(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0129510
(43) 공개일자 2019년11월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/42* (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0043 (2013.01)
H01L 51/0074 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0054270
(22) 출원일자 2018년05월11일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
주식회사 엘지화학
서울특별시 영등포구 여의대로 128 (여의도동)
울산과학기술원
울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50
(72) 발명자
이지영
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
김진영
울산광역시 울주군 범서읍 구영로 101-7 구영2차 푸르지오 아파트 503동 703호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
정순성

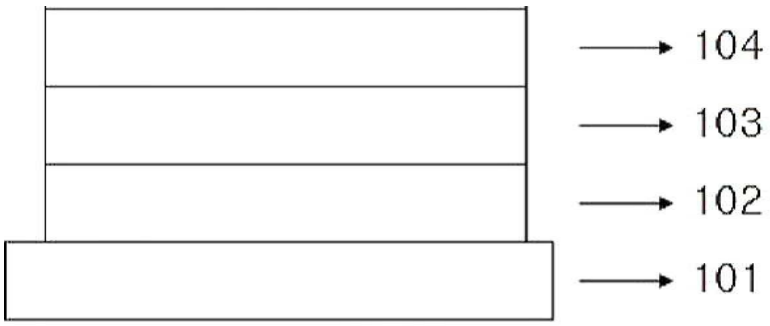
전체 청구항 수 : 총 14 항

(54) 발명의 명칭 **유기 태양 전지**

(57) 요 약

본 명세서는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 광활성층은 전자 주개 및 전자 받개를 포함하고, 상기 전자 주개는 화학식 1의 제1 단위; 화학식 2의 제2 단위; 및 화학식 3 또는 4의 제3 단위를 포함하는 중합체를 포함하며, 상기 전자 받개는 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물 및 플러렌(Fullerene)계 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지에 관한 것이다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
H01L 51/42 (2013.01)
Y02E 10/549 (2013.01)
(72) 발명자
임보규
대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원
김태효
부산광역시 금정구 식물원로 64 금정산SKVIEW아파트 109동 1204호

명 세 서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및

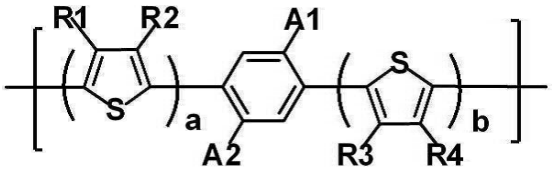
상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하며,

상기 광활성층은 전자 주개 및 전자 받개를 포함하고,

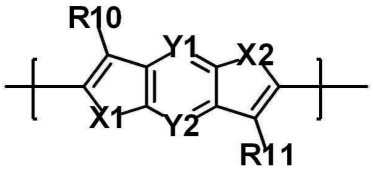
상기 전자 주개는 하기 화학식 1로 표시되는 제1 단위; 하기 화학식 2로 표시되는 제2 단위; 및 하기 화학식 3 또는 4로 표시되는 제3 단위를 포함하는 중합체를 포함하며,

상기 전자 받개는 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물 및 플러렌(Fullerene) 계 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지:

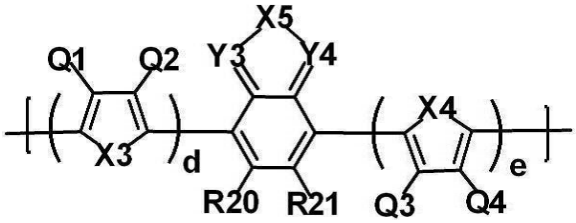
[화학식 1]



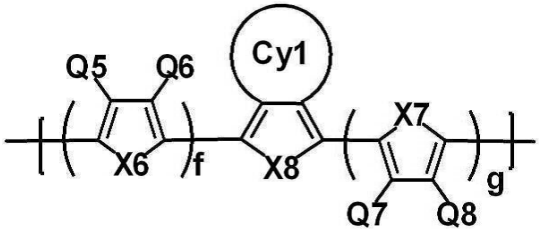
[화학식 2]



[화학식 3]



[화학식 4]



화학식 1 내지 4에 있어서,

X1 내지 X8은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 및 Te로 이루어진 군에서 선택되고,

Y1 내지 Y4은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR", N, SiR", P 및 GeR"로 이루어진 군에서 선택되며,

Cy1은 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리이고,

R, R', R", Q1 내지 Q8, R1 내지 R4, R10 및 R11은 서로 동일하거나 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 알킬술폭시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폭시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

R20 및 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기이고,

a, b, d, e, f 및 g는 각각 0 내지 3의 정수이며,

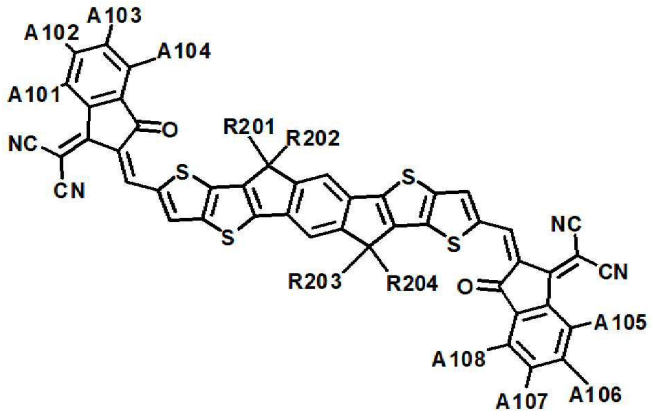
a, b, d, e, f 및 g가 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 동일하거나 상이하고,

A1 및 A2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 불소; 또는 염소이다.

청구항 2

청구항 1에 있어서, 상기 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물은 하기 화학식 A로 표시되는 것인 유기 태양 전지:

[화학식 A]



상기 화학식 A에 있어서,

R201 내지 R204는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

A101 내지 A108은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 할로겐기; 또는 치환 또는 비치환된 알킬기이다.

청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 플러렌(Fullerene)계 화합물은 $PC_{61}BM$((6,6)-phenyl-C61-butyric acid-methylester), $PC_{71}BM$((6,6)-phenyl-C71-butyric acid-methylester), $PC_{70}BM$((6,6)-phenyl-C70-butyric acid-methylester), 또는 $PC_{61}BCR$((6,6)-phenyl-C61-butyric acid-cholesteryl ester인 것인 유기 태양 전지.

청구항 4

청구항 1에 있어서, 상기 광활성층 중 상기 전자 주개: 전자 받개는 1 : 4 내지 4: 1의 중량비 포함되는 것인 것인 유기 태양 전지.

청구항 5

청구항 1에 있어서, 상기 전자 받개 중 상기 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물: 플러렌(Fullerene) 화합물은 0.5 : 9.5 내지 9.5 : 0.5의 중량비로 포함되는 것인 유기 태양 전지.

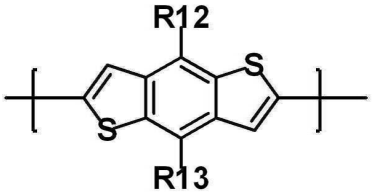
청구항 6

청구항 1에 있어서, 상기 전자 주개 및 상기 전자 받개는 벌크 헤테로 정션(BHJ)을 구성하는 것인 유기 태양 전지.

청구항 7

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위는 하기 화학식 2-1로 표시되는 것인 유기 태양 전지:

[화학식 2-1]



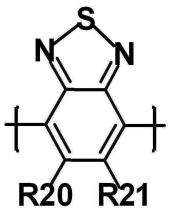
화학식 2-1에 있어서,

R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

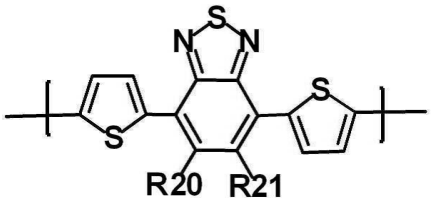
청구항 8

청구항 1에 있어서, 상기 제3 단위는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 태양 전지:

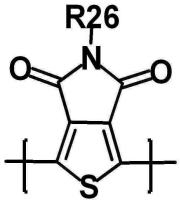
[화학식 3-1]



[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



화학식 3-1 내지 3-3에 있어서,

R20 및 R21은 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고,

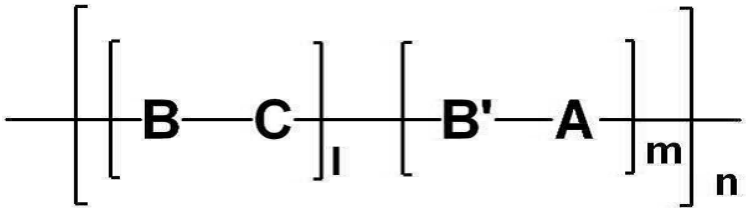
R26은 수소; 할로겐기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴기;

또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

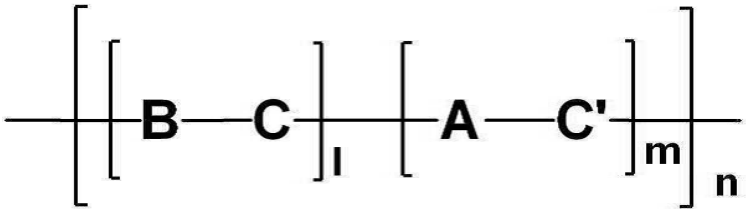
청구항 9

청구항 1에 있어서, 상기 중합체는 하기 화학식 5 또는 하기 화학식 6으로 표시되는 단위를 포함하는 것인 유기 태양 전지:

[화학식 5]



[화학식 6]



화학식 5 및 6에 있어서,

l은 몰분율로서, 0 < l < 1인 실수이며,

m은 몰분율로서, 0 < m < 1인 실수이고,

l+m = 1이며,

A는 상기 화학식 1로 표시되는 제1 단위이고,

B 및 B'는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위이며,

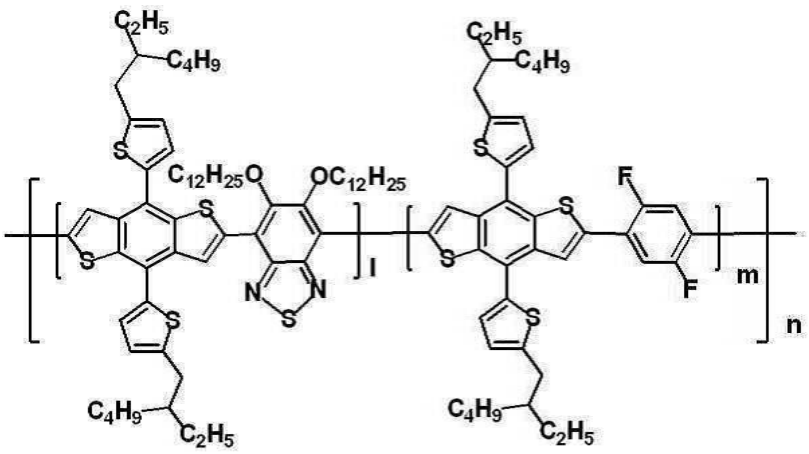
C 및 C'는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 상기 화학식 3 또는 화학식 4로 표시되는 제3 단위이고,

n은 단위의 반복수로서, 1 내지 10,000의 정수이다.

