



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0004743
(43) 공개일자 2020년01월14일

- | | |
|--|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 473/12 (2006.01) H01L 31/0256 (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/42 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
C07D 473/12 (2013.01)
H01L 51/0071 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2019-0047633
(22) 출원일자 2019년04월24일
심사청구일자 2019년04월24일</p> <p>(30) 우선권주장
1020180077636 2018년07월04일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인
건국대학교 산학협력단
서울특별시 광진구 능동로 120, 건국대학교내 (화양동)</p> <p>(72) 발명자
문두경
서울특별시 서초구 효령로49길 57, 203동 802호 (서초동)</p> <p>이예진
서울특별시 광진구 자양로 116, 604호 (구의동, 웰츠타워)
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
특허법인다나</p> |
|--|---|

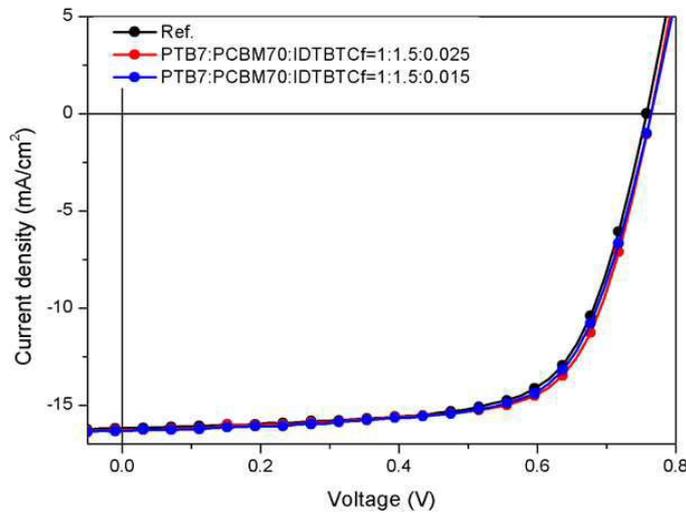
전체 청구항 수 : 총 11 항

(54) 발명의 명칭 카페인을 포함하는 유기반도체 화합물 및 이를 포함하는 유기태양전지

(57) 요약

본 발명은 카페인을 포함하는 유기반도체 화합물 및 이를 포함하는 유기태양전지에 관한 것으로, 본 발명의 유기반도체 화합물은 카페인을 말단기에 도입하여 용해도가 우수하고 분자간의 결합력이 향상될 수 있고, 이에 따라 유기반도체 화합물은 광활성층에 도입한 경우, 분자간 수소결합에 따른 스택킹에 의해 충전물을 높여 전하이동도를 향상시키고, 이를 포함하는 유기태양전지는 대기안정성이 향상되고, 우수한 광전변환효율을 나타내는 장점이 있다.

대표도 - 도5



(52) CPC특허분류

H01L 51/424 (2013.01)
H01L 51/5012 (2013.01)
H01L 2031/0344 (2013.01)
Y02E 10/549 (2013.01)

한용운

경기도 하남시 하남대로887번길 25, 108동 301호
 (덕풍동, 한솔솔파크아파트)

(72) 발명자

전성재

서울특별시 동작구 상도로34나길 15, 001호 (상도동, 스마트빌)

최준영

서울특별시 송파구 마천로7길 4, 7동 1102호 (오금동, 대림아파트)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 20174010201540
 부처명 산업통상자원부
 연구관리전문기관 한국에너지기술평가원
 연구사업명 에너지인력양성사업
 연구과제명 수요관리를 위한 스마트센서 기반 에너지 하베스팅 인력 양성 사업 고급 트랙
 기여율 1/2
 주관기관 건국대학교 산학협력단
 연구기간 2018.03.01 ~ 2018.12.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 20153010140030
 부처명 산업통상자원부
 연구관리전문기관 한국에너지기술평가원
 연구사업명 에너지기술개발사업
 연구과제명 유연 유기태양전지 모듈 및 이를 적용한 off-grid 지능형 광고 미디어 제품 개발
 기여율 1/2
 주관기관 건국대학교 산학협력단
 연구기간 2017.10.01 ~ 2018.07.31

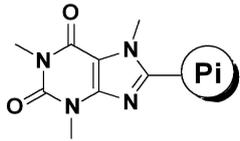
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 나타내는 반복단위를 포함하는 유기반도체 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

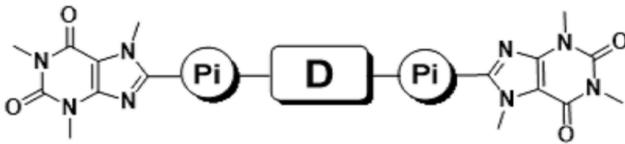
Pi는 질소, 산소, 황 및 셀레늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하고, 탄소수 5 내지 20의 방향족 헤테로 고리 치환기이다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

화학식 1로 나타내는 반복단위는 하기 화학식 2로 나타내는 화합물인 것을 특징으로 하는 유기반도체 화합물:

[화학식 2]



화학식 2에서,

Pi는 각각 독립적으로 질소, 산소, 황 및 셀레늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하고, 탄소수 5 내지 20의 방향족 헤테로 고리 치환기이고,

D는 전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular) 또는 전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)이다.

