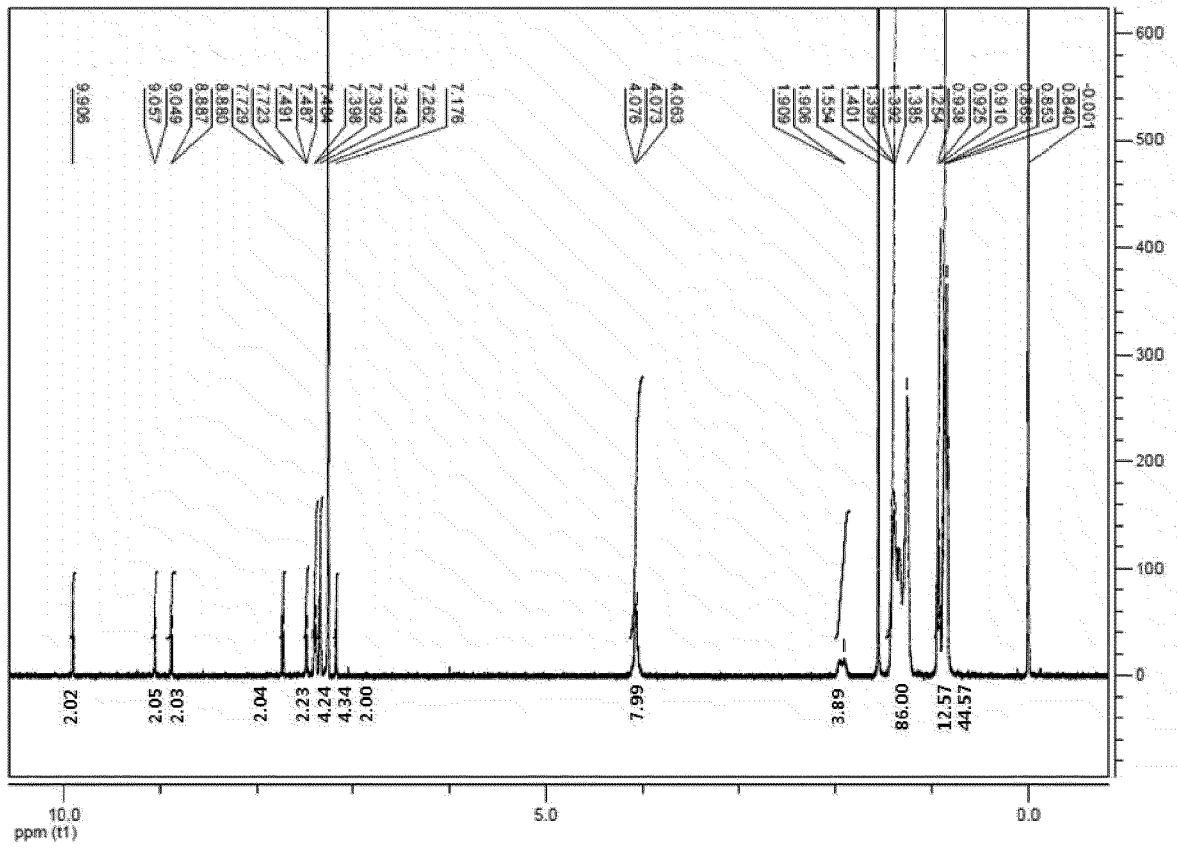


[도9]

