(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0026287
(43) 공개일자 2017년03월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 421/14 (2006.01) *C07D 487/04* (2006.01)
C07D 495/04 (2006.01) *H01L 51/05* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07D 421/14 (2013.01)
C07D 487/04 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-0110359
(22) 출원일자 2016년08월29일
심사청구일자 2016년08월29일
(30) 우선권주장
1020150121881 2015년08월28일 대한민국(KR)

(71) 출원인
이화여자대학교 산학협력단
서울특별시 서대문구 이화여대길 52 (대현동, 이화여자대학교)
(72) 발명자
김경곤
서울특별시 성북구 월곡로14길 26, 107동 104호 (하월곡동, 월곡래미안루나밸리아파트)
김원석
서울특별시 동대문구 답십리로66길 46-10 (장안동)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인엠에이피에스

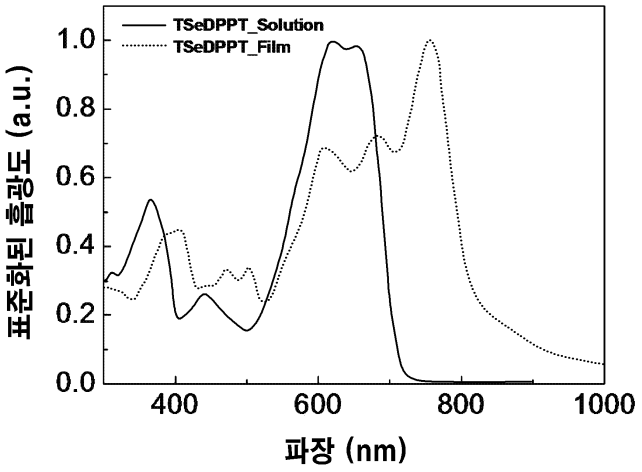
전체 청구항 수 : 총 7 항

(54) 발명의 명칭 **셀레늄-함유 유기반도체 화합물 및 이의 제조 방법**

(57) 요 약

셀레늄-함유 유기반도체 화합물, 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조 방법, 및 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 포함하는 광전소자에 관한 것이다.

대 표 도 - 도2



(52) CPC특허분류
C07D 495/04 (2013.01)
H01L 51/05 (2013.01)

(72) 발명자
류가연
서울특별시 서대문구 연세로2마길 17, 403호 (대현동, 이화원룸)

성단비
서울특별시 관악구 문성로32길 40, B01호 (신림동)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 2015M1A2A2057506
부처명 미래창조과학부
연구관리전문기관 한국연구재단
연구사업명 기후변화대응기술개발사업
연구과제명 고효율 고안정 유기태양전지 소자 기술 개발
기 여 율 30/100
주관기관 이화여자대학교 산학협력단
연구기간 2015.10.19 ~ 2016.10.18이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 20133030000210
부처명 산업통상자원부
연구관리전문기관 한국에너지기술평가원
연구사업명 산업기술혁신사업 에너지기술개발사업
연구과제명 스프레이공정을 이용한 개방전압 1.2V, 광전효율 9% 이상의 양자점/유기 탠덤구조 태양전지 제조기술개발
기 여 율 40/100
주관기관 국민대학교산학협력단
연구기간 2013.12.01 ~ 2016.09.30이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 20123010010140
부처명 산업통상자원부
연구관리전문기관 한국에너지기술평가원
연구사업명 지식경제 기술혁신사업
연구과제명 400㎠의 면적에서 효율 7%이상을 갖는 유기 태양전지 서브 모듈 및 이를 위한 소재, 장비, 생산 공정기술 개발
기 여 율 30/100
주관기관 LG화학
연구기간 2012.11.01 ~ 2017.10.31이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 2011-0031567
부처명 미래창조과학부
연구관리전문기관 한국연구재단
연구사업명 원천기술개발사업-글로벌프론티어연구개발사업-멀티스케일 에너지 시스템 연구
연구과제명 삼차원 멀티스케일 광에너지 기술 공동연구
기 여 율 30/100
주관기관 서울대학교산학협력단
연구기간 2014.09.01 ~ 2020.08.31이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 20133030000210
부처명 산업통상자원부
연구관리전문기관 한국에너지기술평가원
연구사업명 산업기술혁신사업 에너지기술개발사업
연구과제명 스프레이공정을 이용한 개방전압 1.2V, 광전효율 9% 이상의 양자점/유기 탠덤구조 태양전지 제조기술개발
기 여 율 40/100
주관기관 국민대학교산학협력단
연구기간 2013.12.01 ~ 2016.09.30이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 20123010010140
부처명 산업통상자원부
연구관리전문기관 한국에너지기술평가원
연구사업명 지식경제 기술혁신사업
연구과제명 400㎠의 면적에서 효율 7%이상을 갖는 유기 태양전지 서브 모듈 및 이를 위한 소재, 장비, 생산 공정기술 개발
기 여 율 30/100
주관기관 LG화학
연구기간 2012.11.01 ~ 2017.10.31

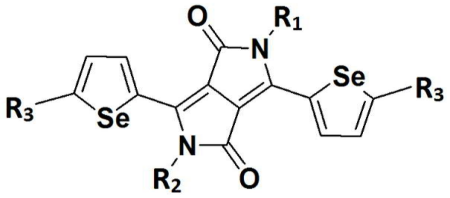
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로서 표시되는, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물:

[화학식 1]



;

상기 화학식 1에서,

R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기임.

청구항 2

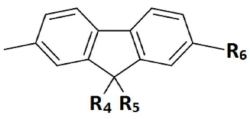
제 1 항에 있어서,

상기 헤테로탄화수소고리기 또는 헤테로아릴기에 포함되는 헤테로원소는 N, O, S, Te, Se, 및 이들의 조합들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물.

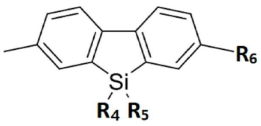
청구항 3

제 1 항에 있어서,

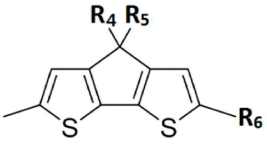
상기 R_3은 하기 치환기로부터 선택된 것을 포함하는 것인, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물:



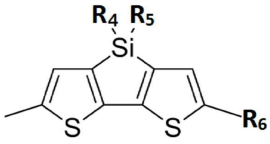
;



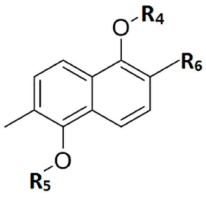
;



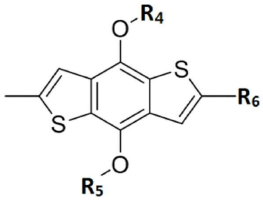
;



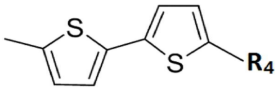
;



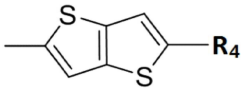
;



;



;



;

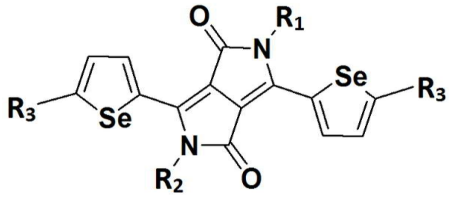
여기서, R_4 내지 R_6은 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의

알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기임.

청구항 4

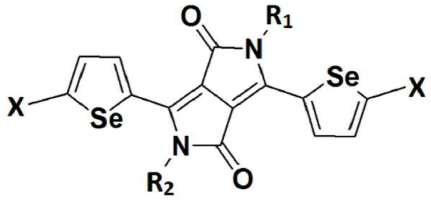
하기 화학식 2로서 표시되는 화합물과 하기 화학식 3으로서 표시되는 화합물을 반응시켜 하기 화학식 1로서 표시되는 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 제조하는 것을 포함하는, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조 방법:

[화학식 1]



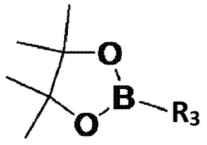
;

[화학식 2]



;

[화학식 3]



;

상기 화학식들에서,

R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

X는 할로겐임.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 헤테로탄화수소고리기 또는 헤테로아릴기에 포함되는 헤테로원소는 N, O, S, Te, Se, 및 이들의 조합들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물.

청구항 6

제 4 항에 있어서,

상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 상기 스즈키 크로스 커플링(suzuki cross-coupling) 반응에 의하여 제조되는 것인, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조 방법.

청구항 7

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 포함하는, 광전소자.

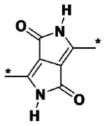
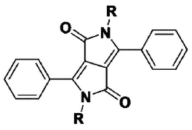
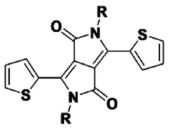
발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본원은, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물, 이의 제조 방법, 및 이를 포함하는 광전소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 현재까지 광전소자용 유기반도체의 전하의 이동도를 향상시키기 위한 연구들은 열을 가하거나 자기 조립(self-assembly) 방법을 이용하여 유기분자의 결정화를 유도하는 연구가 많이 이루어져 왔다. 그러나, 무엇보다 분자간(inter-molecular)의 전도가 쉽게 일어나도록 분자를 설계하는 것이 중요하다.