청구항 3

제 2 항에 있어서,

화학식 1에서 Pi는 탄소수 5 내지 20의 티오펜기, 탄소수 5 내지 20의 셀로노펜기, 탄소수 5 내지 20의 피롤기, 탄소수 5 내지 20의 카바졸기 또는 탄소수 5 내지 20의 티아졸기이며,

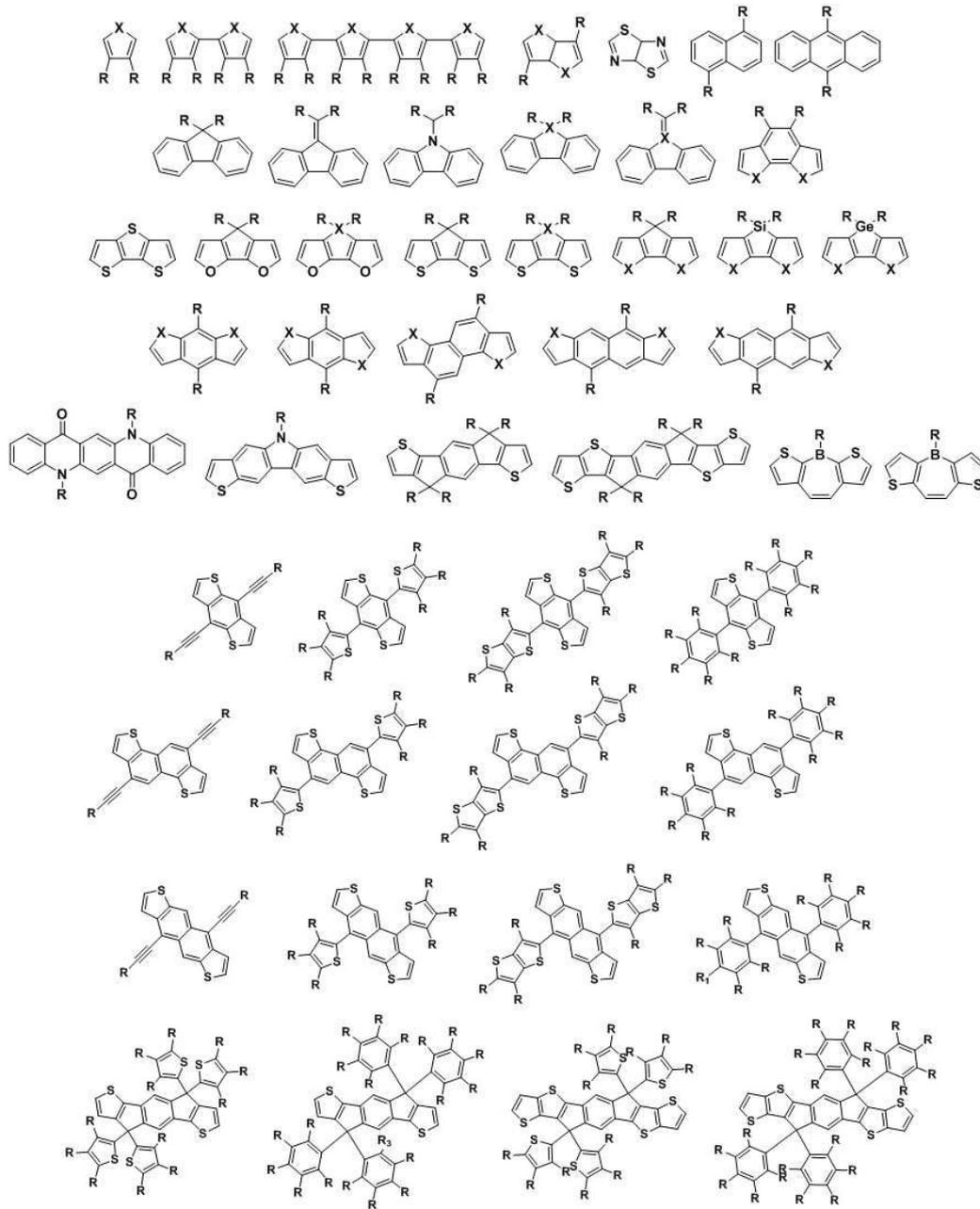
상기 티오펜기, 셀로노펜기, 피롤기 및 티아졸기에 존재하는 수소 중 어느 하나 이상은 탄소수 1 내지 25의 알킬기, 탄소수 1 내지 25의 알콕시기 또는 탄소수 1 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 것을 특징으로 하는 유기반도체 화합물.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular)는 하기 화학식 3로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 하는 유기반도체 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

X는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 및 게르마늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종이며,