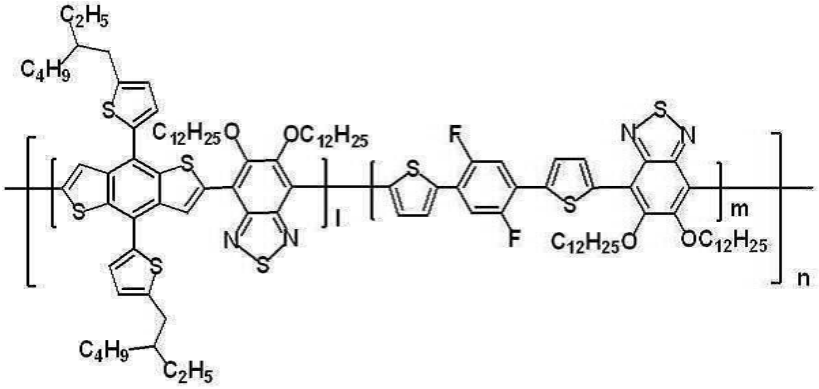
청구항 10

청구항 1에 있어서, 상기 중합체는 하기 화학식 7 내지 11 중 어느 하나로 표시되는 단위를 포함하는 것인 유기 태양 전지:

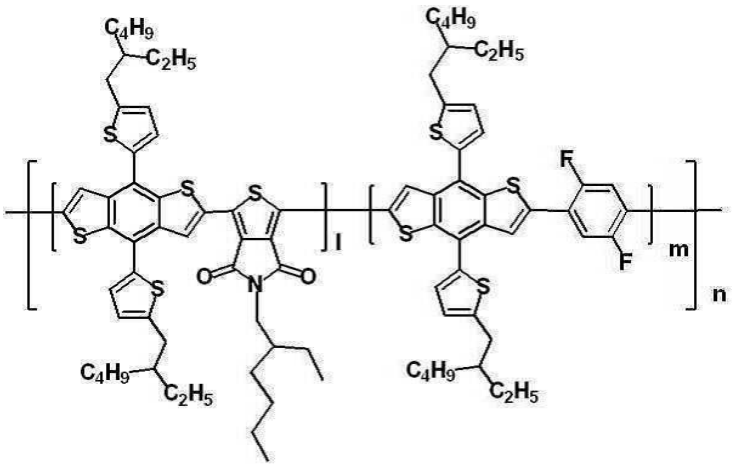
[화학식 7]



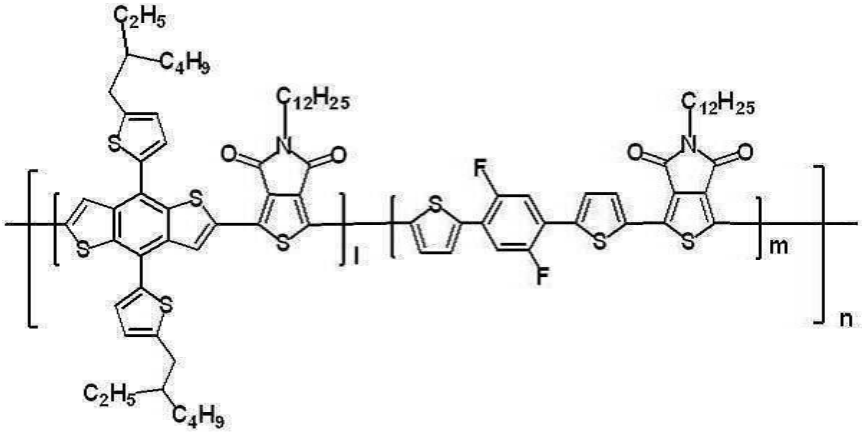
[화학식 8]



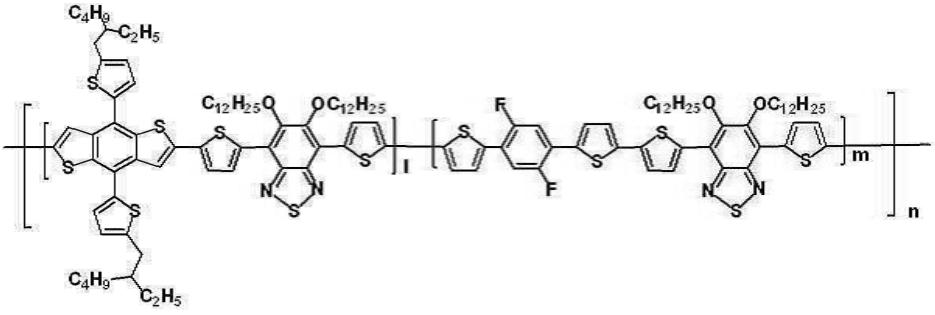
[화학식 9]



[화학식 10]



[화학식 11]



화학식 7 내지 11에 있어서,

l은 몰분율로서, 0 < l < 1인 실수이며,

m은 몰분율로서, 0 < m < 1인 실수이고,

l+m = 1이며,

n은 단위의 반복수로서, 1 내지 10,000의 정수이다.

청구항 11

청구항 1에 있어서, 상기 중합체의 수평균 분자량은 5,000 g/mol 내지 1,000,000 g/mol인 것인 유기 태양 전지.

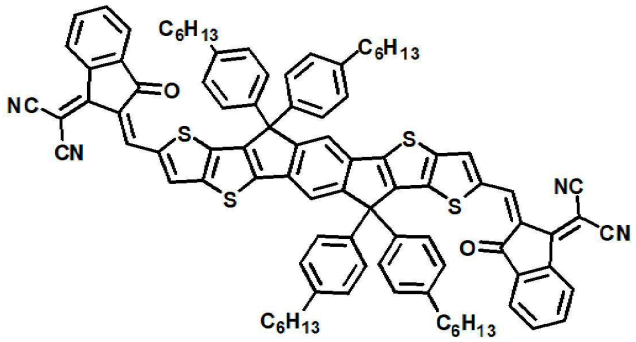
청구항 12

청구항 1에 있어서, 상기 중합체의 분자량 분포는 1 내지 10인 것인 유기 태양 전지.

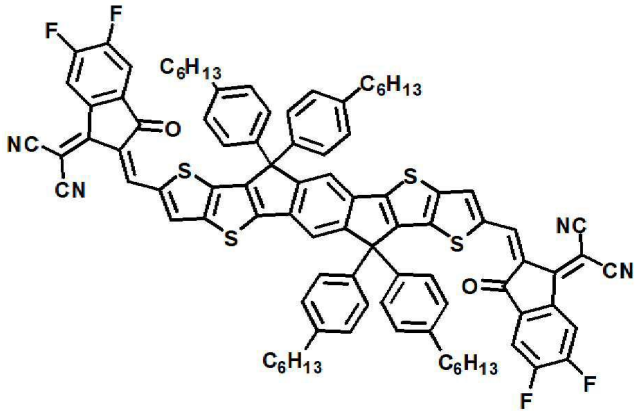
청구항 13

청구항 1에 있어서, 상기 비플러렌계 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-9로 표시되는 것인 유기 태양 전지:

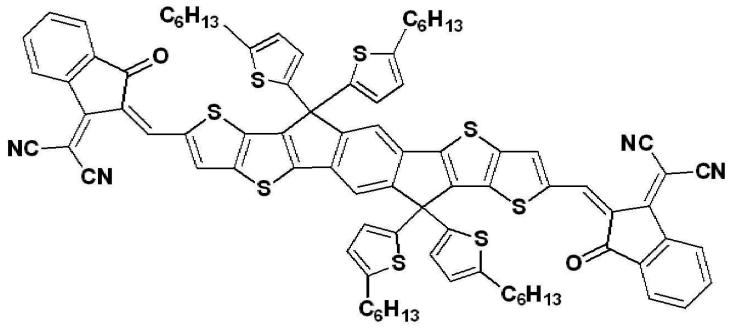
[화학식 A-1]



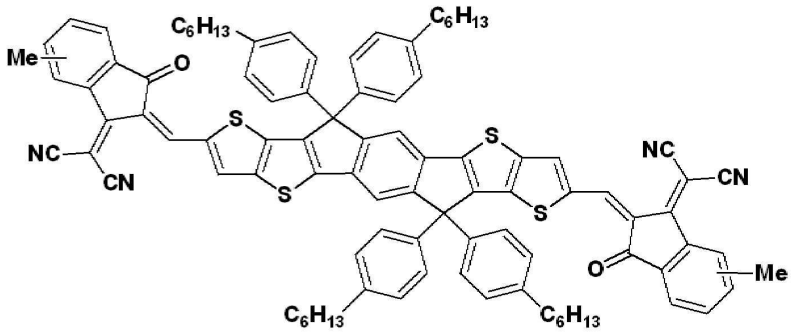
[화학식 A-2]



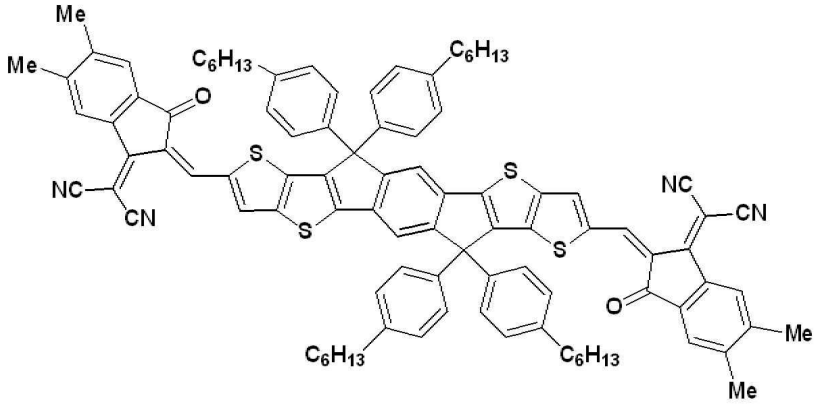
[화학식 A-3]



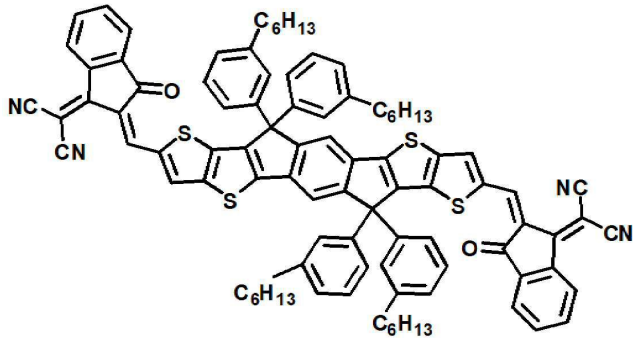
[화학식 A-4]



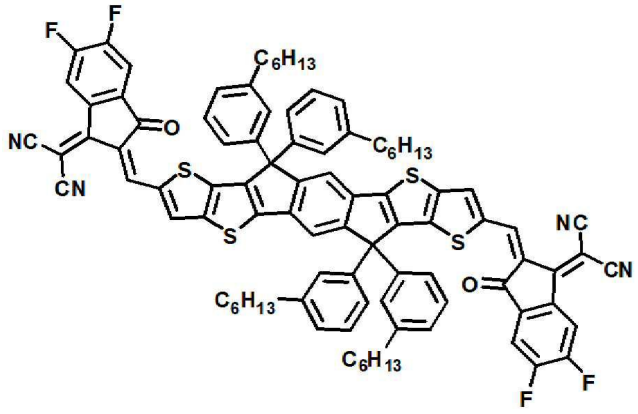
[화학식 A-5]



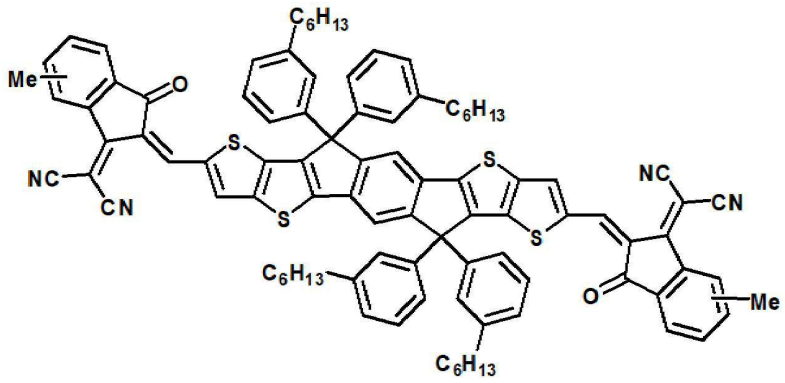
[화학식 A-6]



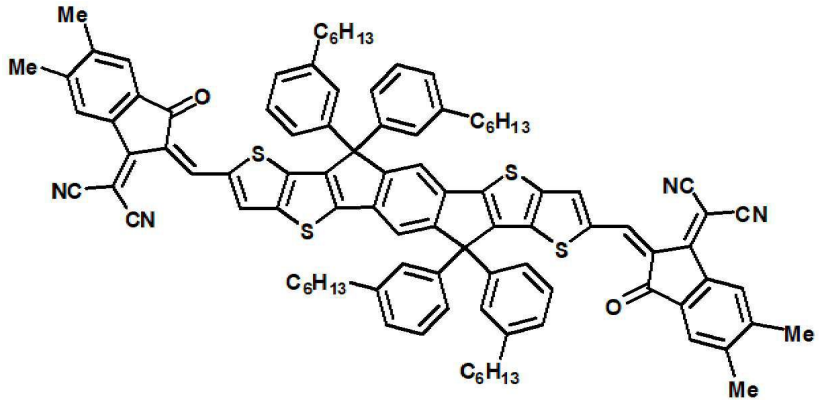
[화학식 A-7]



[화학식 A-8]



[화학식 A-9]



청구항 14

청구항 1에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 2cm^2 이상 400cm^2이하인 것인 유기 태양 전지.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 명세서는 유기 태양 전지에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 유기 태양 전지는 광기전력효과(photovoltaic effect)를 응용함으로써 태양에너지를 직접 전기에너지로 변환할 수 있는 소자이다. 태양전지는 박막을 구성하는 물질에 따라 무기 태양전지와 유기 태양전지로 나뉠 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 기능성을 가지는 유기물 반도체 태양전지가 장기적인 대체 에너지원으로 각광받고 있다.