[0003] 이러한 이유로 인해, 1980 년 이후부터 최근까지 다이케토피롤로피롤(diketopyrrolopyrrole, DPP)-기반 유도체들에 대한 합성 연구가 활발히 진행되고 있다. 상기 DDP-기반 유도체는 전자가 부족한 유도체로서 낮은 밴드갭을 가지고, 더 많은 태양빛을 흡수할 수 있어 결과적으로는 보다 많은 광자를 흡수 할 수 있게 해준다. 또한, 알킬 사슬들을 다양하게 도입하여 용액 공정 프로세스가 가능하다는 특징이 있다. 다이케토피롤로피롤 중심부 ()를 바탕으로 다양한 치환기를 도입함으로써 보다 나은 효율을 얻을 수 있다는 것은 다양한 문헌을 통해서 확인할 수 있으며, 이러한 사실은 앞으로 충분히 더 좋은 효율을 가지는 소재로서 개발 가능성이 있다는 것을 제시해 준다. 종래에 공지된 상기 치환기가 도입된 다이케토피롤로피롤은, 예를 들어,  (다이케토피롤로피롤-페닐) 또는  (다이케토피롤로피롤-티오펜) 등이 있다.

[0004] 최근, Less 그룹에서는 셀레노펜-다이케토피롤로피롤(selenophene-diketopyrrolopyrrole) 화합물의 단량체를 기반으로 한 고분자 유도체의 설계 및 합성을 통해서 기반 염료가 기존의 다이케토피롤로피롤(2,5-dihydro-1,4-dioxo-3,6-dithienylpyrrolo-[3,4-c]-pyrrol)와 같이 안정성 및 광학적 특성을 고려했을 때 차세대 감응제로서의 가능성을 제시하였다.

[0005] 한편, 대한민국 공개특허 제2011-0091711호에는 다이케토피롤로피롤에 S 함유 헤테로 방향족 고리가 직접 결합된 중합체를 유기 전계 효과 트랜지스터에서 유기반도체로서 사용하는 것에 관하여 개시되어 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 본원은, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물, 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조 방법, 및 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 포함하는 광전소자를 제공하고자 한다.

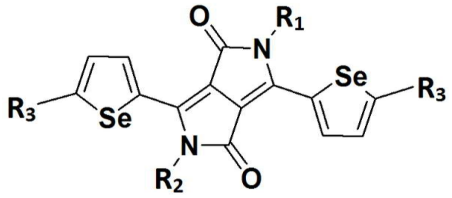
[0007] 그러나, 본원이 해결하고자 하는 과제는 이상에서 언급한 과제로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 과제들은 아래의 기재로부터 당업자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

[0008] 본원의 제 1 측면은, 하기 화학식 1로서 표시되는, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 제공한다:

[0009] 하기 화학식 1로서 표시되는, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물:

[0010] [화학식 1]

[0011] 

;

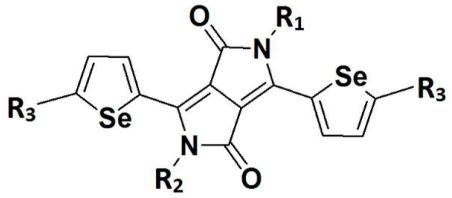
[0012] 상기 화학식 1에서,

[0013] R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

[0014] R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기임.

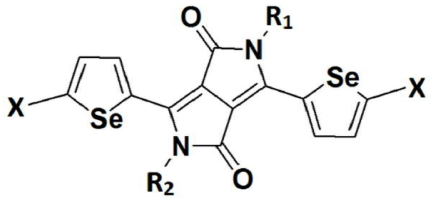
[0015] 본원의 제 2 측면은, 하기 화학식 2로서 표시되는 화합물과 하기 화학식 3으로서 표시되는 화합물을 반응시켜 하기 화학식 1로서 표시되는 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 제조하는 것을 포함하는, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조 방법을 제공한다:

[0016] [화학식 1]

[0017] 

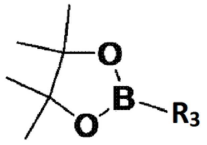
;

[0018] [화학식 2]

[0019] 

;

[0020] [화학식 3]

[0021] 

;

[0022] 상기 화학식들에서,

[0023] R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

[0024] R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

[0025] X는 할로겐임.

[0026] 본원의 제 3 측면은, 본원의 제 1 측면 또는 제 2 측면에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 포함하는 광전소자를 제공한다.

발명의 효과

[0027] 본원의 일 구현예에 의하면, 다양한 형태의 신규한 셀레늄-함유 유기반도체 화합물 및 이의 제조 방법을 제공할 수 있으며, 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 다이케토피롤로피롤-셀레노펜계 유기반도체를 포함하는 것일 수 있다.

[0028] 본원의 일 구현예에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 셀레늄을 포함하는 헤테로환(셀레노펜)을 포함함으로써, 셀레늄 분자간(Se…Se)의 상호작용으로 인한 분자간 전하 이동을 용이하게 할 수 있고, 황을 포함하는 헤테로환(티오펜)보다 낮은 산화·환원 전위를 가지며, 티오펜보다 높은 장파장의 광흡수로 인해 다량의 광자의 흡수가 용이하다는 장점이 있다. 따라서, 본원의 일 구현예에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 포함하는 광전소자는 우수한 효율 및 성능을 가지는 전자장치를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0029] 도 1은, 본원의 일 구현예에 있어서, 스즈키 크로스 커플링(suzuki cross-coupling) 반응의 메커니즘을 나타낸 것이다.

도 2는, 본원의 일 실시예에 있어서, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 상태에 따른 자외선(UV-vis) 흡수 스펙트럼이다.

도 3은, 본원의 일 실시예에 있어서, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 순환 전압 전류 측정을 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0030] 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 본원의 구현예 및 실시예를 상세히 설명한다. 그러나 본원은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 구현예 및 실시예에 한정되지 않는다. 그리고 도면에서 본 발명을 명확하게 설명하기 위해서 설명과 관계없는 부분은 생략하였으며, 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 유사한 도면 부호를 붙였다.

[0031] 본원 명세서 전체에서, 어떤 부분이 다른 부분과 "연결"되어 있다고 할 때, 이는 "직접적으로 연결"되어 있는 경우뿐 아니라, 그 중간에 다른 소자를 사이에 두고 "전기적으로 연결"되어 있는 경우도 포함한다.

[0032] 본원 명세서 전체에서, 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.

[0033] 본원 명세서 전체에서, 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.

[0034] 본 명세서에서 사용되는 정도의 용어 "약", "실질적으로" 등은 언급된 의미에 고유한 제조 및 물질 허용오차가 제시될 때 그 수치에서 또는 그 수치에 근접한 의미로 사용되고, 본원의 이해를 돕기 위해 정확하거나 절대적인 수치가 언급된 개시 내용을 비양심적인 침해자가 부당하게 이용하는 것을 방지하기 위해 사용된다.

[0035] 본원 명세서 전체에서 사용되는 정도의 용어 “~ 하는 단계” 또는 “~의 단계”는 “~를 위한 단계”를 의미하지 않는다.

[0036] 본원 명세서 전체에서, 마쿠시 형식의 표현에 포함된 "이들의 조합(들)"의 용어는 마쿠시 형식의 표현에 기재된 구성 요소들로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 혼합 또는 조합을 의미하는 것으로서, 상기 구성 요소들로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상을 포함하는 것을 의미한다.

[0037] 본원 명세서 전체에서, "A 및/또는 B"의 기재는, "A 또는 B, 또는 A 및 B"를 의미한다.