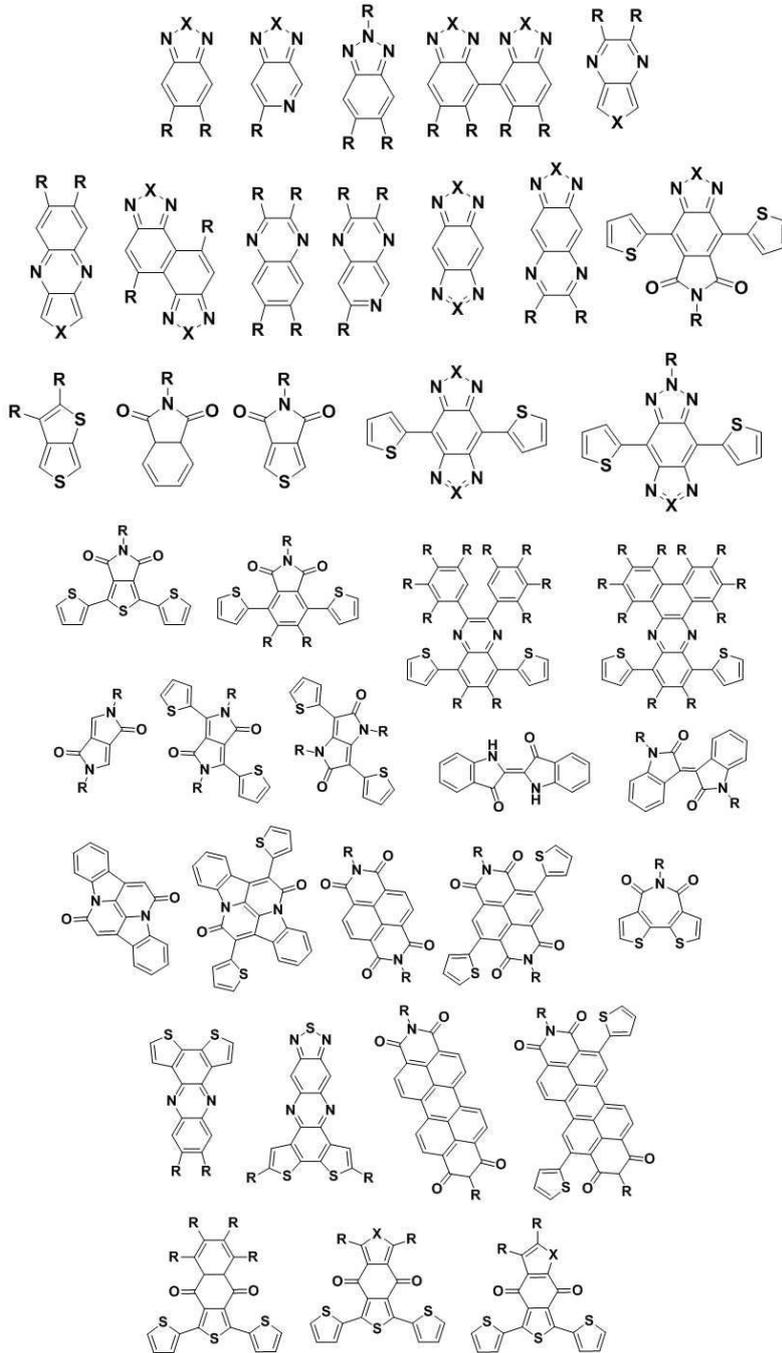
R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 티아노기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴설폭시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 붕소기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 카바졸기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 티오닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 실릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 에스터기 또는 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로 고리기이다.

청구항 5

제 2 항에 있어서,

전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)는 하기 화학식 4로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 하는 유기반도체 화합물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

X는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 및 게르마늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종이며,

R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 티아노기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴설폭시기, 탄

소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 붕소기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 카바졸기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 티오닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 실릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 에스터기 또는 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로 고리기이다.

청구항 6

제1항에 따른 유기반도체 화합물을 포함하는 광활성층을 포함하는 유기태양전지.

청구항 7

제 6 항에 있어서,

상기 광활성층은 전자 주개(donor)와 전자 받개(acceptor) 물질을 더 포함하는 유기태양전지.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

상기 전자 주개(donor) 물질은 PTB7(Poly[[4,8-bis[(2-ethylhexyl)oxy]benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl][3-fluoro-2-[(2-ethylhexyl)carbonyl]thieno[3,4-b]thiophenediyl]]), PCE10(Poly[4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl-alt-(4-(2-ethylhexyl)-3-fluorothieno[3,4-b]thiophene)-2-carboxylate-2-6-diyl]), P3HT(Poly-3-hexylthiophene) 또는 PCE12(Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(1',3'-di-2-thienyl-5',7'-bis(2-ethylhexyl)benzo[1',2'-c:4',5'-c']dithiophene-4,8-dione))]을 포함하는 유기태양전지.