[0003] 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.

선행기술문헌

비특허문헌

[0004] (비특허문헌 0001) Two-layer organic photovoltaic cell(C.W.Tang, Appl. Phys. Lett., 48, 183.(1986))

(비특허문헌 0002) Polymer Photovoltaic Cells: Efficiencies via Network of Internal Donor-Acceptor Heterojunctions(G. Yu, J. Gao, J. C. Hummelen, F. Wudl, A. J. Heeger, Science, 270, 1789. (1995))

발명의 내용

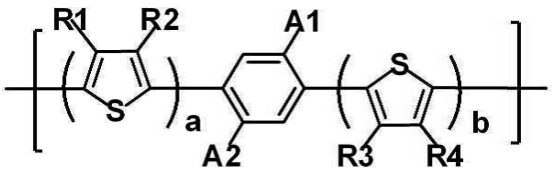
해결하려는 과제

[0005] 본 명세서는 유기 태양 전지를 제공하는 것을 목적으로 한다.

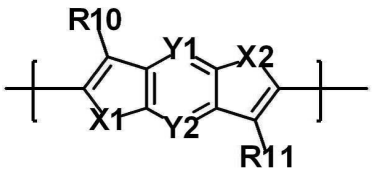
과제의 해결 수단

[0006] 본 명세서의 일 실시상태는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 광활성층은 전자 주개 및 전자 받개를 포함하고, 상기 전자 주개는 하기 화학식 1로 표시되는 제1 단위; 하기 화학식 2로 표시되는 제2 단위; 및 하기 화학식 3 또는 4로 표시되는 제3 단위를 포함하는 중합체를 포함하며, 상기 전자 받개는 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물 및 플러렌(Fullerene) 계 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지를 제공한다.

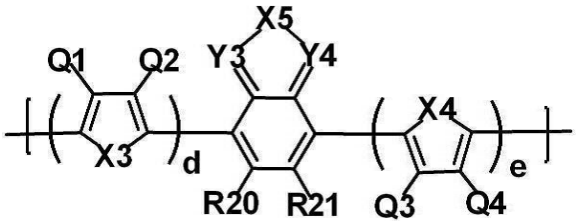
[0007] [화학식 1]

[0008] 

[0009] [화학식 2]

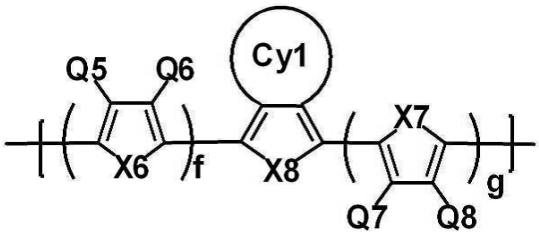
[0010] 

[0011] [화학식 3]



[0012]

[0013] [화학식 4]



[0014]

[0015] 화학식 1 내지 4에 있어서,

[0016] X1 내지 X8은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR', PR, S, GeRR', Se 및 Te로 이루어진 군에서 선택되고,

[0017] Y1 내지 Y4은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR", N, SiR", P 및 GeR"로 이루어진 군에서 선택되며,

[0018] Cy1은 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리이고,

[0019] R, R', R", Q1 내지 Q8, R1 내지 R4, R10 및 R11은 서로 동일하거나 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 알킬술폭시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폭시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이며,

[0020] R20 및 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기이고,

[0021] a, b, d, e, f 및 g는 각각 0 내지 3의 정수이며,

[0022] a, b, d, e, f 및 g가 2 이상인 경우, 2 이상의 괄호 내의 구조는 서로 동일하거나 상이하고,

[0023] A1 및 A2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 불소; 또는 염소이다.

발명의 효과

[0024] 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지는 광활성층에 ternary system을 도입하여, 태양광 흡수 파장 영역의 조절이 용이하다.

[0025] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지의 광활성층에 받개 주개로서 포함되는 중합체는 전기전도성 물질로 열적 안정성을 가지며, 우수한 용해도 및 높은 전자이동도를 갖고, 높은 HOMO 에너지 준위를 가지므로, 이를 포함하는 유기 태양 전지는 개방전압 특성이 우수하다. 또한, 2 종의 전자 받개 물질로서 포함되는 플러렌계 화합물은 분자의 대칭성이 높고, 자외선 영역에 대한 흡수가 우수하며, 비플러렌계 화합물은 열적 안정성이 우수하고, 가시광선 영역에 대한 흡수가 우수하다. 따라서, 상기 광활성층에 1종의 전자 주개 및 2종의 전자 받개를 사용한 ternary blend system이 도입됨에 따라, 단락전류를 증대시킴과 동시에 개방전압을 조절할 수 있고, 높은 효율의 유기 태양 전지를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0026] 도 1 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지를 나타낸 도이다.

도 2는 본 명세서의 중합체 1, 비플러렌계 화합물인 상기 화학식 A-1, 및 플러렌계 화합물인 $PC_{71}BM$의 필름상태에서의 UV-vis-NIR 흡수 스펙트럼을 나타낸 도이다.

도 3은 본 명세서의 실시예 1-1에서 제조된 유기 태양 전지의 에너지 레벨을 나타낸 도이다.

도 4는 본 명세서의 실시예 1-1의 전압에 따른 전류 밀도 그래프이다.

도 5는 본 명세서의 실시예 1-1, 비교예 1-1 및 1-2의 파장에 따른 단락전류 및 양자 효율을 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0027] 이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.

[0028] 본 명세서에 있어서 '단위'란 중합체의 단량체에 포함되는 반복되는 구조로서, 단량체가 중합에 의하여 중합체 내에 결합된 구조를 의미한다.

[0029] 본 명세서에 있어서 '단위를 포함'의 의미는 중합체 내의 주쇄에 포함된다는 의미이다.

[0030] 본 명세서에서 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.

[0031] 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.

[0032] 본 명세서에서 HOMO 에너지 준위의 측정은 박막 표면에 UV를 조사하고, 이때 튀어나오는 전자(electron)를 검출하여 물질의 이온화 전위(ionization potential)을 측정하는 UPS(UV photoelectron spectroscopy)를 이용할 수 있다. 또는, HOMO 에너지 준위의 측정은 측정 대상 물질을 전해액과 함께 용매에 녹인 후 전압 주사(voltage sweep) 을 통하여 산화 전위(oxidation potential)을 측정하는 CV(cyclic voltammetry)를 이용할 수 있다. 또한, AC-3(RKI사)의 기계를 이용하여, 대기중에서 이온화 전위(ionization potentioal)를 측정하는 PYSA(Photoemission Yield Spectrometer in Air)방법을 이용할 수 있다.

[0033] 구체적으로 본 명세서의 HOMO 에너지 준위는 ITO 기판상에 대상 물질을 50 nm 이상의 코팅한 후, AC-3(RKI사) 측정기를 통하여 측정하였다. 또한, LUMO에너지 준위는 상기 제조된 샘플의 흡수스펙트럼 (abs.)과 광루미네선스(PL) 스펙트럼을 측정한 후, 각 스펙트럼 엣지 에너지를 계산하여 그 차이를 밴드갭(Eg)으로 보고, AC-3에서 측정한 HOMO 에너지 준위에서 밴드갭 차이를 뺀 값으로 LUMO 에너지 준위를 계산하였다.

[0034] 본 명세서의 일 실시상태는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 광활성층은 전자 주개 및 전자 받개를 포함하고, 상기 전자 주개는 상기 화학식 1로 표시되는 제1 단위; 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위; 및 상기 화학식 3 또는 4로 표시되는 제3 단위를 포함하는 중합체를 포함하며, 상기 전자 받개는 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물 및 플러렌(Fullerene) 계 화합물을 포함하는 것인 유기 태양 전지를 제공한다.

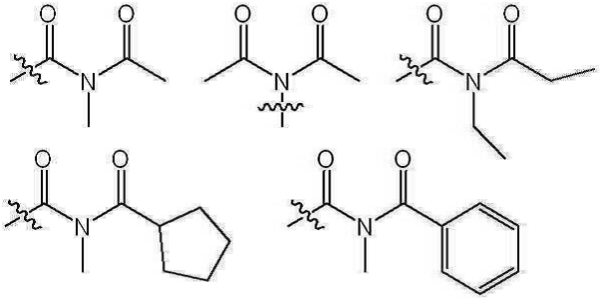
[0035] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0036] 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.

[0037] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 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 알킬술폭시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폭시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는

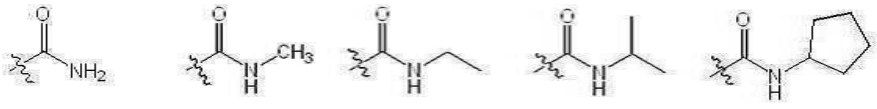
비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.

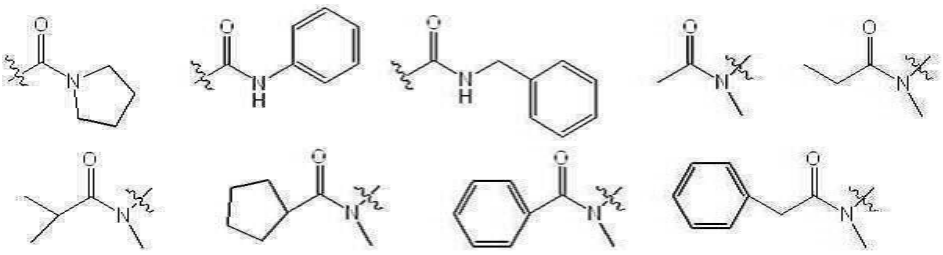
[0038] 본 명세서에 있어서, 이미드기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 하기와 같은 구조의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0039]

[0040] 본 명세서에 있어서, 아미드기는 아미드기의 질소가 수소, 탄소수 1 내지 30의 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 1 또는 2 치환될 수 있다. 구체적으로, 하기 구조식의 화합물이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.





[0041]

[0042] 본 명세서에 있어서, 할로겐기의 예로는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 있다.

[0043] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 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-메틸헥실, 시클로펜틸메틸, 시클로헥실메틸, 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 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0044] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0045] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 20인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, i-프로필옥시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

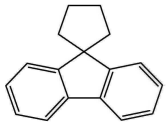
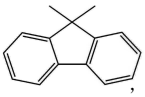
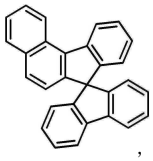
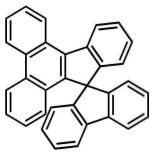
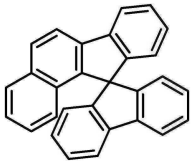
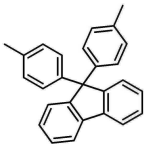
[0046] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지

40인 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 이들에 한정되지 않는다.