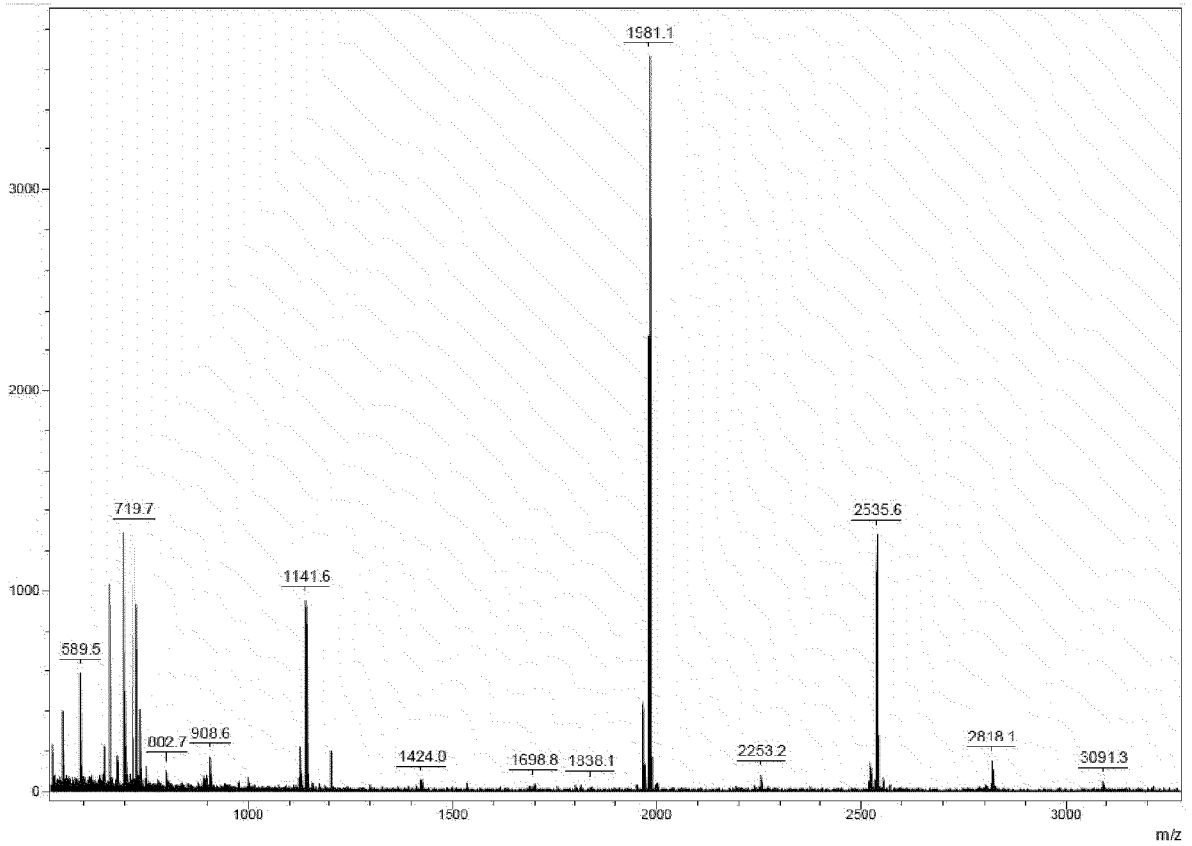




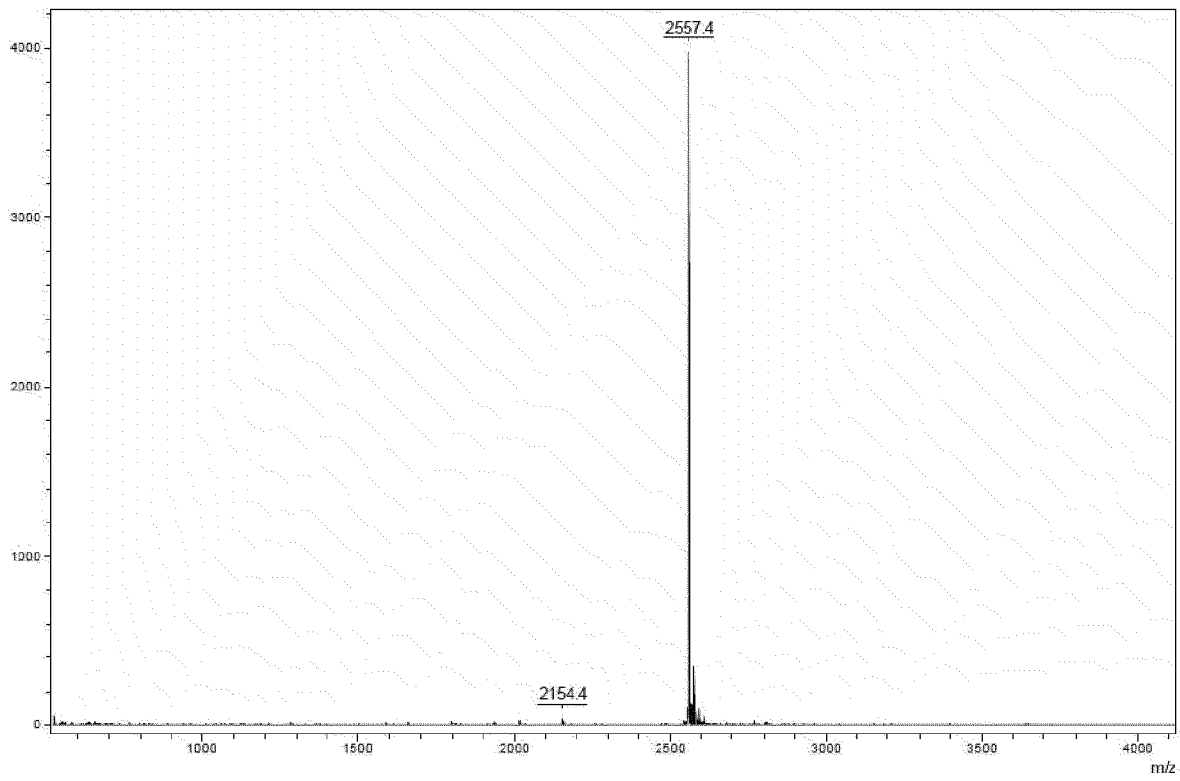