청구항 9

제 7 항에 있어서,

상기 전자 받개(acceptor) 물질은 PCBM60(Phenyl-C60-butyric acid methyl ester), PCBM70(Phenyl-C70-butyric acid methyl ester), ITIC(3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(4-hexylphenyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene)), ITIC-Th(3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(5-hexylthienyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene), 또는 ITIC-4F(3,9-bis(2-methylene-((3-(1,1-dicyanomethylene)-6,7-difluoro)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(4-hexylphenyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene)을 포함하는 유기태양전지.

청구항 10

제6항에 있어서,

기재; 제1 버퍼층; 광활성층; 제2 버퍼층 및 전극이 순차로 적층된 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 유기태양전지.

청구항 11

제6항에 있어서,

에너지 변환효율이 8.5% 이상인 것을 특징으로 하는 유기태양전지.

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0003] 태양복사를 전기로 변환하는 중요한 방법 중 하나는 광기전력효과(Photovoltaic effect)로 1839년 프랑스의 물리학자 Bexquerel에 의해 처음 발표되었다. 광기전력효과란 일반적으로 빛이 쬐여지는 고체나 액체 등의 시스템 속에서 두 개의 전극 사이에 전기 전압(electric voltage)이 나타나는 현상으로 간단히 정의된다. 실제로 대부분의 광소자(photovoltaic devices)는 광 전압이 형성된 반도체로 구성되어 있으며, 이러한 소자들을 일반적으로 태양전지라 한다.

[0004] 특히, 유기태양전지는 다양한 유기 반도체 재료를 사용하여 유연성 소자의 제작이 가능하고 롤투롤(roll-to-roll) 공정으로 인해 무기계 태양전지에 비해 값싼 공정 단가를 실현할 수 있다. 최근에 다양한 물질의 개발 및 소자 제작 기술이 향상되면서 10%가 넘는 전력 변환 효율을 달성하였으며 이러한 높은 효율을 얻기 위해서는 에너지 준위, 흡광계수, 전하 수송 능력 등의 좋은 특성을 가지는 물질의 개발이 필요하다.

[0005] 유기태양전지는 다양한 역할의 층을 적층시켜 소자를 구현하는데, 소자의 가장 핵심적인 광활성층은 도너(donor)물질과 억셉터(acceptor)물질을 벌크헤테로접션(bulk-heterojunction)하여 만든다. 특히 억셉터로는 다양한 도너들과의 높은 호환성 및 상용성을 가진 풀러렌(Fullerene) 유도체들이 주로 사용되고 있다.

[0006] 풀러렌 유도체들은 탄소 60개 또는 70개 이상으로 이루어진 축구공과 같은 형태를 가진 물질로서 전자수송능력이 우수한 물질이다. 그러나 가시광 영역의 빛을 잘 흡수하지 못하며 낮은 안정성, 개방전압의 한계, 높은 생산 단가 등의 문제점들을 가지고 있다. 또한 최근 연구에 따르면 시간이 경과할수록 풀러렌 유도체 간의 자기응집(self-aggregation) 현상이 발생하여 소자의 장기안정성을 저해시킨다고 보고되고 있다. 따라서 우수한 유기태양전지를 만들기 위해서는 풀러렌의 자기응집 문제를 극복하고 높은 전자수송능력을 유지시키는 새로운 물질의 개발과 적용이 필요하다.

선행기술문헌

특허문헌

[0008] (특허문헌 0001) 대한민국 특허공개번호 10-2013-0019849호

발명의 내용

해결하려는 과제

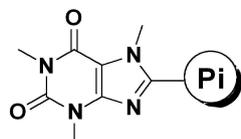
[0009] 본 발명의 목적은, 카페인을 말단기에 도입하여 용해도가 우수하고 분자간의 결합력이 향상된 유기반도체 화합물 및 이를 포함하는 유기태양전지를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0011] 상기 과제를 해결하기 위해, 본 발명은,

[0012] 하기 화학식 1로 나타내는 반복단위를 포함하는 유기반도체 화합물을 제공한다:

[0013] [화학식 1]



[0014]

- [0015] 상기 화학식 1에서,
- [0016] Pi는 질소, 산소, 황 및 셀레늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하고, 탄소수 5 내지 20의 방향족 헤테로 고리 치환기이다.
- [0017] 또한, 본 발명은 상기 서술한 유기반도체 화합물을 포함하는 유기태양전지를 제공한다.

발명의 효과

- [0019] 본 발명에 따른 유기반도체 화합물은 광활성층에 도입한 경우, 분자간 수소결합에 따른 스택킹에 의해 층진률을 높여 전하이동도를 향상시키고, 이를 포함하는 유기태양전지는 대기안정성이 향상되고, 우수한 광전변환효율을 나타내는 장점이 있다.