[0038] 본원 명세서 전체에서, 용어 "할로겐" 또는 "할로"는, 주기율표의 17 족에 속하는 할로겐 원소가 작용기의 형태로서 화합물에 포함되어 있는 것을 의미하는 것으로서, 염소, 브롬, 불소 또는 요오드일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0039] 본원 명세서 전체에서, 용어 "알킬기"는, 통상적으로 1 내지 50 개의 탄소 원자, 빈번하게는 1 내지 40, 1 내지 30, 1 내지 20, 1 내지 10, 1 내지 8 개의 탄소 원자, 바람직하게는 1 내지 4 개의 탄소 원자, 특히 1 내지 3 개의 탄소 원자를 갖는 선형 또는 분지형 알킬기를 나타낸다. 알킬기가 알킬기로 치환되는 경우, 이는 "분지된 알킬기"로도 상호교환하여 사용된다. 치환기의 예로는 할로(예를 들어, F, Cl, Br, I), 할로알킬(예를 들어, CCl_3 또는 CF_3), 알콕시, 알킬티오, 히드록시, 카르복시(-COOH), 알킬옥시카르보닐(-C(O)R), 알킬카르보닐옥시(-OCOR), 아미노($-NH_2$), 카르바모일(-NHCOOR- 또는 -OCONHR-), 우레아(-NHCONHR-) 또는 티올(-SH) 중 1 개 이상을 들 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다. 또한, 정의된 알킬기는 1 개 이상의 탄소 대 탄소 이중 결합 또는 1 개 이상의 탄소 대 탄소 삼중 결합을 포함할 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다. 예를 들어, 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-메틸헥실, 시클로펜틸메틸, 시클로헥틸메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 2-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실, 또는 이들의 가능한 모든 이성질체를 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0040] 본원 명세서 전체에서, 용어 "알케닐기"는, 통상적으로 2 내지 50 개의 탄소 원자, 빈번하게는 2 내지 40, 2 내지 30, 2 내지 20, 2 내지 10, 2 내지 8 개 또는 2 내지 6 개의 탄소 원자, 바람직하게는 2 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 단일 불포화 탄화수소 라디칼을 의미한다. 예를 들어, 탄소-탄소 이중결합을 포함하는 상기 알킬기에서 예시된 것을 들 수 있다. 예를 들어 비닐, 알릴 (2-프로펜-1-일), 1-프로펜-1-일, 2-프로펜-2-일, 메트알릴 (2-메틸프로프-2-엔-1-일), 2-부텐-1-일, 3-부텐-1-일, 2-펜텐-1-일, 3-펜텐-1-일, 4-펜텐-1-일, 1-메틸부트-2-엔-1-일, 2-에틸프로프-2-엔-1-일 등을 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0041] 본원 명세서 전체에서, 용어 "알키닐기"는, 통상적으로 2 내지 50 개의 탄소 원자, 빈번하게는 2 내지 40, 2 내지 30, 2 내지 20, 2 내지 10, 2 내지 8 개 또는 2 내지 6 개의 탄소 원자, 바람직하게는 2 내지 4 개의 탄소 원자 및 임의의 위치에 1 또는 2 개의 삼중 결합을 갖는 불포화 선형 또는 분지형 탄화수소 라디칼, 예를 들어 에티닐, 프로파르길 (2-프로핀-1-일), 1-프로핀-1-일, 1-메틸프로프-2-인-1-일, 2-부틴-1-일, 3-부틴-1-일, 1-펜틴-1-일, 3-펜틴-1-일, 4-펜틴-1-일, 1-메틸부트-2-인-1-일, 1-에틸프로프-2-인-1-일 등을 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0042] 본원 명세서 전체에서, 용어 "알콕시드기"는, 상기 정의된 알킬기와 산소 원자가 결합된 형태로, C_{1-50} 알콕시드기를 포함하는 것일 수 있으며, 예를 들어, 메톡사이드, 에톡사이드, 프로폭사이드, 부톡사이드, 펜톡사이드, 헥속사이드, 헵속사이드, 옥톡사이드, 노녹사이드, 데속사이드, 또는 이들의 가능한 모든 이성질체를 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

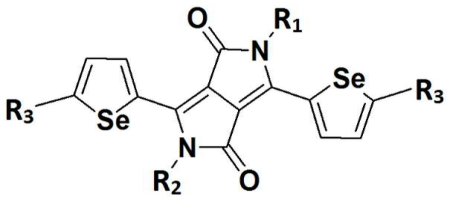
[0043] 본원 명세서 전체에서, 용어 "아릴"은, 예를 들어, 페닐, 치환 페닐 등과 같은 모노시클릭뿐 아니라, 예를 들어, 나프틸, 페난트레닐 등과 같은 융합된 비시클릭과 같은 모노시클릭 또는 비시클릭 방향족 고리를 의미한다. 이에, 아릴기는 적어도 6 개의 원자를 갖는 적어도 1 개의 고리를 함유하며, 5 개 이하의 상기 고리는 22 개 이하의 원자를 함유하며, 인접하는 탄소 원자 또는 적합한 이형 원자들 사이에서 이중 결합이 교대(공명)한다. 아릴기는 할로겐, 알킬, 알콕시, 히드록시, 카르복시, 카르바모일, 알킬옥시카르보닐, 니트로, 트리플루오로메틸, 아미노, 시클로알킬, 시아노, 알킬 S(O) m (m = 0, 1,2) 또는 티올을 포함하나, 이에 제한되지 않는 기 중 1 개 이상의 기로 임의로 치환될 수 있다. 예를 들어, 본원 명세서 전체에서 치환 또는 비치환된 C_{6-50} 아릴기는, 벤젠 고리, 톨루엔 고리, 나프탈렌고리, 안트라센 고리, 페난트렌 고리, 펜타렌 고리, 인덴 고리, 비페닐렌 고리, 페날렌 고리, 아즈렌 고리, 헵타렌 고리, 아세나프틸렌 고리, 플루오렌 고리, 테트라센 고리, 트리페닐렌 고리, 피렌 고리, 크리센 고리, 에틸-크리센 고리, 피센 고리, 페릴렌 고리, 펜타펜 고리, 펜타센 고리, 테트라페닐렌 고리, 헥사펜 고리, 헥사센고리, 루비센 고리, 코로넨 고리, 트리나프틸렌 고리, 헵타펜 고리, 헵타센 고리, 피란트렌 고리, 오바렌 고리, 플로란센 고리, 벤조플로란센 고리, 9-안트릴기, 2-안트릴기, 9-페난트릴기, 2-페난트릴기, 1-피렌일기, 크라이센일기, 나프타센일기, 코로닐기, 및 이들의 유도체로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0044] 본원 명세서 전체에서, 용어 "스즈키 크로스 커플링(suzuki cross-coupling) 반응"은, 1979년 처음 아키라 스즈키(Akira Suzuki)와 그의 그룹에 의해서 발표된 것으로서, 스즈키 크로스 커플링(suzuki cross-coupling) 반응은 카본-카본(C-C bond)을 만들어 내는 매우 빠르고 급격한 반응이다. 높은 반응성을 가진 유기금속 시약(organometallic reagent)과 아릴할라이드(aryl halides)를 다양한 촉매가 있는 상태에서 반응을 진행하며, 상기 반응들은 알킬보론산(alkyl-boronic acid)을 사용한 스즈키 크로스 커플링 반응은 상대적으로 낮은 독성과 공기중에서 안정하면서도 다양한 작용기가 존재하는 상황에서도 C-C bond를 형성하는 반응 중의 하나를 의미한다. 구체적으로, 본원 명세서에서 반응은 아릴(aryl) 또는 비닐보로닉산(vinyl-boronic acid)과 팔라듐(palladium)에 의해 촉매화된 aryl-, vinyl- 또는 alkyl halid를 이용한 것이다. 상기 반응은 폴리 올레핀(poly-olefin), 스타이렌(styrene), 또는 치환된 비페닐(biphenyl)을 합성하는데 사용된다[Miyaura,N., Suzuki,A. J.Chem.Soc., Chem.Commun. 1979, 866-867., Suzuki A. Pure Appl. Chem. 1985, 57, 1749-1758.].

[0046] 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본원의 구현예 및 실시예를 상세히 설명한다. 그러나, 본원이 이러한 구현예 및 실시예와 도면에 제한되는 것은 아니다.

[0048] 본원의 제 1 측면은, 하기 화학식 1로서 표시되는, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 제공한다:

[0049] [화학식 1]

[0050] 

;

[0051] 상기 화학식 1에서,

[0052] R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

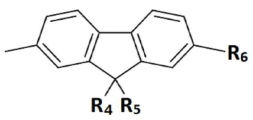
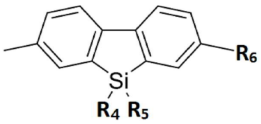
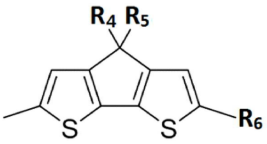
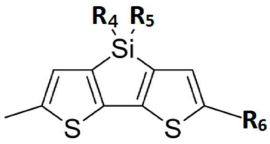
[0053] R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기임.

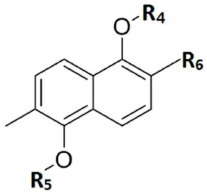
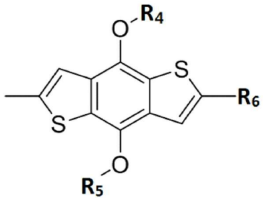
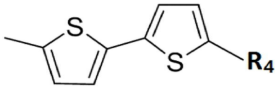
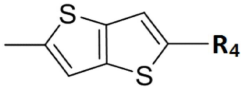
[0054] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 헤테로탄화수소고리기 또는 헤테로아릴기에 포함되는 헤테로원소는 N, O, S, Te, Se, 및 이들의 조합들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0055] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}, C_{1-40}, C_{1-30}, C_{1-20}, 또는 C_{1-10}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}, C_{1-40}, C_{1-30}, C_{1-20}, 또는 C_{1-10}의 알콕사이드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}, C_{2-40}, C_{2-30}, C_{2-20}, 또는 C_{2-10}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}, C_{2-40}, C_{2-30}, C_{2-20}, 또는 C_{2-10}의 알키닐기, C_{5-50}, C_{5-40}, C_{5-30}, C_{5-20}, 또는 C_{5-10}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}, C_{6-40}, C_{6-30}, C_{6-20}, 또는 C_{6-10}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 헤테로아릴기인 것일 수 있다.

[0056] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}, C_{6-40}, C_{6-30}, C_{6-20}, 또는 C_{6-10}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 헤테로아릴기인 것일 수 있다.