[도 12]



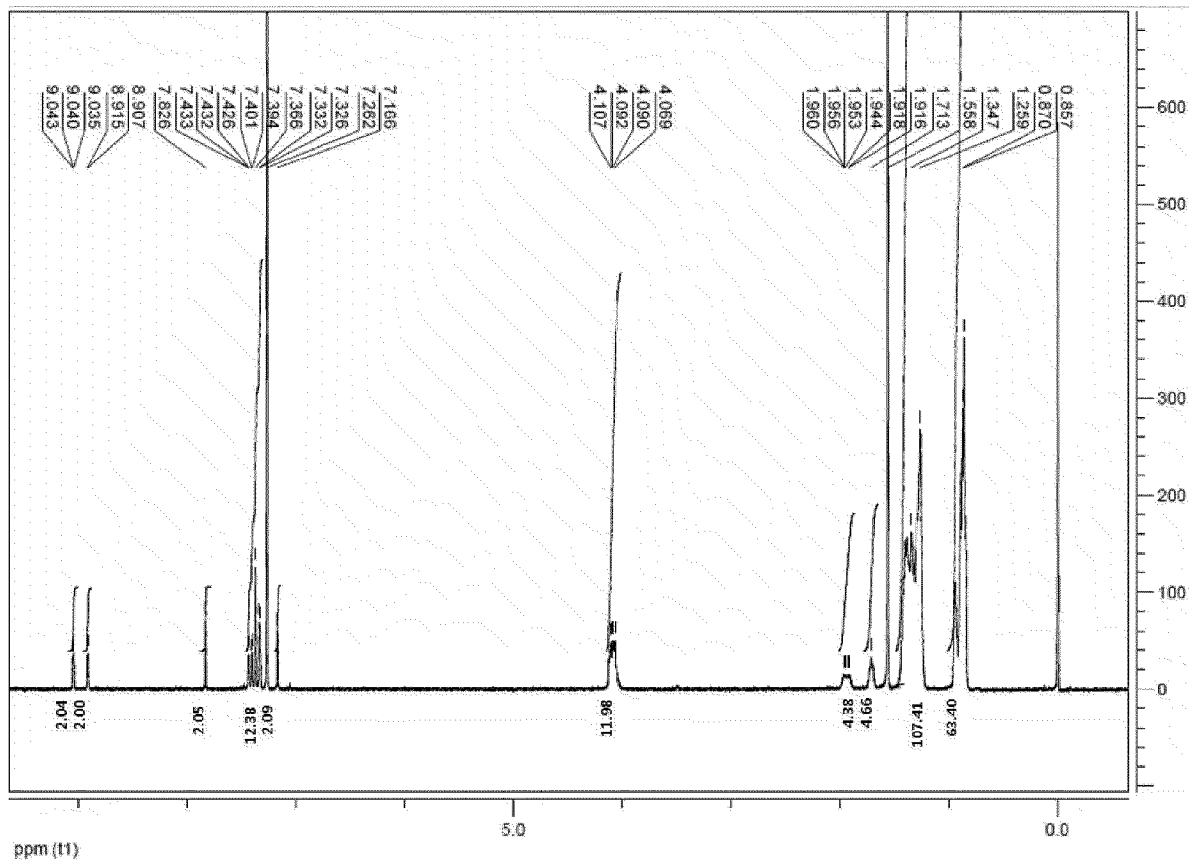
[도 13]