[0047] 본 명세서에서 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 25인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0048] 본 명세서에서 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나. 탄소수 10 내지 24인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0049] 본 명세서에 있어서, 상기 플루오레닐기는 치환될 수 있으며, 인접한 치환기들이 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0050] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우, , , , , , ,  및  등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0051] 본 명세서에 있어서, 헤테로 고리기는 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. 헤테로 고리기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 헤테로 고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딜기, 비피리딜기, 피리미딜기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸린기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤린기(phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0052] 본 명세서에 있어서, 아민기는 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기는 N 원자에, 아릴기, 알킬기, 아릴알킬기, 및 헤테로고리기 등으로 치환될 수 있으며, 아민기의 구체적인 예로는 메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, 페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0053] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기 및 아릴술폭시기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 페녹시, p-토릴옥시, m-토릴옥시, 3,5-디메틸-페녹시, 2,4,6-트리메틸페녹시, p-tert-부틸페녹시, 3-비페닐옥시, 4-비페닐옥시, 1-나프틸옥시, 2-나프틸옥시, 4-메틸-1-나프틸옥시, 5-메틸-2-나프틸옥시, 1-안트릴옥시, 2-안트릴옥시, 9-안트릴옥시, 1-페난트릴옥시, 3-페난트릴옥시, 9-페난트릴옥시 등이 있고, 아릴티옥시기로는 페닐티옥시기, 2-메틸페닐티옥시기, 4-tert-부틸페닐티옥시기 등이 있으며, 아릴술폭시기로는 벤젠술폭시기, p-톨루엔술폭시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

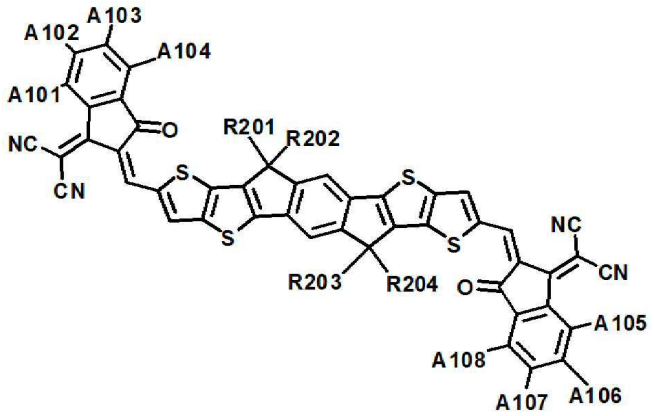
[0054] 본 명세서에 있어서, 알킬티옥시기 및 알킬술폭시기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기, 에틸티옥시기, tert-부틸티옥시기, 헥실티옥시기, 옥틸티옥시기 등이 있고, 알킬술폭시기로는 메실, 에틸술폭시기, 프로필술폭시기, 부틸술폭시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0055] 본 명세서에서 상기 탄화수소고리는 상기 1가기가 아닌 것을 제외하고, 시클로알킬, 시클로알케닐, 시클릭케톤,

아릴기 또는 이들의 축합고리일 수 있다. 상기 헤테로고리는 시클로헤테로알킬, 시클로헤테로알케닐, 시클로헤테로케톤, 지방족 헤테로고리, 방향족 헤테로고리 또는 이들의 축합고리일 수 있으며, 1가기가 아닌 것을 제외하고, 상기 헤테로고리기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[0056] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물은 하기 화학식 A로 표시된다.

[0057] [화학식 A]

[0058] 

[0059] 상기 화학식 A에 있어서,

[0060] R201 내지 R204는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

[0061] A101 내지 A108은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 할로겐기; 또는 치환 또는 비치환된 알킬기이다.

[0062] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, R201 내지 R204는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[0063] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, R201 내지 R204는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 또는 알킬기로 치환 또는 비치환된 티오펜기이다.

[0064] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, R201 내지 R204는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 n-헥실기로 치환된 페닐기; 또는 n-헥실기로 치환된 티오펜기이다.

[0065] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, R201 내지 R204는 n-헥실기로 치환된 페닐기이다.

[0066] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, R201 내지 R204는 n-헥실기로 치환된 티오펜기이다.

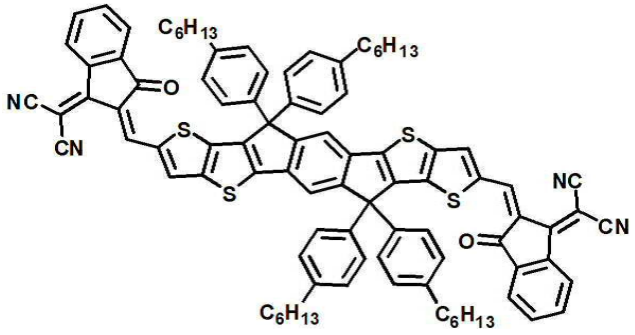
[0067] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, A101 내지 A108은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 불소; 또는 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기이다.

[0068] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, A101 내지 A108은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 불소; 또는 직쇄의 알킬기이다.

[0069] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A에 있어서, A101 내지 A108은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 불소; 또는 메틸기이다.

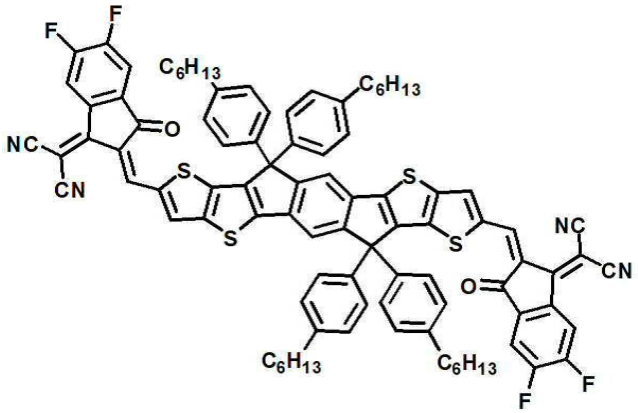
[0070] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 A는 하기 화학식 A-1 내지 A-9 중 어느 하나로 표시된다.

[0071] [화학식 A-1]



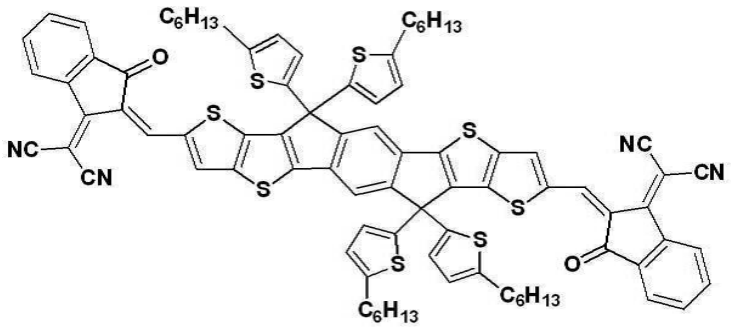
[0072]

[0073] [화학식 A-2]



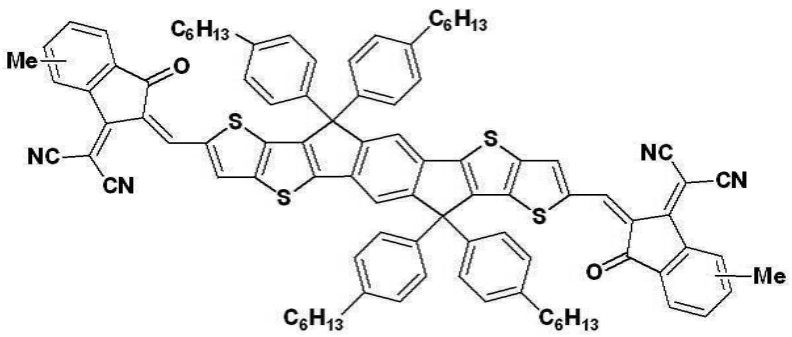
[0074]

[0075] [화학식 A-3]



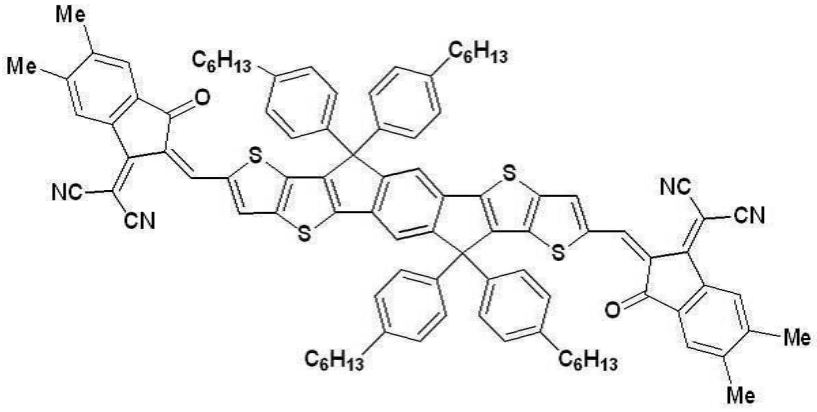
[0076]

[0077] [화학식 A-4]



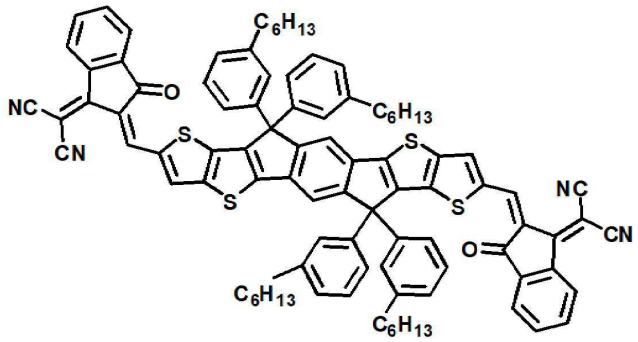
[0078]

[0079] [화학식 A-5]



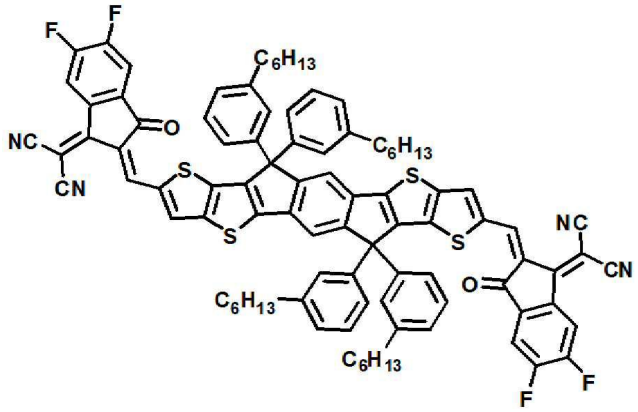
[0080]

[0081] [화학식 A-6]



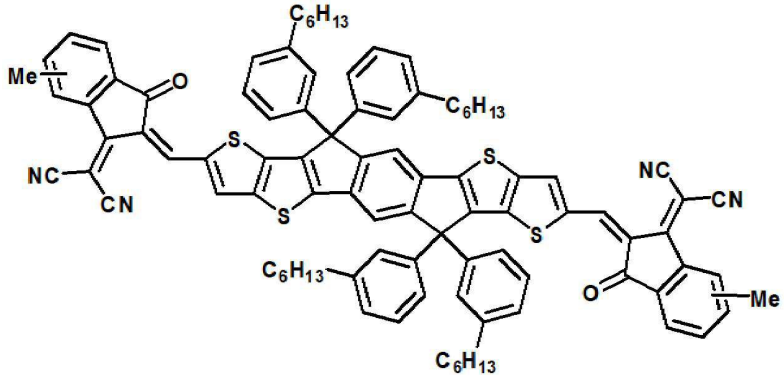
[0082]

[0083] [화학식 A-7]



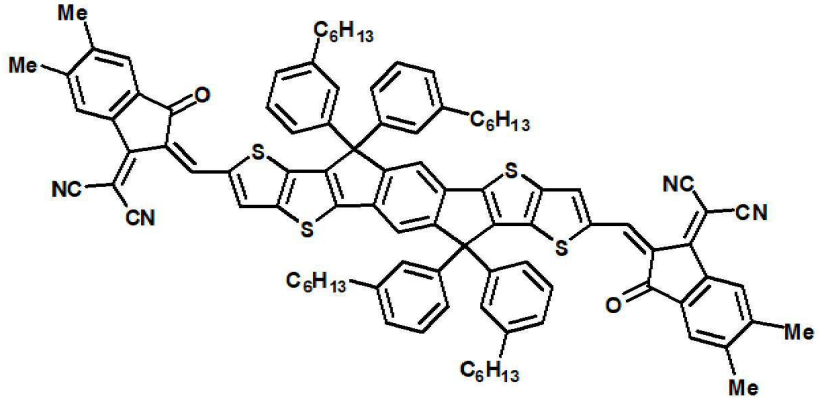
[0084]

[0085] [화학식 A-8]



[0086]

[0087] [화학식 A-9]



[0088]

[0089] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 플러렌(Fullerene)계 화합물은 $PC_{61}BM$((6,6)-phenyl-C61-butyric acid-methylester), $PC_{71}BM$((6,6)-phenyl-C71-butyric acid-methylester), $PC_{70}BM$((6,6)-phenyl-C70-butyric acid-methylester), 또는 $PC_{61}BCR$((6,6)-phenyl-C61-butyric acid-cholesteryl ester이다.