[0057] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_3은 하기 치환기로부터 선택된 것을 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다:

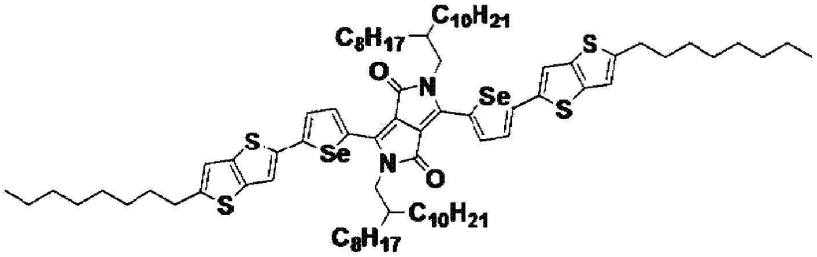
[0058]  ;  ;  ;  ;

 ;  ;  ;  ;

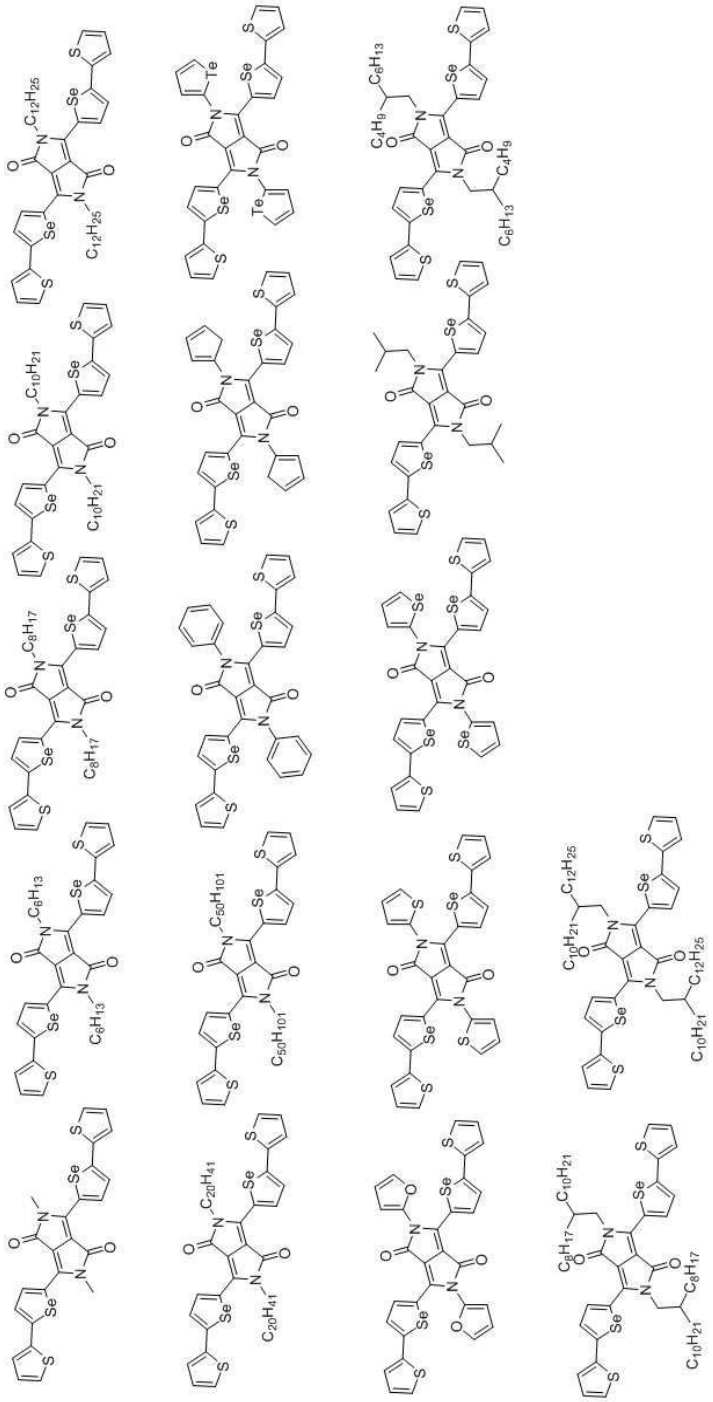
[0059] 여기서, R_4 내지 R_6은 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기임.

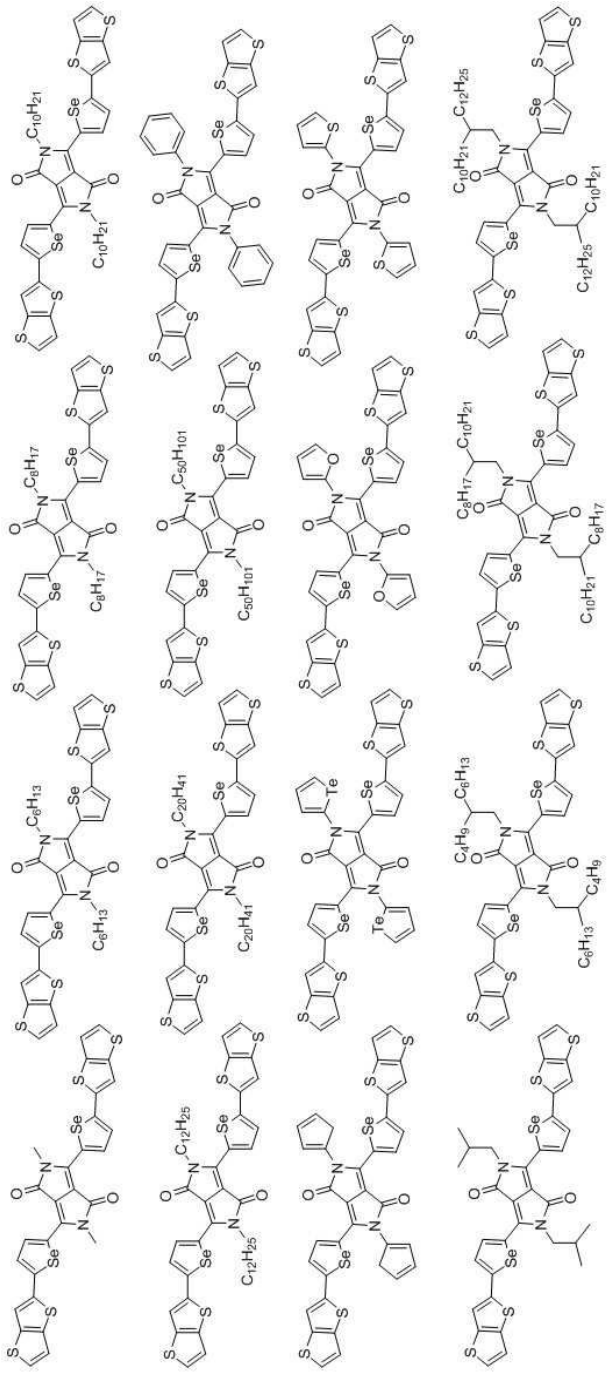
[0060] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 다이케토피롤로피롤(diketopyrrolopyrrole)을 포함하는 것일 수 있다.

[0061] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 하기 화합물들로부터 선택된 것을 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다:

[0062] 

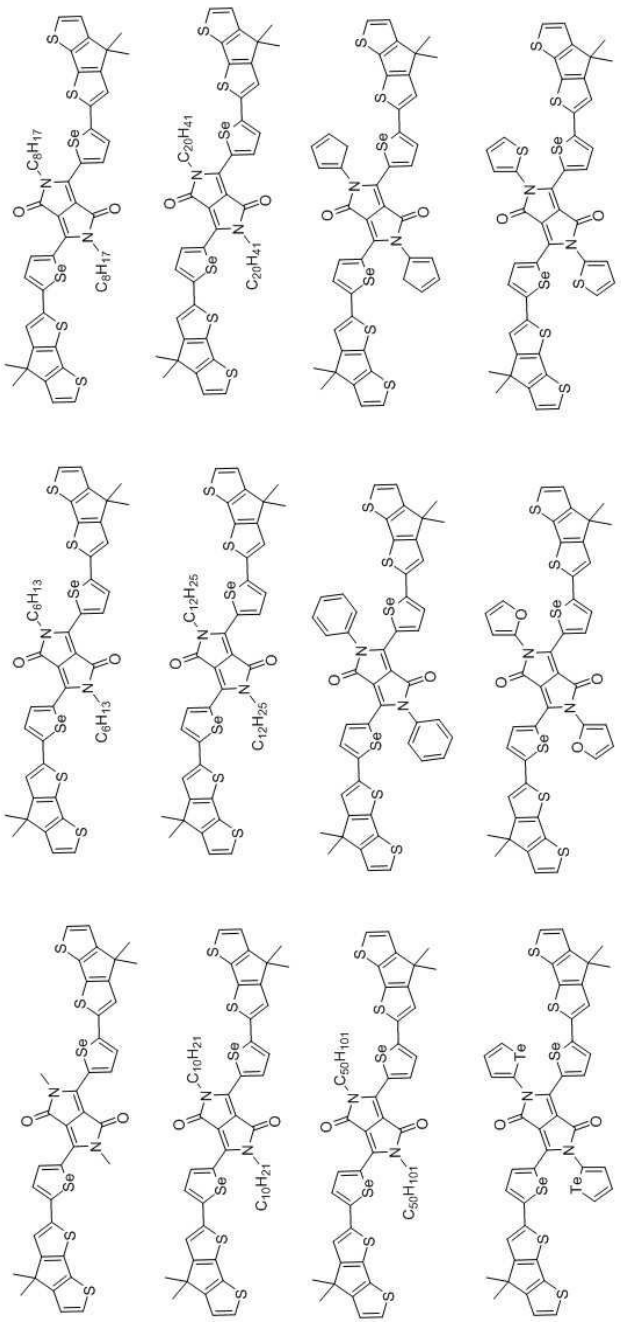
;