도면의 간단한 설명

- [0021] 도 1은 본 발명에 따른 유기반도체 화합물을 합성하는 단계를 나타낸 모식도이다.
- 도 2는 일실시예에 따른 유기반도체 화합물의 1H-NMR 스펙트럼이다.
- 도 3은 일실시예에 따른 유기반도체 화합물의 UV-Vis 광흡수 스펙트럼을 나타낸 것이다.
- 도 4는 일실시예에 따른 유기반도체 화합물의 전기화학적 스펙트럼(Cyclic Voltammetry)을 나타낸 것이다.
- 도 5는 일실시예에 따른 유기태양전지의 전류-전압 곡선을 나타낸 그래프이다.
- 도 6은 일실시예에 따른 유기태양전지의 안정성을 나타낸 그래프이다.
- 도 7은 본 발명에 따른 유기태양전지의 모식도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0022] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다.
- [0023] 그러나, 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.
- [0024] 본 출원에서 사용한 용어는 단지 특정한 실시예를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0025] 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0026] 따라서, 본 명세서에 기재된 실시예에 도시된 구성은 본 발명의 가장 바람직한 일 실시예에 불과할 뿐이고 본 발명의 기술적 사상을 모두 대변하는 것은 아니므로, 본 출원시점에 있어서 이들을 대체할 수 있는 다양한 균등물과 변형 예들이 있을 수 있다.
- [0027] 유기태양전지는 다양한 역할의 층을 적층시켜 소자를 구현하는데, 소자의 가장 핵심적인 광활성층은 전자 주개 물질과 전자 받게 물질을 벌크헤테로정선하여 제조한다. 특히 전자 주개 물질로는 다양한 전자 받게 물질과 높은 호환성 및 상용성을 가진 풀러렌 유도체들을 사용하나, 가시광 영역의 빛을 잘 흡수하지 못하며 낮은 안정성, 개방전압의 한계가 있고, 높은 생산단가 등의 문제점을 가지고 있다.
- [0028] 이를 극복하기 위하여, 본 발명은 전자가 풍부한 방향족 분자구조를 가지고 있는 물질과 잘 회합되고, 높은 전기음성도를 갖는 질소 및 산소 원자가 존재하여 수소결합이 가능한 카페인(Caffeine, 1,3,7-트리메틸퓨린-

2,6-디온)을 유기반도체 화합물로 광활성층의 업셋터로 적용하고자 한다.

[0029] 특히, 카페인에 포함된 산소 원자와 질소 원자의 전기음성도는 수소 원자의 전기음성도 보다 상당히 크기 때문에 산소 원자와 질소 원자에 부분적인 음전하가 생성되어 근처 분자의 부분적인 양전하와 수소결합을 하고 분자 간의 거리가 매우 가깝게 패킹된다. 이로 인해 이를 포함하는 유기태양전지는 광활성층 내 분자들 간의 2차 결합 형태인 수소결합, 반데르발스의 힘(Van der waals force) 등과 같은 상호작용을 하며, 광활성층 내의 캐리어 이동을 원활하게 하여 효율을 향상시키고, 공기나 수분에 의한 침투를 막아 대기 안정성 또한 증가시키는 역할을 한다.

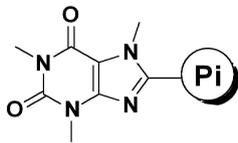
[0031] 이하, 본 발명을 보다 상세히 설명한다.

[0033] **유기반도체 화합물**

[0034] 본 발명은 일실시예에서,

[0035] 하기 화학식 1로 나타내는 반복단위를 포함하는 유기반도체 화합물을 제공한다:

[0036] [화학식 1]



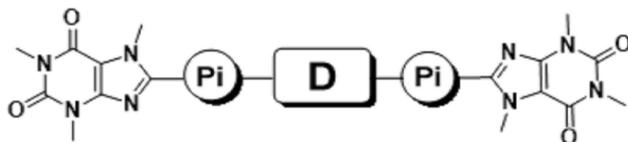
[0037]

[0038] 상기 화학식 1에서,

[0039] Pi는 질소, 산소, 황 및 셀레늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하고, 탄소수 5 내지 20의 방향족 헤테로 고리 치환기이다.

[0040] 하나의 예로서, 본 발명에 따른 유기반도체 화합물은 화학식 2로 나타내는 화합물을 포함할 수 있다:

[0041] [화학식 2]



[0042]

[0043] 화학식 2에서,

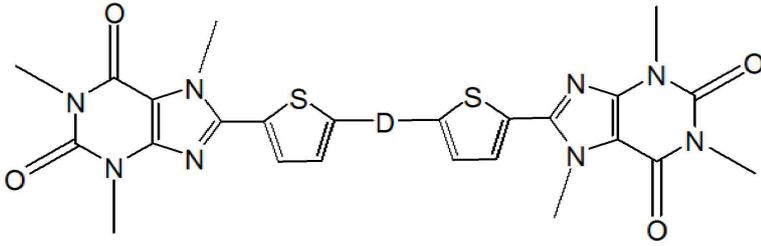
[0044] Pi는 각각 독립적으로 질소, 산소, 황 및 셀레늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하고, 탄소수 5 내지 20의 방향족 헤테로 고리 치환기이고,

[0045] D는 전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular) 또는 전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)이다.