[0090] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 광활성층 중 상기 전자 주개: 전자 받개는 1 : 4 내지 4: 1의 중량비 포함되고, 구체적으로는 1 : 3 내지 3 : 1의 중량비로 포함된다. 상기 중량비를 만족하는 경우, 전자 주개 및 전자 받개의 모폴로지가 적절하게 형성되어, 유기 태양 전지의 효율이 증대되는 효과가 있다.

[0091] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 전자 받개는 전자 받개 중 상기 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물: 플러렌(Fullerene) 화합물은 0.5 : 9.5 내지 9.5 : 0.5의 중량비로 포함되고, 구체적으로 1 : 9 내지 4 : 6의 중량비로 포함되며, 더욱 구체적으로 1 : 9 내지 3 : 7의 중량비로 포함된다. 태양광 흡수 파장 영역이 서로 상이한 상기 2종의 전자 주개를 상기 중량비로 사용하는 경우, 유기 태양 전지의 개방 전압, 단락 전류 및 효율이 증대되는 효과가 있다.

[0092] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 전자 주개 및 전자 받개는 벌크 헤테로 정션(BHJ)을 구성한다.

[0093] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 중합체, 상기 비플러렌(Non-Fullerene)계 화합물 및 상기 플러렌(Fullerene) 계 화합물은 벌크 헤테로 정션(BHJ)을 구성한다.

[0094] 본 명세서에서, 벌크 헤테로 정션이란 광활성층에서 전자 주개와 전자 받개가 서로 섞여 있는 것을 의미한다.

[0095] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 광활성층은 첨가제를 더 포함한다.

[0096] 상기 첨가제는 상기 광활성층의 전체에 대하여, 0.1 내지 10 부피% 포함한다. 상기 첨가제를 0.1 내지 10 부피% 포함하는 경우, 상기 전자 주개와 전자 받개의 첨가제에 대한 선택적 용해도 및 용매와 첨가제의 끓는점 차이로 유도되는 효과적인 상분리를 유도할 수 있다. 또한, 전자주개물질의 분자 구조의 변화를 통해서도 모폴로지를 컨트롤할 수 있다.

[0097] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 첨가제의 분자량은 50 g/mol 내지 1000 g/mol이다.

[0098] 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 첨가제의 끓는점은 30 ℃ 내지 300 ℃의 유기물이다.

[0099] 본 명세서에서 유기물이란 탄소 원자를 적어도 1 이상 포함하는 물질을 의미한다.

[0100] 하나의 실시상태에 따르면, 상기 첨가제는 1,8-디아이오도옥탄(DIO:1,8-diiodooctane), 1-클로로나프탈렌(1-CN:1-chloronaphthalene), 다이페닐에테르 (DPE:diphenylether), 옥탄디티올(octane dithiol) 및 테트라브로모싸이오펜(tetrabromothiophene)으로 이루어진 군에서 선택되는 첨가제 중에서 1 또는 2 종의 첨가제를 더 포함할 수 있다.

[0101] 본 명세서에서 상기 화학식 4의 Cy1의 탄화수소고리는 화학식 4의 구조와 축합되어 연결되는 구조로 단환 또는 다환일 수 있으며, 지방족 또는 방향족일 수 있다. 또한, 1가기가 아닌 것을 제외하고는 전술한 아릴기 또는 시클로알킬기의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[0102] 본 명세서에서 상기 Cy1의 헤테로고리는 상기 탄화수소 고리에서 탄소 대신 적어도 하나의 탄소원자가 이종 원자인 N, O, Se, S 등의 헤테로 원자로 치환되는 것을 의미하며, 단환 또는 다환일 수 있으며, 지방족 또는 방향

족일 수 있으며, 1가기가 아닌 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리의 예시 중에서 선택될 수 있다.

[0103] 상기 탄화수소 고리 또는 헤테로고리는 시클로알킬, 시클로알케닐, 시클릭케톤, 방향족고리, 지방족 고리일 수 있으며, 단환 또는 다환일 수 있다.

[0104] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체는 화학식 1로 표시되는 제1 단위를 포함한다. 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 A1 및 A2는 서로 벤젠고리의 대향하는 위치, 즉 파라 위치에 치환된다. 이 경우, 상기 제1 단위의 A1 및 A2는 제1 단위의 S 원자와 서로 상호 작용을 하거나, 제2 단위의 X1 및/또는 X2와 서로 상호작용을 하여, 중합체의 평면성이 증가한다.

[0105] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X1는 S이다.

[0106] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 X2는 S이다.

[0107] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Y1은 CR"이다.

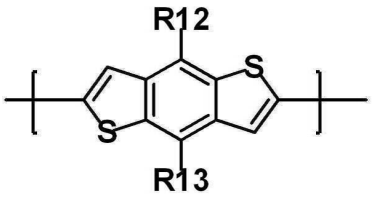
[0108] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Y2는 CR"이다.

[0109] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R10은 수소이다.

[0110] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R11은 수소이다.

[0111] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위는 하기 화학식 2-1로 표시된다.

[0112] [화학식 2-1]

[0113] 

[0114] 화학식 2-1에 있어서,

[0115] R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

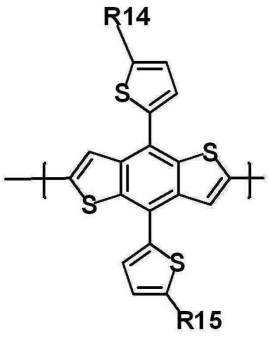
[0116] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 헤테로고리이다.

[0117] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 S 원자를 1 이상 포함하는 헤테로고리이다.

[0118] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 싸이오펜기이다.

[0119] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위는 하기 화학식 2-2로 표시된다.

[0120] [화학식 2-2]

[0121] 

[0122] 화학식 2-2에 있어서,

[0123] R14 및 R15는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 알콕시기이다.

[0124] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R14 및 R15는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기이다.

[0125] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R14 및 R15는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 2-에틸헥실기이다.

[0126] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R14 및 R15는 2-에틸헥실기이다.

[0127] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원 또는 6원의 고리이다.

[0128] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원 또는 6원의 N 원자를 1 이상 포함하는 헤테로고리이다.

[0129] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원 또는 6원의 N 원자를 1 이상 포함하는 단환의 헤테로고리이다.

[0130] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원의 고리이다.

[0131] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원의 단환 고리이다.

[0132] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원의 헤테로고리이다.

[0133] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 시클릭 케톤기이다.

[0134] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.

[0135] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 알킬기로 치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.

[0136] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 2-에틸헥실기로 치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.

[0137] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 도데실기로 치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.

[0138] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X3는 S이다.

[0139] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 X4는 S이다.

[0140] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X5는 S이다.

[0141] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y3는 N이다.

[0142] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Y4는 N이다.

[0143] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 d는 0이다.

[0144] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 d는 1이다.

[0145] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 e는 1이다.

[0146] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 e는 0이다.

[0147] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Q1은 수소이다.

[0148] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Q2는 수소이다.

[0149] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Q3는 수소이다.

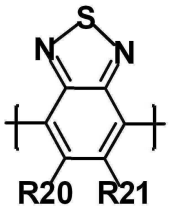
[0150] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Q4는 수소이다.

[0151] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3으로 표시되는 제3 단위는 하기 화학식 3-1 또는 화학식 3-2로 표시된다.

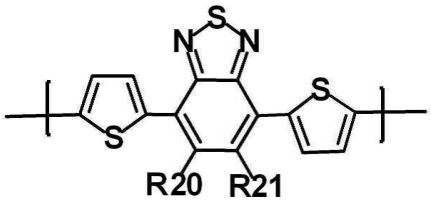
[0152] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 화학식 4로 표시되는 제3 단위는 하기 화학식 3-3으로 표시된다.

[0153] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시된다.

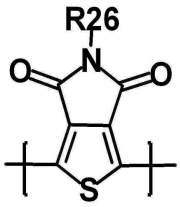
[0154] [화학식 3-1]

[0155] 

[0156] [화학식 3-2]

[0157] 

[0158] [화학식 3-3]

[0159] 

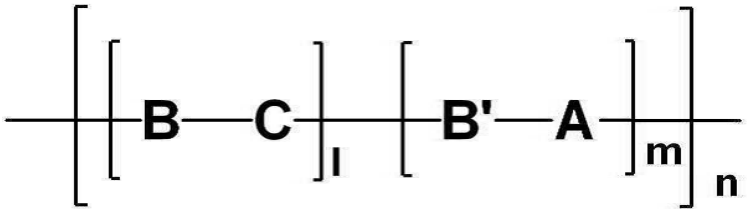
[0160] 화학식 3-1 내지 3-3에 있어서,

[0161] R20 및 R21은 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고,

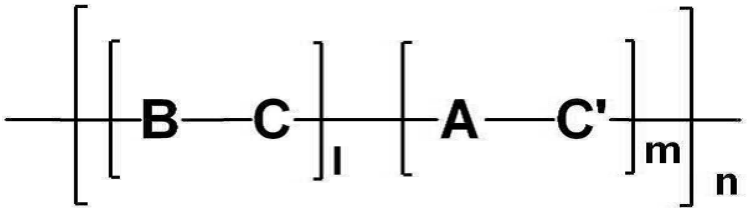
[0162] R26은 수소; 할로겐기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[0163] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체는 하기 화학식 5 또는 하기 화학식 6으로 표시되는 단위를 포함한다.

[0164] [화학식 5]

[0165] 

[0166] [화학식 6]

[0167] 

[0168] 화학식 5 및 6에 있어서,

[0169] l은 몰분율로서, 0 < l < 1인 실수이며,

[0170] m은 몰분율로서, 0 < m < 1인 실수이고,

[0171] l+m = 1이며,

[0172] A는 상기 화학식 1로 표시되는 제1 단위이고,

[0173] B 및 B'는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위이며,

[0174] C 및 C'는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 상기 화학식 3 또는 화학식 4로 표시되는 제3 단위이고,

[0175] n은 단위의 반복수로서, 1 내지 10,000의 정수이다.

[0176] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 5의 B는 상기 화학식 2-1로 표시되는 제2 단위이고, 상기 화학식 1의 a 및 b는 0이다.

[0177] 본 명세서의 다른 실시상태에 있어서, 상기 화학식 6의 C는 상기 화학식 3-1 또는 화학식 3-3으로 표시되는 제3 단위이고, 상기 화학식 1의 a 및 b는 1 내지 3의 정수이다.

[0178] 이 경우, 본원 발명의 화학식 1로 표시되는 제1 단위 중 A1 및 A2와 싸이오펜의 S 원자; 또는 화학식 1로 표시되는 제1 단위 중 A1 및 A2와 화학식 2-1로 표시되는 제 2단위의 S원자가 서로 상호작용을 한다.

[0179] 여기서 상호작용이란, 화학 구조 또는 화학 구조를 구성하는 원자들이 서로 공유 결합 이외의 작용에 의하여 영향을 주고 받는 비공유 결합성 상호 작용을 하는 것을 의미하며, 예컨대, 칼코겐(chalcogen) 결합을 의미할 수 있다.

[0180] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체는 단위 내 또는 이웃하여 있는 다른 단위와 비공유 결합성의 상호작용을 통하여, 중합체의 백본(backbone)의 비틀림 각(torsion angle)을 최소화 시켜, 중합체의 평면성을 향상시킨다. 또한, 비공유 결합성 상호작용은 파이-파이 스택킹(π-π stacking)을 향상시켜, 폴라론(polaron)과 엑시톤(exiton)의 비편재화(delocalization)로 인하여, 전하 이동도가 향상되며, 팩킹(packing)이 용이한 효과가 있다.