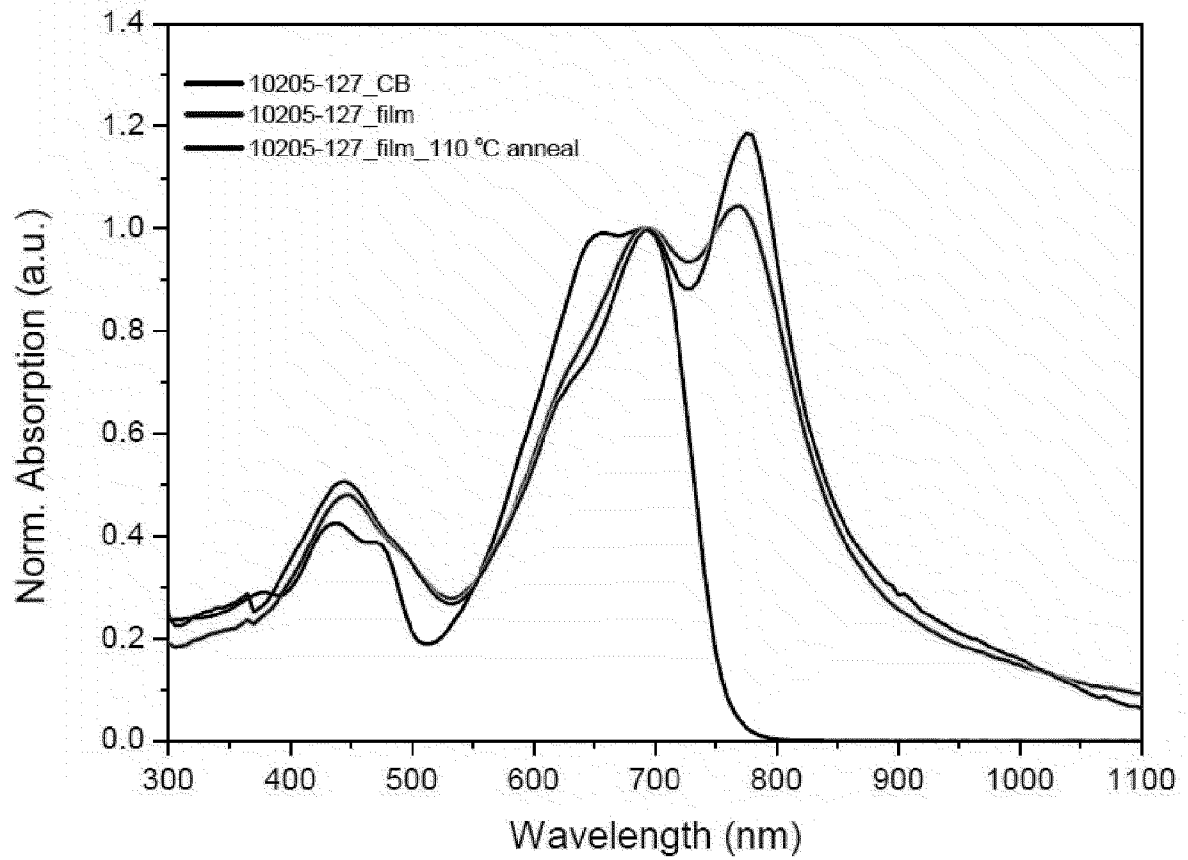
[도 14]