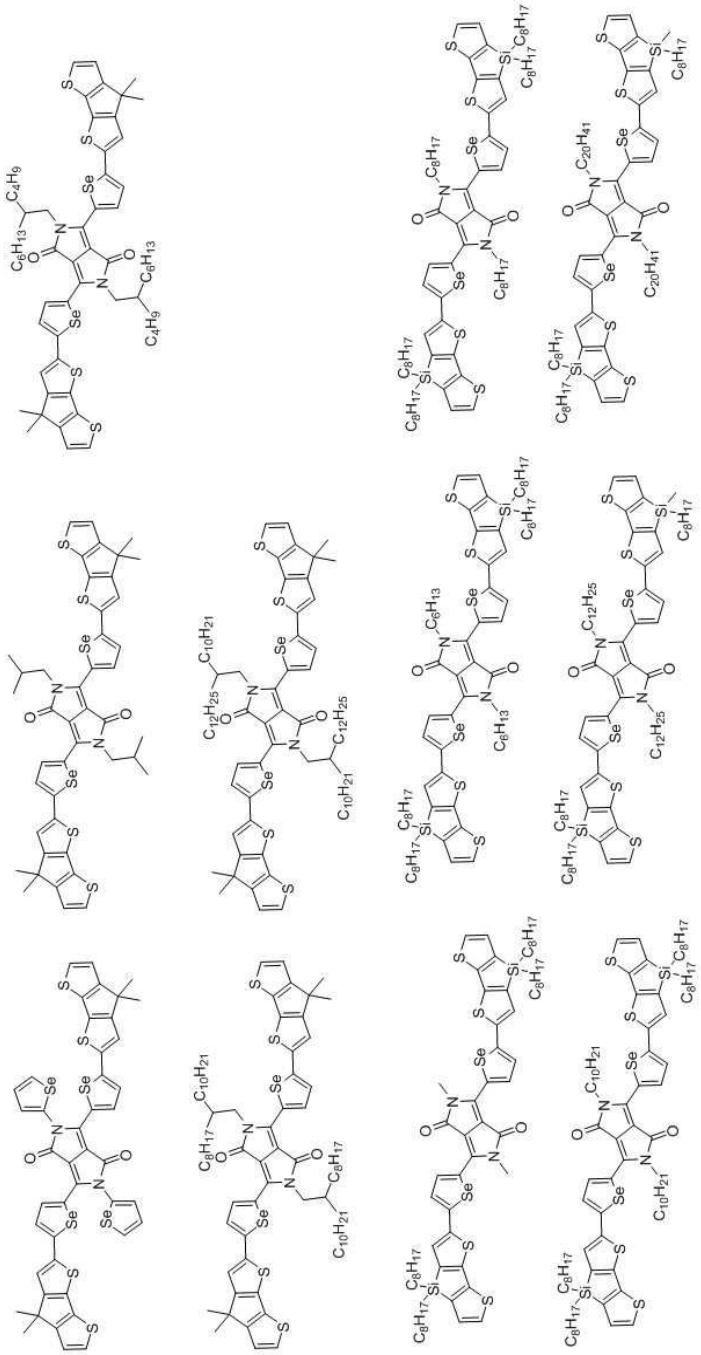
[0063] 



[0064]

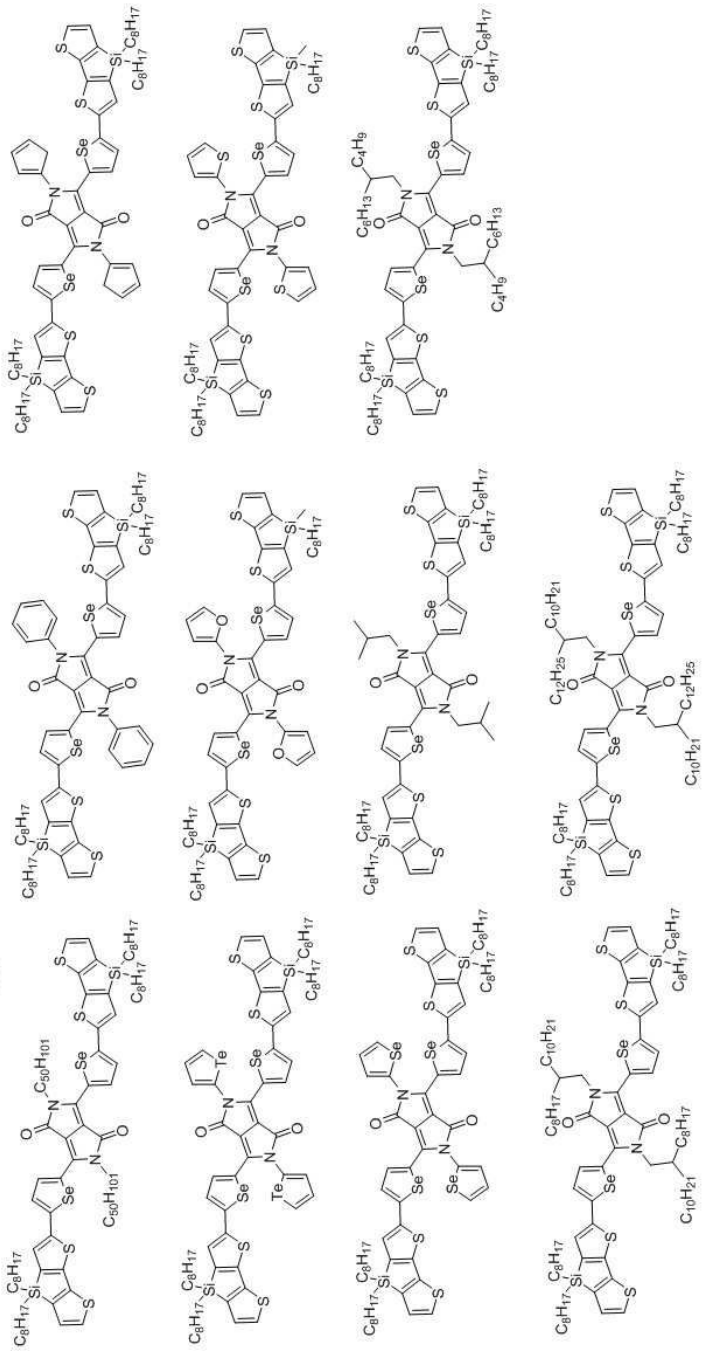
[0065]





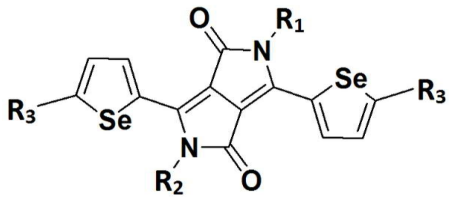
[0066]

[0067]



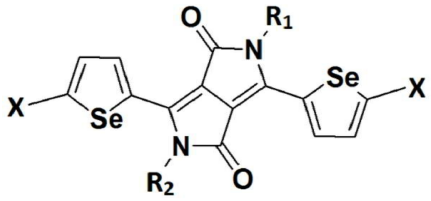
[0069] 본원의 제 2 측면은, 하기 화학식 2로서 표시되는 화합물과 하기 화학식 3으로서 표시되는 화합물을 반응시켜 하기 화학식 1로서 표시되는 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 제조하는 것을 포함하는, 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조 방법을 제공한다:

[0070] [화학식 1]

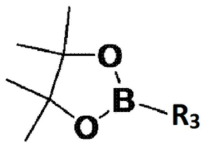
[0071] 

;

[0072] [화학식 2]

[0073]  ;

[0074] [화학식 3]

[0075]  ;

[0076] 상기 화학식들에서,

[0077] R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

[0078] R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기이고,

[0079] X는 할로겐임.

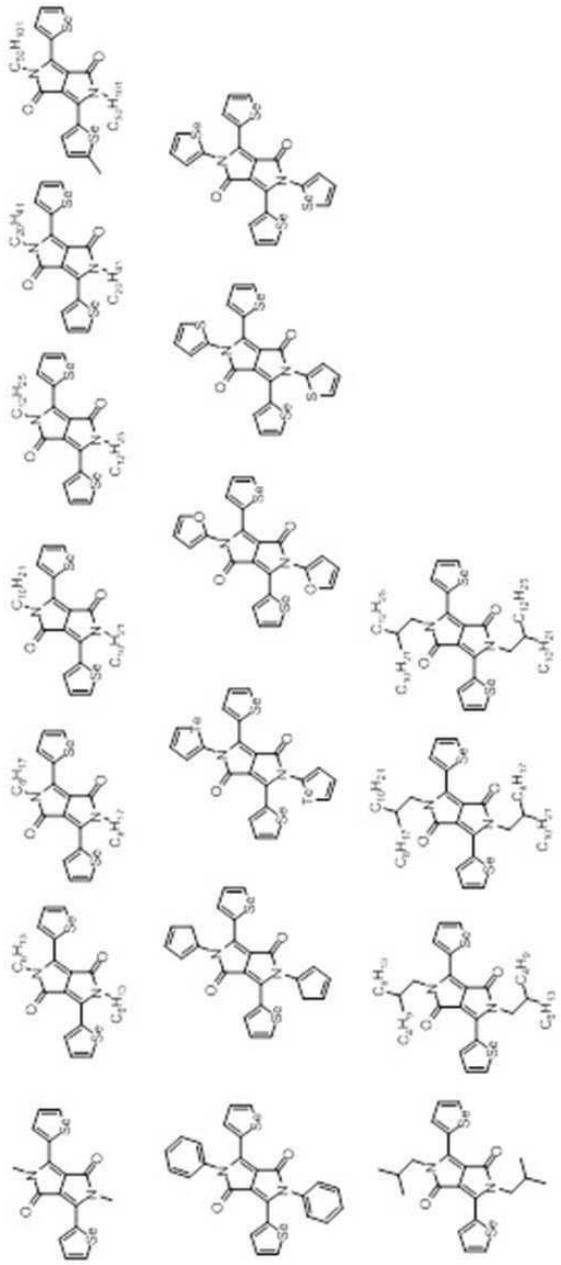
[0080] 본원의 제 1 측면과 중복되는 부분들에 대해서는 상세한 설명을 생략하였으나, 본원의 제 1 측면에 대해 설명한 내용은 제 2 측면에서 그 설명이 생략되었더라도 동일하게 적용될 수 있다.