[0046] 구체적으로, Pi는 탄소수 5 내지 20의 티오펜, 탄소수 5 내지 20의 셀로노펜, 탄소수 5 내지 20의 피롤, 탄소수 5 내지 20의 카바졸, 탄소수 5 내지 20의 벤조티아디아졸 또는 탄소수 5 내지 20의 티아졸을 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 티오펜기, 셀로노펜기, 피롤기 및 티아졸기에 존재하는 수소 중 어느 하나 이상은 탄소수 1 내지 25의 알킬기, 탄소수 1 내지 25의 알콕시기 또는 탄소수 1 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 것일 수 있다.

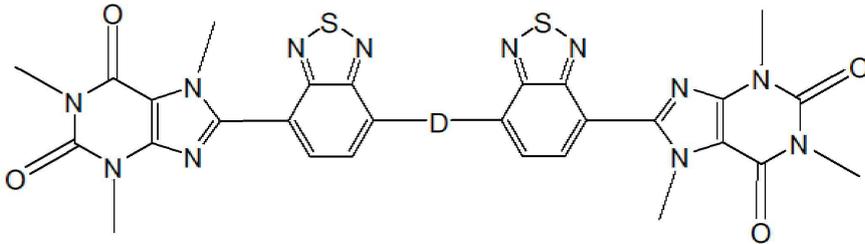
[0047] 상기 화학식 2로 나타내는 화합물은 하기 화학식 2-1 내지 2-3으로 나타내는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다:

[0048] [화학식 2-1]



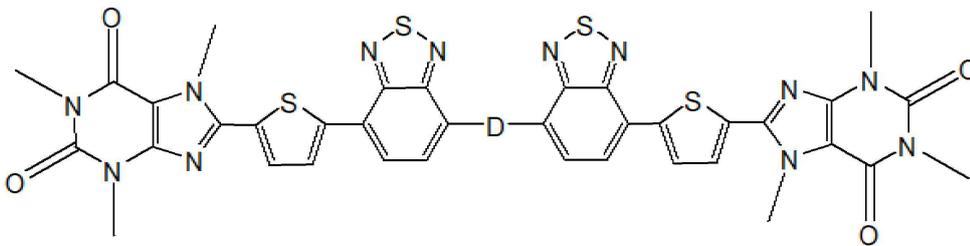
[0049]

[0050] [화학식 2-2]



[0051]

[0052] [화학식 2-3]



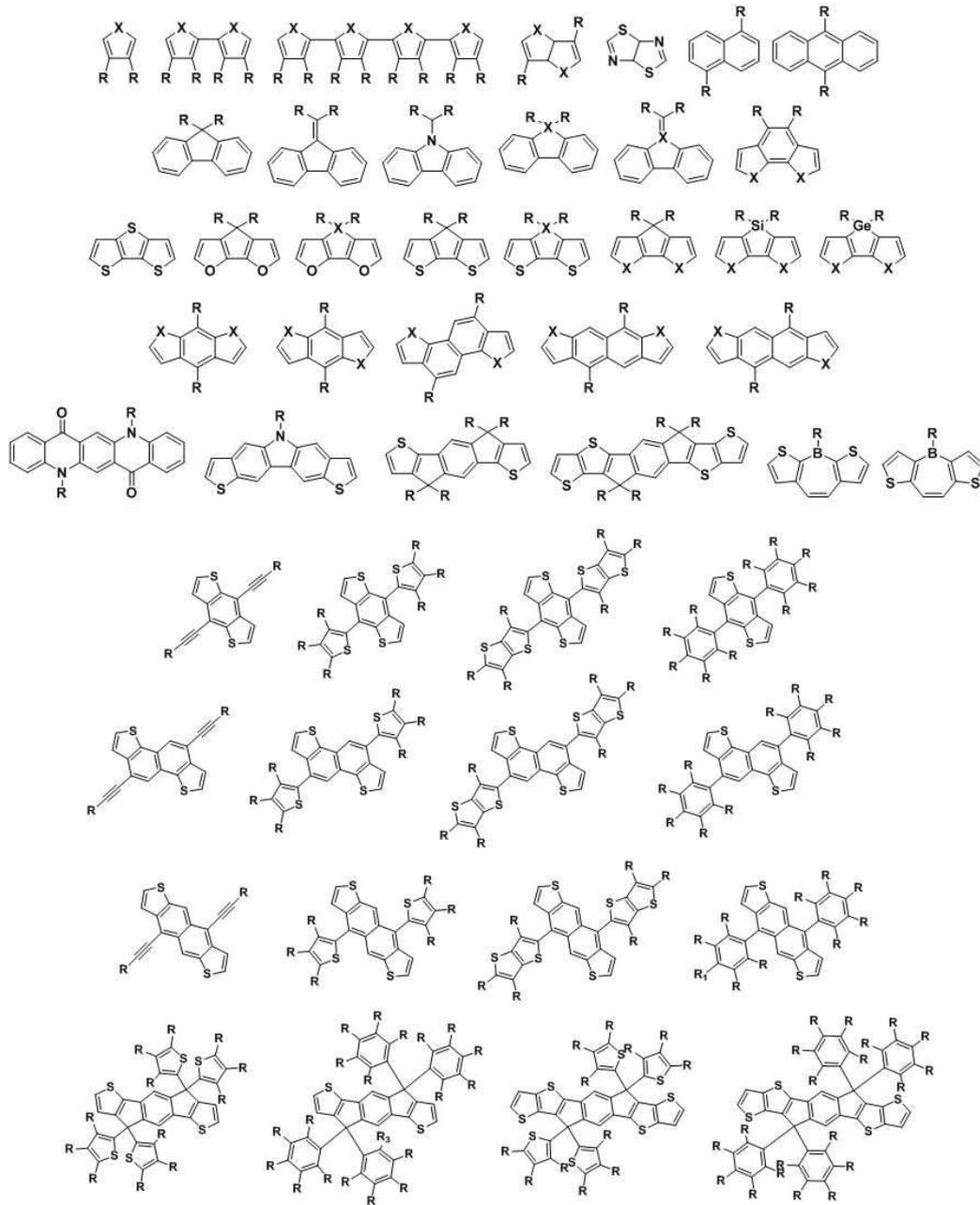
[0053]