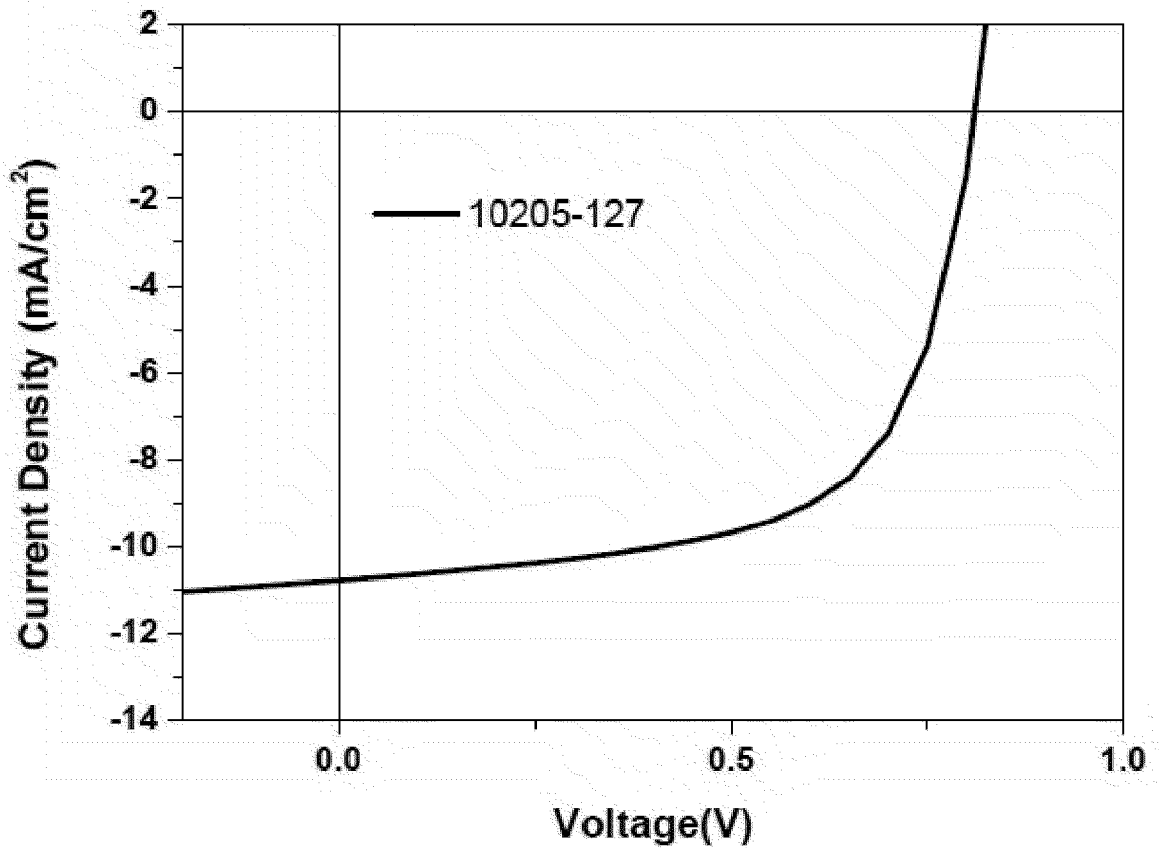
[도 15]



[도16]



[도17]



[도 18]