[0181] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3으로 표시되는 제3 단위는 R20, R21을 포함함으로써, R20, R21의 O원자; 화학식 1로 표시되는 제1 단위의 A1 및 A2; 및 화학식 2로 표시되는 제2 단위의 S 원자가 서로 상호작용을 통하여, 평면 구조(planar structure)를 형성할 수 있다.

[0182] 따라서, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체를 포함하는 경우에는 개방 전압의 증가를 유도할 수 있어, 높은 효율의 소자를 제공할 수 있다.

[0183] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 상기 화학식 3-1 로 표시되는 단위이다.

[0184] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 상기 화학식 3-2로 표시되는 단위이다.

[0185] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 상기 화학식 3-3으로 표시되는 단위이다.

[0186] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1은 수소이다.

[0187] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R2는 수소이다.

[0188] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R3는 수소이다.

[0189] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R4는 수소이다.

[0190] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, a는 0이다.

[0191] 또 다른 실시상태에 있어서, a는 1이다.

[0192] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 b는 0이다.

[0193] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 b는 1이다.

[0194] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 알콕시기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[0195] 또 하나의 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 알콕시기이다.

[0196] 또 다른 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기이다.

[0197] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R"는 치환 또는 비치환된 도데실옥시기이다.

[0198] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R"는 도데실옥시기이다.

[0199] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[0200] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R"는 치환 또는 비치환된 S 원자를 1 이상 포함하는 헤테로고리기이다.

[0201] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R"는 치환 또는 비치환된 싸이오펜기이다.

[0202] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R"는 알킬기로 치환된 싸이오펜기이다.

[0203] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R"는 탄소수 1 내지 20의 알킬기로 치환된 싸이오펜기이다.

[0204] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R"는 2-에틸헥실기로 치환된 싸이오펜기이다.

[0205] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환된 싸이오펜기이다.

[0206] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 2-에틸헥실기로 치환된 싸이오펜기이다.

[0207] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 상기 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알콕시기이다.

[0208] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 상기 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기이다.

[0209] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 상기 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 도데실옥시기이다.

[0210] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 R21은 도데실옥시이다.

[0211] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 알킬기이다.

[0212] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기이다.

[0213] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 2-에틸헥실기이다.

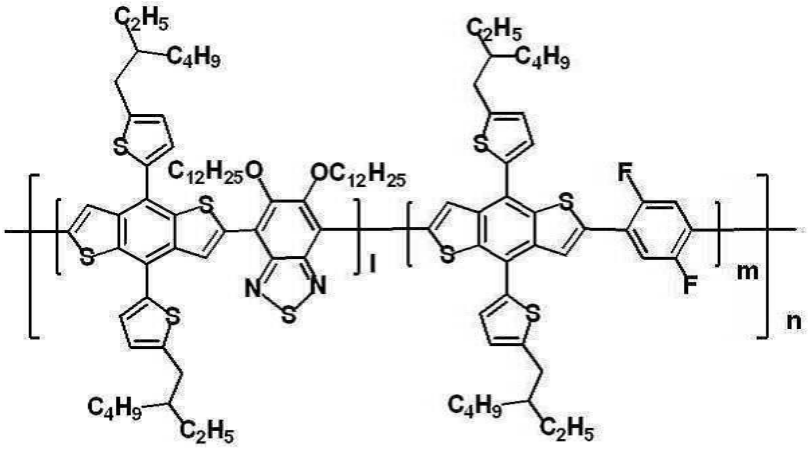
[0214] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R26은 2-에틸헥실기이다.

[0215] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 도데실기이다.

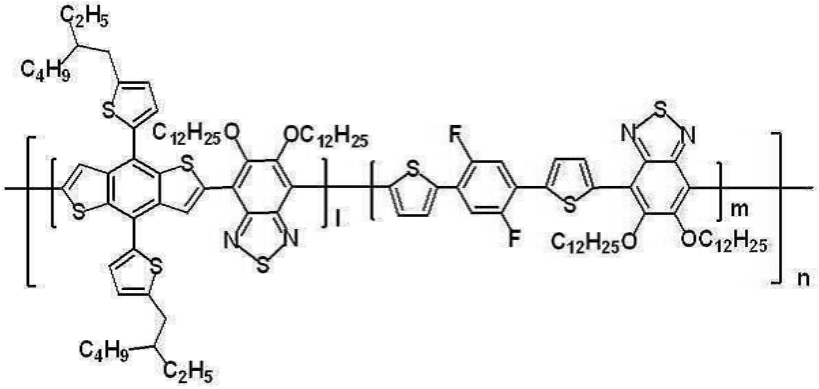
[0216] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R26은 도데실기이다.

[0217] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체는 하기 화학식 7 내지 하기 화학식 11 중 어느 하나로 표시되는 단위를 포함한다.

[0218] [화학식 7]

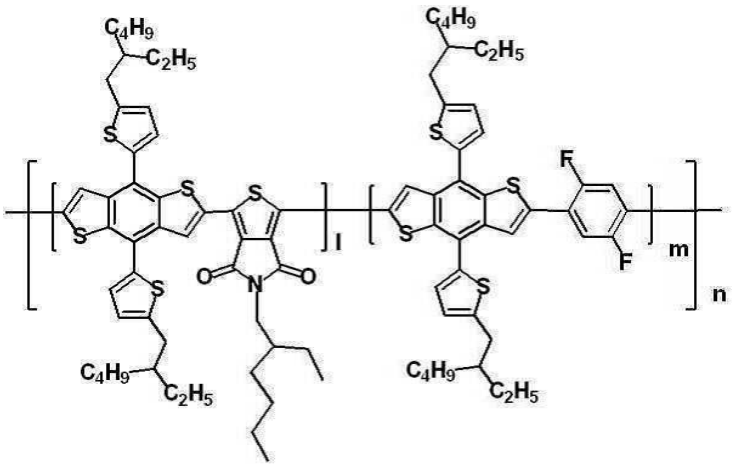
[0219] 

[0220] [화학식 8]



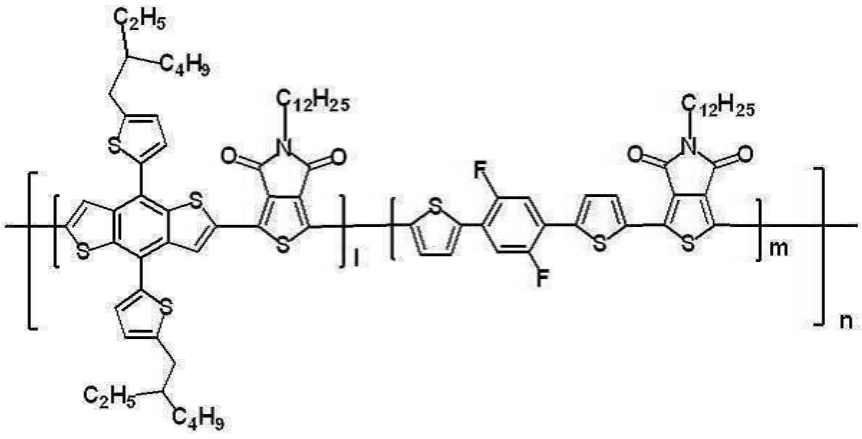
[0221]

[0222] [화학식 9]



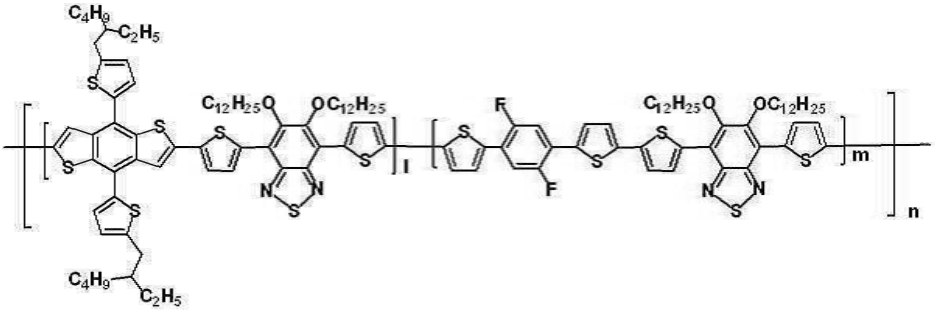
[0223]

[0224] [화학식 10]



[0225]

[0226] [화학식 11]



[0227]

[0228] 화학식 7 내지 11에 있어서,

[0229] l은 몰분율로서, 0 < l < 1인 실수이며,

[0230] m은 몰분율로서, 0 < m < 1인 실수이고,

[0231] l+m = 1이며,

[0232] n은 단위의 반복수로서, 1 내지 10,000의 정수이다.

[0233] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 l은 0.5이다.

[0234] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 m은 0.5이다.

[0235] 본 명세서의 다른 실시상태에 있어서, 상기 l은 0.75이다.

[0236] 본 명세서의 일 실시상태에에 있어서, 상기 m은 0.25이다.

[0237] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체는 랜덤 중합체다. 또한, 랜덤 중합체의 경우에 용해도가 향상되어, 소자의 제조 공정상 시간 비용적으로 경제적인 효과가 있다.

[0238] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체의 말단기로는 헤테로 고리기 또는 아릴기이다.

[0239] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체의 말단기는 4-(트리플루오로메틸)페닐기(4-(trifluoromethyl)phenyl)이다.

[0240] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체의 말단기는 브로모 싸이오펜기(bromo-thiophene)이다.

[0241] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 중합체의 말단기는 트라이플루오로-벤젠기(trifluoro-benzene)이다.

[0242] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체의 수평균 분자량은 5,000 g/mol 내지 1,000,000 g/mol이 바람직하다.

[0243] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체는 1 내지 10의 분자량 분포를 가질 수 있다. 바람직하게는 상기 중합체는 1 내지 3의 분자량 분포를 가진다.

[0244] 분자량 분포는 낮을수록, 수평균 분자량이 커질수록 전기적 특성과 기계적 특성이 더 좋아진다.

[0245] 또한, 일정 이상의 용해도를 가져서 용액도포법 적용이 유리하도록 하기 위해 수평균 분자량은 100,000 g/mol이하인 것이 바람직하다.

[0246] 상기 분자량은 클로로벤젠을 용매로하여, GPC로 측정하여 수평균분자량(Mn) 및 중량평균분자량(Mw)을 측정하였으며, 분자량 분포는 중량평균분자량(Mw)을 수평균분자량(Mn)으로 나눈 수치, 즉 중량평균분자량(Mw)/수평균분자량(Mn)를 의미한다.

[0247] 상기 중합체는 한국 특허 공개 제10-2016-0075370의 제조예로 제조될 수 있다. 상기 중합체 각 단위의 단량체를 클로로 벤젠을 용매로 하여, $Pd_2(dba)_3$, $P(o\text{-}tolyl)_3$, 넣고 마이크로웨이브 반응기로 중합하여 제조하였다.

[0248] 또한, 본 명세서에 따른 중합체는 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 중합체들을 제조할 수 있다. 도입하고자 하는 치환기가 보론산(boronic acid) 또는 보론산 에스터(boronic ester) 화합물인 경우에는 스즈키 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.

[0249] 본 명세서의 일 실시예에 따른 유기 태양 전지는 제1 전극, 광활성층 및 제2 전극을 포함한다. 상기 유기 태양 전지는 기판, 정공수송층 및/또는 전자수송층이 더 포함될 수 있다.

[0250] 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.

[0251] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지가 외부 광원으로부터 광자를 받으면 엑시톤은 광활성층의 전자 주개와 전자 받개의 계면에서 전자와 정공으로 분리된다. 분리된 정공은 광활성층에서 전자 주개(도너)를 통하여 정공 수송층을 거쳐 양극으로 수송되고, 분리된 전자는 광활성층에서 전자 받개(억셉터)를 통하여

전자 수송층을 거쳐 음극으로 수송된다.