[0081] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}, C_{1-40}, C_{1-30}, C_{1-20}, 또는 C_{1-10}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}, C_{1-40}, C_{1-30}, C_{1-20}, 또는 C_{1-10}의 알콕사이드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}, C_{2-40}, C_{2-30}, C_{2-20}, 또는 C_{2-10}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}, C_{2-40}, C_{2-30}, C_{2-20}, 또는 C_{2-10}의 알키닐기, C_{5-50}, C_{5-40}, C_{5-30}, C_{5-20}, 또는 C_{5-10}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}, C_{6-40}, C_{6-30}, C_{6-20}, 또는 C_{6-10}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 헤테로아릴기인 것일 수 있다.

[0082] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_3은 치환될 수 있는 C_{6-50}, C_{6-40}, C_{6-30}, C_{6-20}, 또는 C_{6-10}의 아릴기 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 헤테로아릴기인 것일 수 있다.

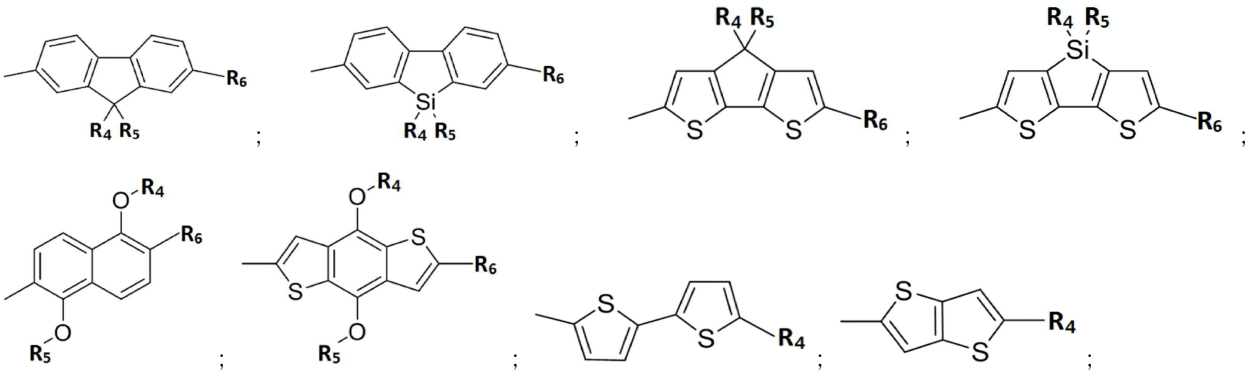
[0083] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 헤테로탄화수소고리기 또는 헤테로아릴기에 포함되는 헤테로원소는 N, O, S, Te, Se, 및 이들의 조합들로 이루어진 군으로부터 선택되는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0084] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_1 및 R_2는 각각 독립적으로, 하기 치환기들로부터 선택된 것을 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다:



[0085]

[0086] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_3은 하기 치환기로부터 선택된 것을 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0087] 

[0088] 여기서, R_4 내지 R_6은 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}의 알콕시드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}의

알키닐기, C_{5-50}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}의 헤테로아릴기임.

[0089] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 R_4 내지 R_6은 각각 독립적으로, 할로겐, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}, C_{1-40}, C_{1-30}, C_{1-20}, 또는 C_{1-10}의 알킬기, 치환될 수 있는 선형 또는 분지형 C_{1-50}, C_{1-40}, C_{1-30}, C_{1-20}, 또는 C_{1-10}의 알콕사이드기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}, C_{2-40}, C_{2-30}, C_{2-20}, 또는 C_{2-10}의 알케닐기, 선형 또는 분지형 C_{2-50}, C_{2-40}, C_{2-30}, C_{2-20}, 또는 C_{2-10}의 알키닐기, C_{5-50}, C_{5-40}, C_{5-30}, C_{5-20}, 또는 C_{5-10}의 불포화 탄화수소고리기, C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 불포화 헤테로탄화수소고리기, 치환될 수 있는 C_{6-50}, C_{6-40}, C_{6-30}, C_{6-20}, 또는 C_{6-10}의 아릴기, 또는 치환될 수 있는 C_{3-50}, C_{3-40}, C_{3-30}, C_{3-20}, 또는 C_{3-10}의 헤테로아릴기인 것일 수 있다.

[0090] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 스즈키 크로스 커플링(suzuki cross-coupling) 반응에 의하여 제조되는 것일 수 있고, 상기 반응에 의해 D-A(π-bridge)-D 형태의 구조를 가지는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않을 수 있다.

[0091] 본원의 일 구현예에 있어서, 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 상기 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 코어(core) 물질로서, 셀레늄(Se)을 포함하는 다이케토피롤로피롤(diketopyrrolopyrrole) 유도체에 티에노티오펜(thienothiophene) 그룹을 도입하여 합성한 것일 수 있다.

[0093] 본원의 제 3 측면은, 본원의 제 1 측면에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 포함하는 광전소자를 제공한다. 상기 본원의 제 3 측면에 따른 광전소자는 상기 본원의 제 1 측면에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물 및 상기 본원의 제 2 측면에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조 방법에 대하여 기재된 내용이 모두 적용될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0094] 본원의 일 구현예에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물은 셀레늄을 포함하는 헤테로환(셀레노펜)을 포함함으로써, 셀레늄 분자간(Se…Se)의 상호작용으로 인한 분자간 전하 이동을 용이하게 할 수 있고, 황을 포함하는 헤테로환(티오펜)보다 낮은 산화·환원 전위를 가지며, 티오펜보다 높은 장파장의 광흡수로 인해 다량의 광자의 흡수가 용이하다는 장점이 있다. 따라서, 본원의 일 구현예에 따른 셀레늄-함유 유기반도체 화합물을 포함하는 광전소자는 우수한 효율 및 성능을 가지는 전자장치를 제공할 수 있다.

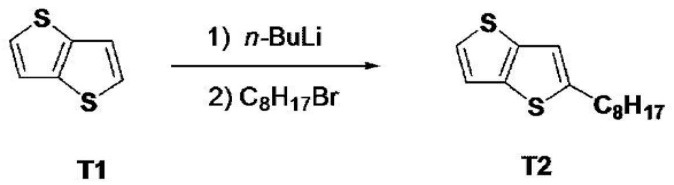
[0096] 이하, 실시예를 참조하여 본원을 좀더 자세히 설명하지만, 본원은 이에 제한되는 것은 아니다.

[0098] **[실시예]**

[0099] **<제조예 1>**

[0100] **화합물 T2의 제조**

[0101] [반응식 1]



[0102]

[0103] 화합물 T2는 J. Mater. Chem. C, 2013, 1, 3686-3694을 참고하여 2-옥틸티에노[3,2-b]티오펜(2-octylthieno[3,2-b]thiophene, T2)을 합성하였다(반응식 1).

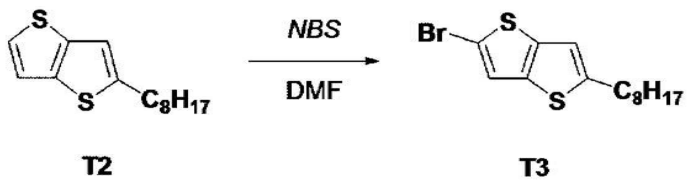
[0104] 건조된 반응 플라스크에 티에노[3,2-b]티오펜(thieno[3,2-b]thiophene)(1 g, 7.13 mmol; T1)을 THF(20 mL)에

녹인 용액에 n-BuLi(헥산 중에서 1.6 M; 4 mL, 6.42 mmol)을 -78℃ 및 아르곤 충전 조건하에서 천천히 적가하여 반응시켰고, 이어서, 1 시간 정도 교반한 후 동일한 온도에서, 1-브로모옥탄(1-bromooctane)(1.2 mL, 7.13 mmol)을 천천히 적가하였다. 이어서, 상기 용액을 -78℃에서 30 분 정도 교반시킨 후 실온으로 온도를 올려 12 시간 동안 교반시킨 다음, 얼음물을 붓고 다이클로로메탄을 이용하여 추출하였고, Na_2SO_4 를 이용하여 물을 제거하였다. 상기 반응 용액을 농축하여 실리카겔 플래쉬 컬럼 크로마토그래피(silica gel column chromatography, 헥산)를 이용하여 화합물 T2(610 mg, 64%)를 수득하였다.