[0054] 화학식 2-1 내지 2-3에서,

[0055] D는 독립적으로 전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular) 또는 전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)이다.

[0056] 또한, 상기 전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular)는 하기 화학식 3로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상일 수 있다:

[0057] [화학식 3]



[0058]

[0059] 상기 화학식 3에서,

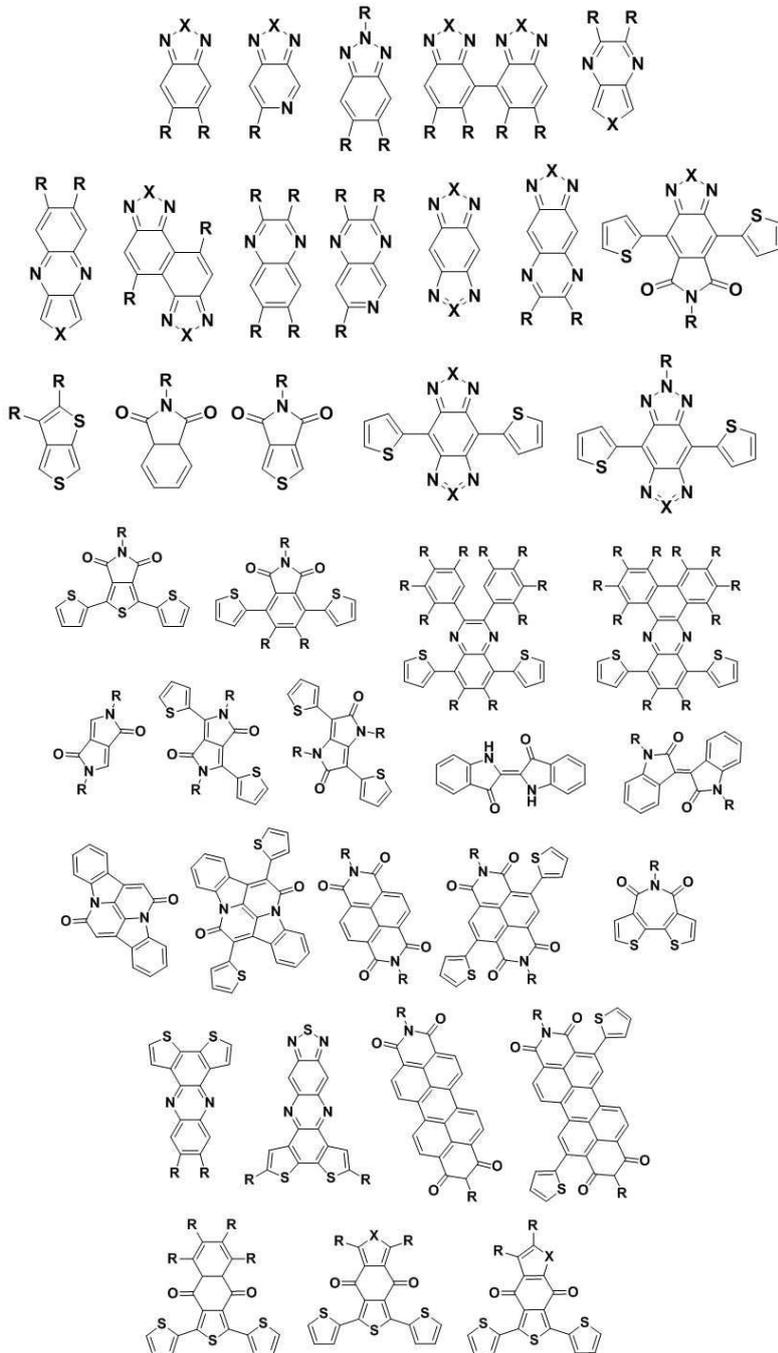
[0060] X는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 및 게르마늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종이며,

[0061] R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 티아노기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴설폭시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 붕소기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 카바졸기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 티오닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 실릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 에스터기 또는 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로 고리기이다.