[0252] 도 1 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지를 나타낸 도이며, 제1 전극(101) 상에 정공수송층(102), 광활성층(103) 및 제2 전극(104)이 차례로 적층된 구조이나, 본 명세서의 유기 태양 전지의 구조는 이에 한정되지 않는다.

[0253] 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.

[0254] 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.

[0255] 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.

[0256] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 노멀(Normal)구조이다. 상기 노말 구조는 기판 상에 애노드가 형성되는 것을 의미할 수 있다. 구체적으로, 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기태양전지가 노말 구조인 경우, 기판 상에 형성되는 제1 전극이 애노드일 수 있다.

[0257] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 인버티드(Inverted) 구조이다. 상기 인버티드 구조는 기판 상에 캐소드가 형성되는 것을 의미할 수 있다. 구체적으로, 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기태양전지가 인버티드 구조인 경우, 기판 상에 형성되는 제1 전극이 캐소드일 수 있다.

[0258] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 탠덤 (tandem) 구조이다. 이 경우 상기 유기 태양 전지는 2 층 이상의 광활성층을 포함할 수 있다. 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기태양 전지는 광활성층이 1층 또는 2층 이상일 수 있다.

[0259] 또 하나의 실시상태에 있어서, 버퍼층이 광활성층과 정공수송층 사이 또는 광활성층과 전자수송층 사이에 구비될 수 있다. 이때, 정공 주입층이 애노드와 정공수송층 사이에 더 구비될 수 있다. 또한, 전자주입층이 캐소드와 전자수송층 사이에 더 구비될 수 있다.

[0260] 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.

[0261] 상기 제1 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 SnO_2 : Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸싸이오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)싸이오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0262] 상기 제1 전극의 형성 방법은 특별히 한정되지 않으나, 예컨대 스퍼터링, E-빔, 열증착, 스핀코팅, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅, 닥터 블레이드 또는 그라비아 프린팅법을 사용하여 기판의 일면에 도포되거나 필름형태로 코팅됨으로써 형성될 수 있다.

[0263] 상기 제1 전극을 기판 상에 형성하는 경우, 이는 세정, 수분제거 및 친수성 개질 과정을 거칠 수 있다.

[0264] 예컨대, 패터닝된 ITO 기판을 세정제, 아세톤, 이소프로필 알코올(IPA)로 순차적으로 세정한 다음, 수분 제거를 위해 가열판에서 100℃ 내지 150℃에서 1 내지 30분간, 바람직하게는 120℃에서 10분간 건조하고, 기판이 완전히 세정되면 기판 표면을 친수성으로 개질한다.

[0265] 상기와 같은 표면 개질을 통해 접합 표면 전위를 광활성층의 표면 전위에 적합한 수준으로 유지할 수 있다. 또한, 개질 시 제1 전극 위에 고분자 박막의 형성이 용이해지고, 박막의 품질이 향상될 수도 있다.

[0266] 제1 전극의 전 처리 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.

[0267] 제1 전극 또는 기판의 상태에 따라 상기 방법 중 한가지를 선택할 수 있다. 다만, 어느 방법을 이용하든지 공통적으로 제1 전극 또는 기판 표면의 산소이탈을 방지하고 수분 및 유기물의 잔류를 최대한 억제하는 것이 바람직하다. 이 때, 전 처리의 실질적인 효과를 극대화할 수 있다.

[0268] 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 작용시켜 산소 가스가 UV 광과 반응하여 발생하는 오존에 의하여 패터닝된 ITO 기판을 세정할 수 있다.

[0269] 그러나, 본 명세서에 있어서의 패터닝된 ITO 기판의 표면 개질 방법은 특별히 한정시킬 필요는 없으며, 기판을 산화시키는 방법이라면 어떠한 방법도 무방하다.

[0270] 상기 제2 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; LiF/Al, LiO_2/Al, LiF/Fe, Al:Li, Al:BaF_2, Al:BaF_2:Ba와 같은 다층 구조의 물질이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0271] 상기 제2 전극은 $5x10^{-7}$torr 이하의 진공도를 보이는 열증착기 내부에서 증착되어 형성될 수 있으나, 이 방법에만 한정되는 것은 아니다.

[0272] 상기 정공수송층 및/또는 전자수송층 물질은 광활성층에서 분리된 전자와 정공을 전극으로 효율적으로 전달시키는 역할을 담당하며, 물질을 특별히 제한하지는 않는다.

[0273] 상기 정공수송층 물질은 PEDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenediocythiophene) doped with poly(styrenesulfonic acid)), 몰리브데늄 산화물(MoO_x); 바나듐 산화물(V_2O_5); 니켈 산화물(NiO); 및 텅스텐 산화물(WO_x) 등이 될 수 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

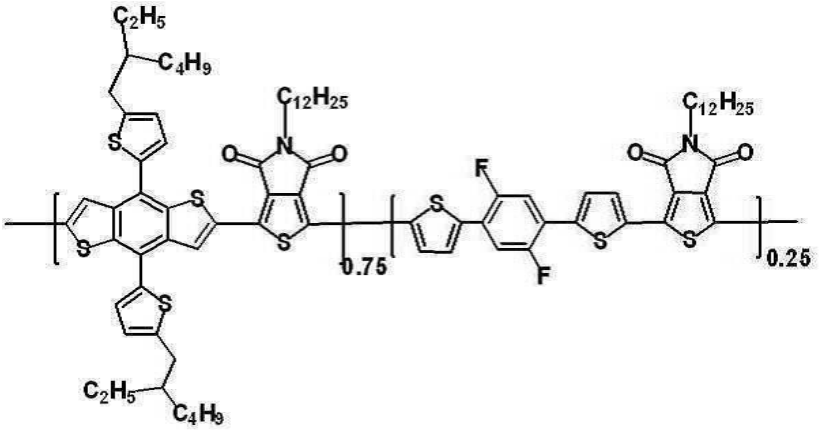
[0274] 상기 전자수송층 물질은 전자추출금속 산화물(electron-extracting metal oxides)이 될 수 있으며, 구체적으로 8-히드록시퀴놀린의 금속착물; Alq_3를 포함한 착물; Liq를 포함한 금속착물; LiF; Ca; 티타늄 산화물(TiO_x); 아연 산화물(ZnO); 및 세슘 카보네이트(Cs_2CO_3) 등이 될 수 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[0275] 광활성층은 광활성 물질인 전자 주개 및 전자 받개를 유기용매에 용해시킨 후 용액을 스핀 코팅, 슬롯 다이, 딥 코팅, 스크린 프린팅, 스프레이 코팅, 닥터 블레이드, 브러쉬 페인팅 등의 방법으로 형성할 수 있으나, 이들 방법에만 한정되는 것은 아니다.

[0276] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기 태양 전지는 $2cm^2$ 이상 $400cm^2$이하이다. 상기 크기 범위를 만족하는 유기 태양 전지는 소자 제작 및 제작된 소자 성능 측정이 용이하다.

[0277] 이하, 본 명세서를 구체적으로 설명하기 위해 실시예를 들어 상세하게 설명하기로 한다. 그러나, 본 명세서에 따른 실시예들은 여러 가지 다른 형태로 변형될 수 있으며, 본 명세서의 범위가 아래에서 상술하는 실시예들에 한정되는 것으로 해석되지 않는다. 본 명세서의 실시예들은 당업계에서 평균적인 지식을 가진 자에게 본 명세서를 보다 완전하게 설명하기 위해 제공되는 것이다.

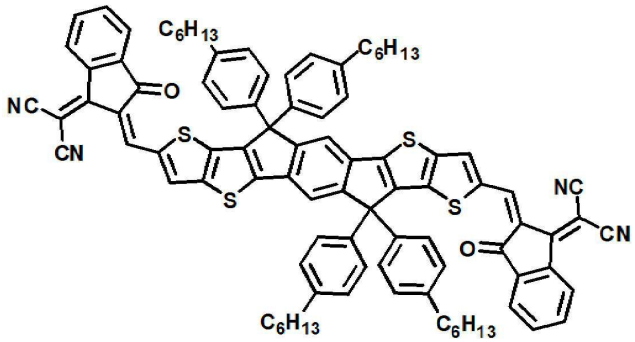
[0278] [중합체 1]



[0279]

[0280] 상기 중합체 1은 한국공개공보 제2016-0075370호의 제조예를 기초로 합성하였다.

[0281] [화학식 A-1]



[0282]

[0283] 도 2는 상기 중합체 1, 비플러렌계 화합물인 상기 화학식 A-1, 및 플러렌계 화합물인 $PC_{71}BM$의 필름상태에서의 UV-vis-NIR 흡수 스펙트럼을 나타낸 도이다. 구체적으로 UV-vis-NIR 흡수 스펙트럼 UV-vis-NIR absorption spectrometer)를 이용하여 분석하였다.

[0284] **실시예 1-1. 유기 태양 전지의 제조**

[0285] 전자 주개(상기 중합체 1) 및 전자 받개(상기 화학식 A-1(ITIC) 및 $PC_{71}BM$)를 1:1의 중량비, 상기 전자 받개 중 상기 화학식 A-1(ITIC) 및 $PC_{71}BM$을 1: 9의 중량비로 클로로벤젠(Chlorobenzene, CB)에 녹여 복합 용액(composit solution)을 제조하였고, 상기 복합용액에 다이페닐에테르(DPE:diphenylether) 3 Vol%을 첨가하였다. 이때, 복합 용액농도는 2.5 wt%로 조절하였으며, 유기 태양전지는 ITO/PEDOT:PSS/광활성층/Al의 구조로 하였다. ITO는 바타입(bar type)으로 1.5 cm× 1.5 cm가 코팅된 유리 기판은 초음파 세척하고, ITO 표면을 오존 처리한 후 45 nm 두께로 PEDOT:PSS(AI4083)를 스핀코팅하여 235℃에서 5 분 동안 열처리하였다. 광활성층의 코팅을 위해서는 중합체 1 및 상기 화학식 A(ITIC) 복합용액을 각각 1500rpm으로 10초간 스핀코팅하였고, 3×10^{-8} torr 진공 하에서 열 증발기(thermal evaporator)를 이용하여 100 nm 두께로 1 Å/s 속도로 Al 을 증착하여 유기 태양전지를 제조하였다.

[0286] 도 3은 상기 실시예 1-1에서 제조된 유기 태양 전지의 에너지 레벨을 나타낸 도이다. 각각의 에너지 레벨은 UPS(ultraviolet photoelectron spectroscopy)로 측정하였다.

[0287] **실시예 2-1. 유기 태양 전지의 제조**

[0288] 상기 실시예 1-1에서 전자 받개 중 상기 화학식 A-1(ITIC) 및 상기 $PC_{71}BM$을 1:9 대신 3:7의 중량비로 한 것을 제외하고는 상기 실시예 1-1과 동일하게 제조하였다.

[0289] **비교예 1-1. 유기 태양 전지의 제조**

[0290] 상기 실시예 1-1에서 전자 받개 중 상기 $PC_{71}BM$을 사용하지 않고, 상기 화학식 A-1(ITIC)만 사용한 것을 제외(화

학식 A-1(ITIC): $PC_{71}BM$ =10:0)하고는 상기 실시예 1-1과 동일하게 제조하였다.

[0291] **비교예 1-2. 유기 태양 전지의 제조**

[0292] 상기 실시예 1-1에서 전자 받개 중 상기 화학식 A-1(ITIC)을 사용하지 않고, 상기 $PC_{71}BM$만 사용한 것을 제외(화학식 A-1(ITIC): $PC_{71}BM$ = 0:10)하고는 상기 실시예 1-1과 동일하게 제조하였다.

[0293] 상기 실시예 1-1, 1-2, 비교예 1-1 및 1-2에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100 mW/cm^2(AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 1에 그 결과를 나타내었다.

[0294] 도 4는 상기 실시예 1-1의 전압에 따른 전류 밀도 그래프이고,도 5는 상기 실시예 1-1, 비교예 1-1 및 1-2의 파장에 따른 단락전류 및 외부 양자 효율을 나타낸 그래프이다.