[0105] ^{1}H NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ 7.30 (d, J = 5.1Hz, 1H), 7.22 (d, J = 5.1 Hz, 1H), 6.99 (s, 1H), 2.92 (t, J = 7.6 Hz, 2H), 2.92 (t, J = 7.6 Hz, 2H), 1.77 (t, J = 7.8, 7.5 Hz, 2H), 1.52-1.35 (m, 10H), 0.97 (t, J = 6.6 Hz, 3H).

[0107] **화합물 T3의 제조**

[0108] [반응식 2]



[0109]

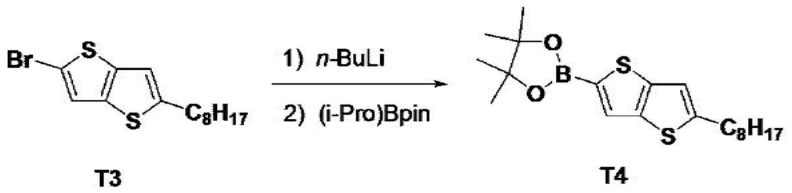
[0110] 화합물 T3은, J. Mater. Chem. C, 2013, 1, 3686-3694를 참고하여 2-브로모-5-옥틸티에노[3,2-b]티오펜(2-bromo-5-octylthieno[3,2-b]thiophene, T3)을 합성하였다(반응식 2).

[0111] 상기 제조예 1에서 수득한 화합물 화합물 T2(1.38 g, 5.47 mmol)에 NBS(0.97 g, 5.47 mmol)을 0℃에서 천천히 적가하였고, 천천히 실온으로 올린 후 2 시간 동안 교반시킨 다음, 얼음물을 붓고 다이클로로메탄을 이용하여 추출한 다음, Na_2SO_4를 이용하여 물을 제거하였다. 상기 반응 용액을 농축하여 실리카겔 플래쉬 컬럼 크로마토그래피(헥산)를 이용하여 화합물 T3(1.5 g, 83%)을 수득하였다.

[0112] ^{1}H NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ 7.17 (s, 1H), 6.85 (s, 1H), 2.85 (t, J = 7.5 Hz, 2H), 1.72-1.65 (m, 2H), 1.44-1.29 (m, 10H), 0.89 (t, J = 6.6 Hz, 3H).

[0114] **화합물 T4의 제조**

[0115] [반응식 3]



[0116]

[0117] 화합물 T4는, 상기 반응식 3과 같이, 4,4,5,5-테트라메틸-2-(2-옥틸티에노[3,2-b]티오펜-5-일)-1,3,2-디옥사보로란[4,4,5,5-tetramethyl-2-(2-octylthieno[3,2-b]thiophen-5-yl)-1,3,2-dioxaborolane, T4]을 제조하였다.

[0118] 건조된 반응 플라스크에, 상기 제조예 2에서 수득한 화합물 T3(190 mg, 0.57 mmol)을 THF(3 mL)에 녹인 용액에 n-BuLi(헥산 용액 중에서 1.6 M, 0.4 mL, 0.63 mmol)을 -78℃ 및 아르곤 충전 조건하에서 천천히 적가하였고, 이를 1 시간 정도 교반한 후, 동일한 온도에서 (i-Pro)Bpin (0.2 mL, 0.86 mmol)을 천천히 적가하였다. 상기 용액을 -78℃에서 30 분 정도 교반시킨 후 실온으로 온도를 올려 12 시간 동안 교반시킨 다음, 이에 얼음물을

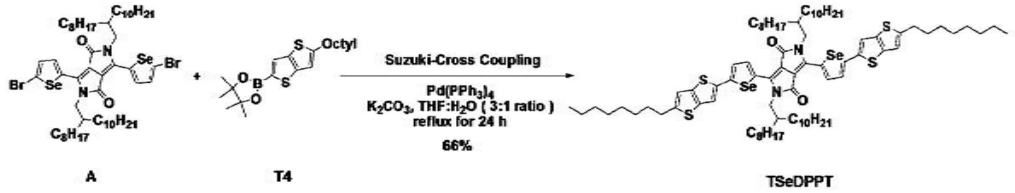
붓고 다이클로로메탄을 이용하여 추출한 후 Na_2SO_4를 이용허여 물을 제거하였다. 상기 반응 용액을 농축하여 실리카겔 플래쉬 컬럼 크로마토그래피(EtOAc : *n*-Hexane = 1 : 5)로 화합물 T4(160 mg, 74%)를 수득하였다.

[0119] ^{1}H NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ 7.68 (s, 1H), 6.97 (s, 1H), 2.87 (t, *J* = 7.8Hz, 2H), 1.76-1.66 (m, 2H), 1.43-1.24 (m, 24H), 0.89 (t, *J* = 5.4 Hz, 3H).

[0121] **제조예 2: 셀레늄-함유 유기반도체 화합물의 제조**

[0122] 하기 반응식 4 와 같은 스즈키-크로스 커플링 반응을 이용하기 위하여, π-브릿지(bridge)인 셀레늄(selenium)-기반 유기반도체 물질의 코어(core)가 될 수 있는 화합물 A를 Martin Heeney 그룹의 셀레노펜-다이케토피롤로피롤(selenophene-diketopyrrolopyrrole) 화합물의 단량체를 참고하여 우선적으로 합성하였다.

[0123] [반응식 4]



[0124]

[0125] 상기 합성된 화합물 A (100 mg, 0.09mmol) 및 화합물 T4(84.9 mg, 0.22 mmol)를 테트라히드로푸란(tetrahydrofuran, THF; 0.9 mL) : 물(0.3 mL)의 혼합 용매에 용해시킨 후, 상기 용해된 용액에 $Pd(PPh_3)_4$(10 mol%) 및 K_2CO_3(211 mg, 1.53 mmol)을 첨가시켰다. 상기 용액을 30 분간 N_2를 이용하여 처리한 후, 80° C에서 24 시간 동안 환류시켰다. 상기 반응이 완료된 용액에 MeOH을 첨가시켜 생성된 침전물을 여과한 후, 실리카겔 플래쉬 컬럼 크로마토그래피(dichloromethane : *n*-Hexane = 1 : 1)을 이용하여 화합물 TSeDPPT (86mg , 66%)를 수득하였다.

[0126] 상기 반응식 4에 나타낸 바와 같이, 화합물 A를 화합물 T4와 스즈키-크로스 커플링 시켜서 D-A(π-브릿지)-D 형태의 구조를 가지는 DPP(Se)-기반 유기반도체 단분자 TSeDPPT를 성공적으로 합성할 수 있었다.

[0127] ^{1}H NMR (300MHz, $CDCl_3$) δ 8.73 (d, *J* = 4.2 Hz, 2H), 7.40 (d, *J* = 4.5 Hz, 2H), 7.36 (s, 2H), 6.90 (s, 2H), 3.95 (d, *J* = 7.5 Hz, 4H), 2.88 (t, *J* = 7.5 Hz, 4H), 2.02-1.96 (m, 2H), 1.76-1.65 (m, 6H), 1.27-1.24 (m, 76H), 0.89-0.84 (m, 24H).

[0129] **실험예 1: 광학 특성**

[0130] 상기 본 제조예 2에서 합성된 셀레늄-함유 유기반도체 화합물(TSeDPPT)의 광 흡수영역을 용액 상태(클로로포름) 및 필름 상태에서 측정하였다(도 2).

[0131] 도 2에 나타낸 바와 같이, 자외선(UV-vis) 흡수 스펙트럼에 있어서, 용액 상태에서의 광 흡수 최고값 λ_{max}는 622 nm 및 652 nm였으며, 광 흡수 λ_{onset}은 715 nm 영역까지 나타냄을 확인하였다. 한편, 필름 상태의 광 흡수 최고값 λ_{max}는 756 nm였으며, 광 흡수 λ_{onset}은 816 nm 영역까지 나타내었고, 따라서, 상기 필름 상태가 상기 용액 상태에서보다 더 넓은 장파장 영역까지 흡수함을 확인하였다.

[0132] 종래의 D-A-D-A-D 구조 형태의 용액형 단분자 전자공여체가 재료로 사용된 것으로서 잘 알려진 7% 효율을 나타내는 2011 년 Bazan 연구팀의 유기반도체인 7,7'-[4,4-Bis(2-ethylhexyl)-4*H*-silolo[3,2-*b*:4,5-*b*']dithiophene-2,6-diyl]bis[6-fluoro-4-(5′ '-hexyl-[2,2'-bithiophen]-5-yl)benzo[*c*][1,2,5]thiadiazole](p-DTS(FBTTh$_2$)$_2$) 유기반도체 화합물은 자외선(UV-vis) 흡수 스펙트럼에서 광 흡수 최고값(λ_{max})은 599 nm(용액 상태 클로로포름)로 측정 보고되었다. 이와 비교하여, 본원의 실시예에 따른 신규 물질 합성된 셀레늄-함유 유기반도체 화합물(TSeDPPT)의 광 흡수 영역은 최근 보고된 고효율을 나타내는

기존 물질의 700 nm 영역대와 비슷하거나 필름상태에서는 더 장파장대 영역까지 흡수함으로써 광흡수 능력이 향상됨을 알 수 있었다.