표 1

[0295]

	화학식 A-1: $PC_{71}BM$	J_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)	*FF*	η (%)
실시예 1-1	1:9	13.48	1.01	0.71	9.73
실시예 1-2	3:7	14.4	1.01	0.60	8.66
비교예 1-1	10:0	12.59	1.04	0.45	5.91
비교예 1-2	0:10	10.79	0.99	0.74	7.98

[0296] 상기 표 1에 따르면, 상기 실시예 1-1 및 1-2는 1종의 전자 주개 및 2종의 전자 받개를 사용하는 ternary system을 도입하여, 최대 흡수 파장 영역이 서로 상이한 2종의 전자 받개를 사용하므로, 태양광 흡수 파장 영역의 조절이 용이하다. 따라서, 1종의 전자 주개와 1종의 전자 받개를 사용하는 binary system인 비교예 1-1 및 1-2 보다 개방 전압, 단락 전류, 충전률 및 효율이 우수하다.상기 V_{oc}는 개방전압을, J_{sc}는 단락전류를, FF는 충전율(Fill factor)를, η 는 에너지 변환 효율을 의미한다. 개방전압과 단락전류는 각각 전압-전류 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.

[0297] 도 4에 따르면, 상기 실시예 1-1의 유기 태양 전지는 효율이 우수하여, 전압이 증가할수록 전류 밀도가 가파르게 상승하는 것을 알 수 있다.

[0298] 도 5에 있어서, 실선은 외부 양자 효율(EQE)을 나타내며, 점선은 단락전류(J_{sc})를 나타낸다. 상기 단락전류는 외부 양자효율의 면적을 통해 구할 수 있으며, 이를 통해, 전류-전압(J-V)곡선에서 얻어진 단락전류 값이 적절하게 측정되었는지 알 수 있으며, 상기 도 5에서 본원 실시예 1-1의 유기 태양 전지는 1종의 전자 주개 및 2종의 전자 받개를 사용하는 ternary system을 도입하여, 최대 흡수 파장 영역이 서로 상이한 2종의 전자 받개를 사용하여 태양광 흡수 파장 영역이 비교예 1-1 및 1-2 보다 넓으므로 외부 양자 효율이 우수하며, 파장에 따른 단락전류가 비교예 1-1 및 1-2 보다 우수한 것을 알 수 있다.

부호의 설명

[0299] 101: 제1 전극

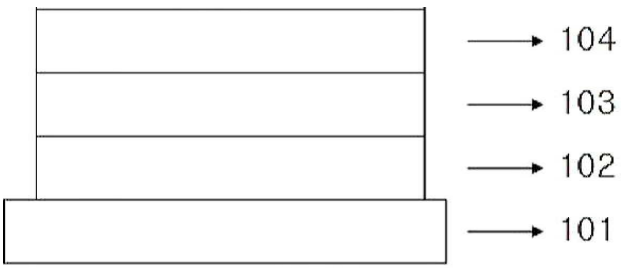
102: 정공수송층

103: 광활성층

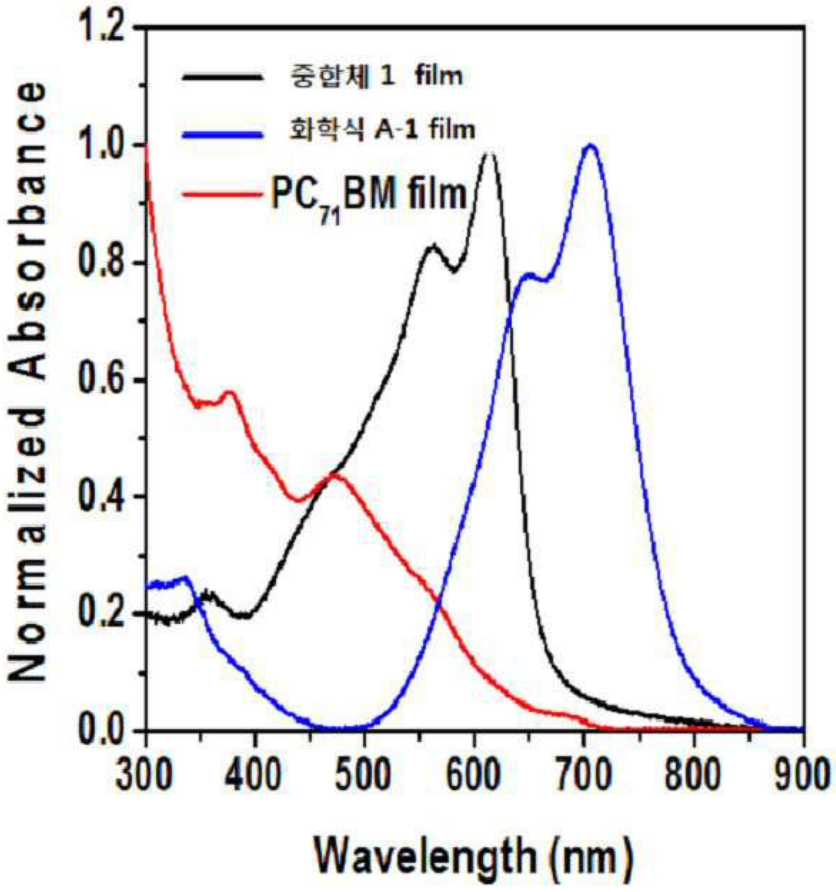
104: 제2 전극

도면

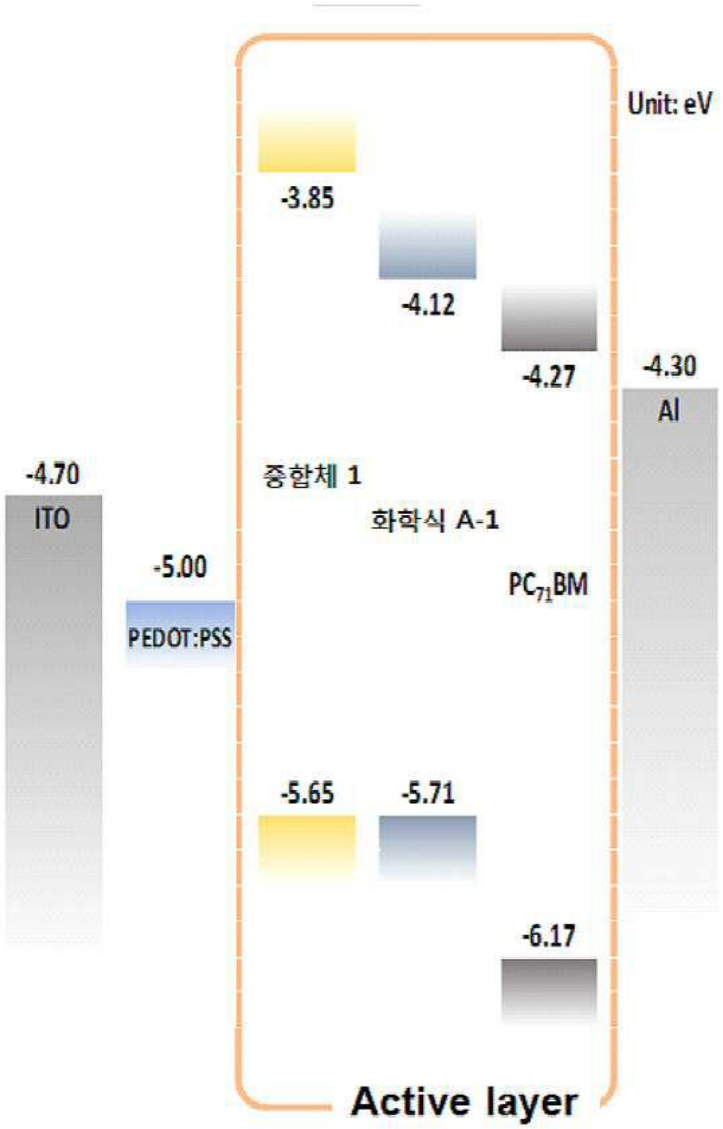
도면1


104
103
102
101

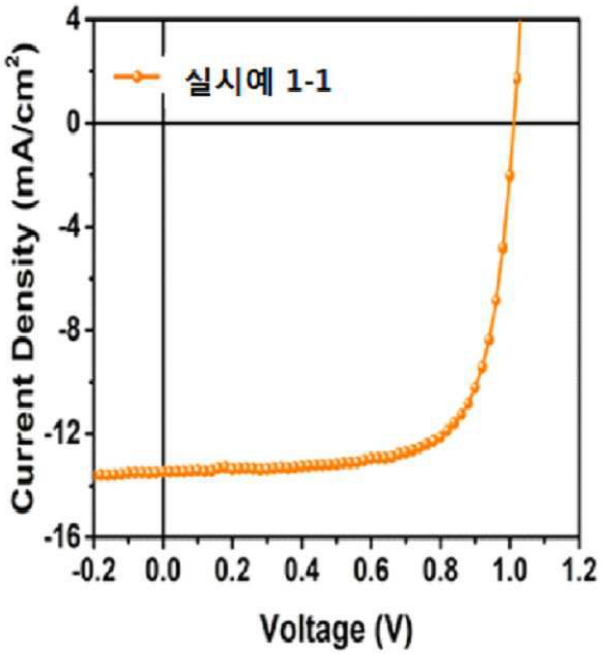
도면2


중합체 1 film
화학식 A-1 film
PC71BM film
Normalized Absorbance
Wavelength (nm)
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
1.2
300
400
500
600
700
800
900

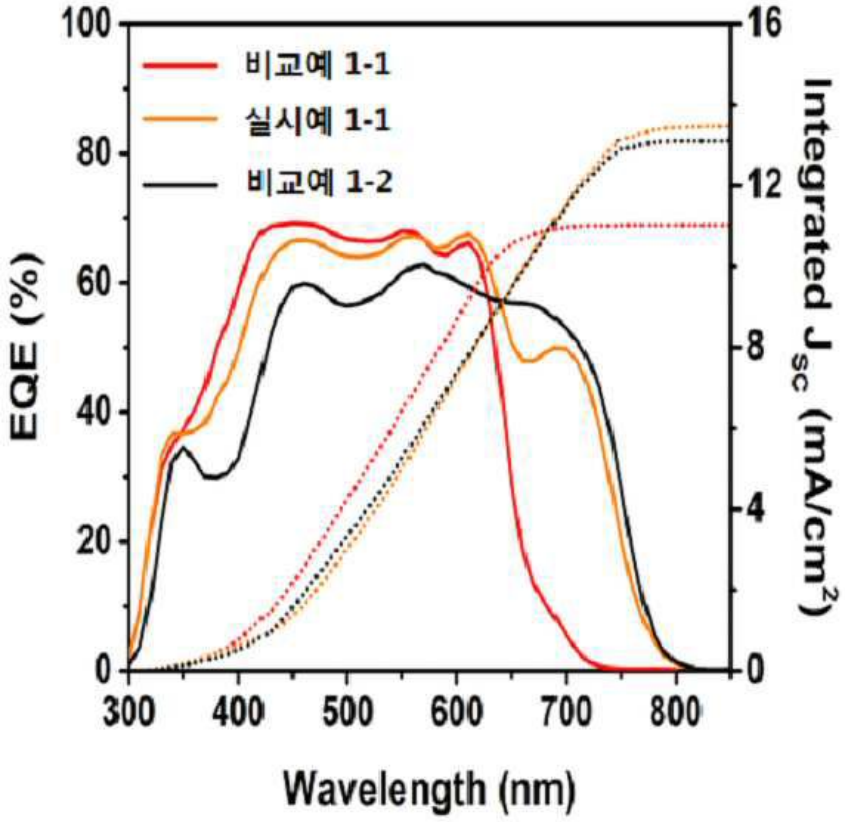
도면3


Unit: eV
-3.85
-4.12
-4.27
-4.30
Al
-4.70
ITO
중합체 1
화학식 A-1
-5.00
PEDOT:PSS
PC71BM
-5.65
-5.71
-6.17
Active layer

도면4


실시예 1-1
Current Density (mA/cm²)
Voltage (V)
4
0
-4
-8
-12
-16
-0.2
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
1.2

도면5


비교예 1-1
실시예 1-1
비교예 1-2
EQE (%)
Integrated Jsc (mA/cm²)
Wavelength (nm)
100
80
60
40
20
0
16
12
8
4
0
300
400
500
600
700
800