[0134] **실험예 2: 전기화학적 특성**

[0135] 상기 실시예 1에서 합성된 셀레늄-함유 유기반도체 화합물(TSeDPPT)의 전기화학적 성질을 하기 표 1에 나타내었다. 하기 표 1에서, HOMO(highest occupied molecular orbital) 값은 도 2에서 측정한 결과 값을 이용하여 계산한 값이다. 도 2 및 하기 표 1는, 전기화학적 특성을 분석하기 위해서 바탕 용액을 $TBAPF_6$(0.1 몰농도)의 용매 CH_2Cl_2에서 100 mV/s의 조건에서 순환 전압 전류법(cyclic voltammetry)을 이용하여 측정한 결과를 나타내었다.

[0136] 하기 표 1에 나타낸 바와 같이, 합성된 셀레늄-함유 유기반도체 화합물(TSeDPPT)은 낮은 밴드값을 가지고 있어 전하의 이동도가 높아, 이를 포함하여 제조된 유기소자에서 우수한 전기적 특성을 가진다. 종래의 알려진 P3HT 또는 p-DTS$(FBTTh_2)_2$의 반도체 화합물과 비교 했을 때, 보다 낮은 HOMO 값을 가짐으로써 높은 개방전압의 형성이 가능할 뿐만 아니라 산화 안정성도 높아지게 되어 상용화의 큰 장점이 될 수 있다.

표 1

[0137]

유기반도체 화합물	$E_{1/2}$ vs SCE (V)		EF (eV)		밴드갭 (eV)
	E_{ox}	E_{red}	HOMO	LUMO	
TSeDPPT	0.678	-1.086	-5.42	-3.656	1.764 eV = 703 nm

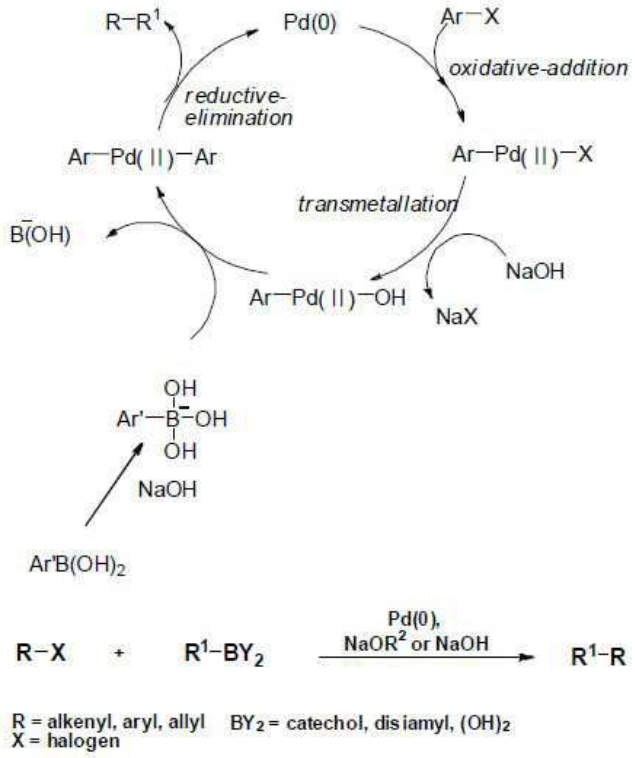
[0138] 상기 표 1에서, HOMO는 최고준위 점유 분자 궤도를 의미하고, LUMO(lowest unoccupied molecular orbital)는 최저준위 비점유 분자 궤도를 의미한다.

[0140] 전술한 본원의 설명은 예시를 위한 것이며, 본원이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자는 본원의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 쉽게 변형이 가능하다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다. 예를 들어, 단일형으로 설명되어 있는 각 구성 요소는 분산되어 실시될 수도 있으며, 마찬가지로 분산된 것으로 설명되어 있는 구성 요소들도 결합된 형태로 실시될 수도 있다.

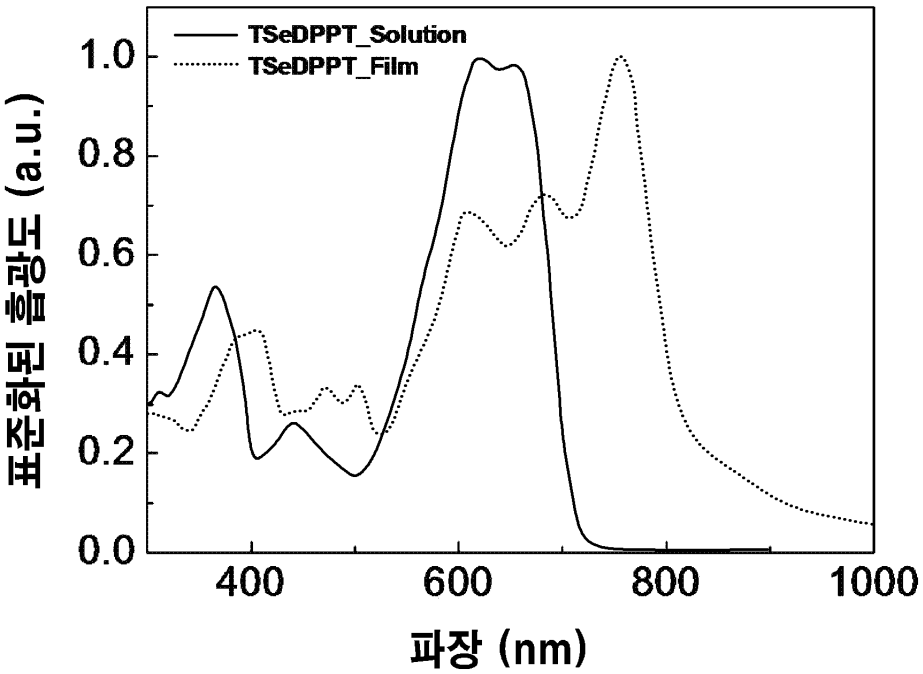
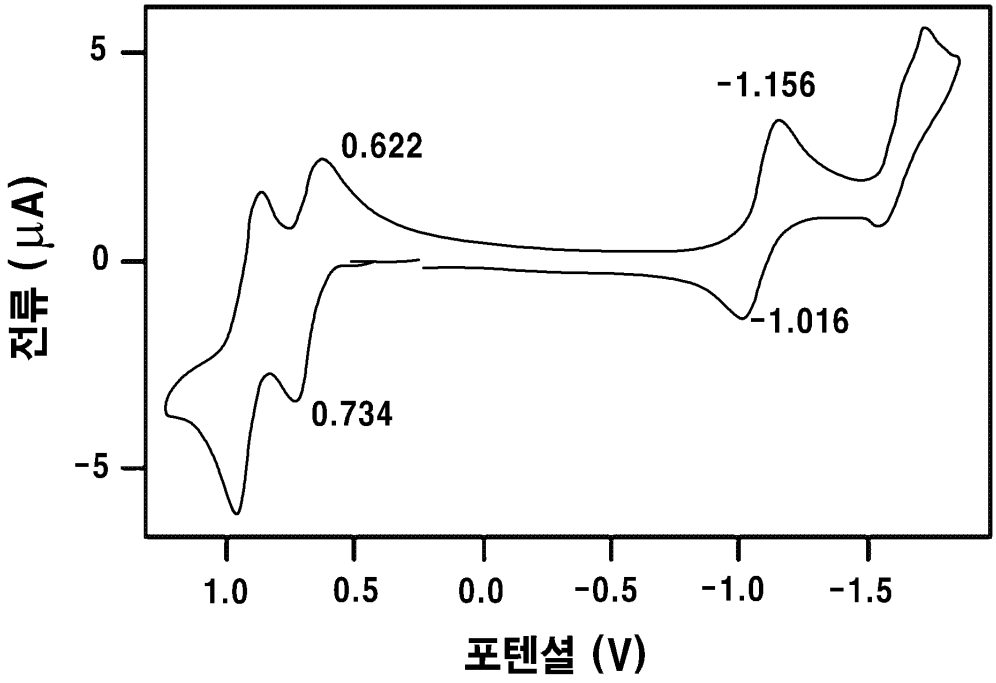
[0141] 본원의 범위는 상기 상세한 설명보다는 후술하는 특허청구범위에 의하여 나타내어지며, 특허청구범위의 의미 및 범위, 그리고 그 균등 개념으로부터 도출되는 모든 변경 또는 변형된 형태가 본원의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.

도면

도면1


R−R1
Pd(0)
Ar−X
oxidative-addition
reductive-elimination
Ar−Pd(II)−Ar
Ar−Pd(II)−X
transmetallation
B(OH)
NaOH
Ar−Pd(II)−OH
NaX
OH
Ar'−B−OH
OH
NaOH
Ar'B(OH)2
R−X + R1−BY2
Pd(0), NaOR2 or NaOH
R1−R
R = alkenyl, aryl, allyl
X = halogen
BY2 = catechol, disiamyl, (OH)2

도면2


TSeDPPT_Solution
TSeDPPT_Film
표준화된 흡광도 (a.u.)
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
400
600
800
1000
파장 (nm)

도면3