[0062] 예를 들어, 전자 주개 특성을 갖는 분자는 플루오레닐, 카바졸, 비티오펜기(bithiophene), 벤조디티오펜 (benzodithiophene), 비티에닐-벤조디티오펜(bithienyl-benzodithiophene), 인다세노디티오펜 (indacenodithiophene), 인다세노디티에노티오펜(Indacenodithienothiophene), 디티에노실론(dithenosilole), 디티에노피롤(dithienopyrrole), 벤조디퓨란(benzodifuran) 및 이들의 유도체로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 종 이상의 반복단위일 수 있다.

[0063] 아울러, 상기 전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)는 하기 화학식 4로 표시되는 화합물 중에서 선택 되는 1종 이상일 수 있다:

[화학식 4]



[0065]

[0066] 상기 화학식 4에서,

[0067] X는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 및 게르마늄으로 이루어진 군 으로부터 선택되는 1종이며,

[0068] R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 티아노기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴설폭시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 붕소기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아탈킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 카바졸기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 티오닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 실릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 에스터기 또는 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로 고리기이다.

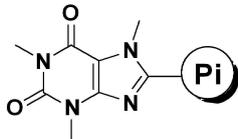
[0069] 예를 들어, 전자 받개 특성을 갖는 분자는 벤조디티오펜-4,8-디온(benzodithiophene-4,8-dione), 벤조티아졸(benzothiazole), 티아디아졸로피리딘(thiadiazolopyridine), 디케토피롤로피롤(diketopyrrolopyrrole), 인디고(Indigo), 나프탈렌다이미드(naphthalenediimide), 페릴렌다이미드(perylenediimide), 비티오펜디카복실이미드(bithiophenedicarboximide), 티에노피롤레디온(Thienopyrroledione) 및 퀴녹살린(quinoxaline)으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상 또는 이의 유도체를 포함할 수 있다.

[0071] **유기태양전지**

[0072] 본 발명은 상기 서술한 유기반도체 화합물을 포함하는 유기태양전지를 제공한다.

[0073] 본 발명에 따른 유기태양전지는 하기 화학식 1로 나타내는 반복단위를 포함하는 유기반도체 화합물을 포함할 수 있다:

[0074] [화학식 1]

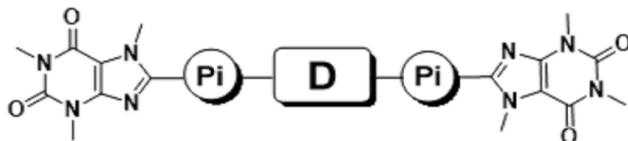


[0075] 상기 화학식 1에서,
 [0076] Pi는 질소, 산소, 황 및 셀레늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하고, 탄소수 5 내지 20의 방향족 헤테로 고리 치환기이다.

[0077] 하나의 예로서, 본 발명에 따른 유기반도체 화합물은 화학식 2로 나타내는 화합물을 포함할 수 있다:

[0078] 하나의 예로서, 본 발명에 따른 유기반도체 화합물은 화학식 2로 나타내는 화합물을 포함할 수 있다:

[0079] [화학식 2]



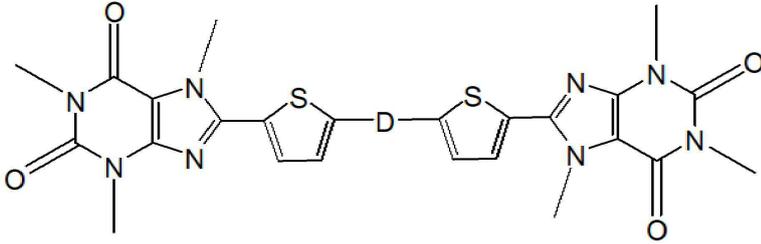
[0080] 화학식 2에서,
 [0081] Pi는 각각 독립적으로 질소, 산소, 황 및 셀레늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하고, 탄소수 5 내지 20의 방향족 헤테로 고리 치환기이고,

[0082] D는 전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular) 또는 전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)이다.

[0083] 구체적으로, Pi는 탄소수 5 내지 20의 티오펜, 탄소수 5 내지 20의 셀로노펜, 탄소수 5 내지 20의 피롤, 탄소수 5 내지 20의 카바졸, 탄소수 5 내지 20의 벤조티아디아졸 또는 탄소수 5 내지 20의 티아졸을 포함할 수 있다. 구체적으로, 상기 티오펜기, 셀로노펜기, 피롤기 및 티아졸기에 존재하는 수소 중 어느 하나 이상은 탄소수 1 내지 25의 알킬기, 탄소수 1 내지 25의 알콕시기 또는 탄소수 1 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 것일 수 있다.

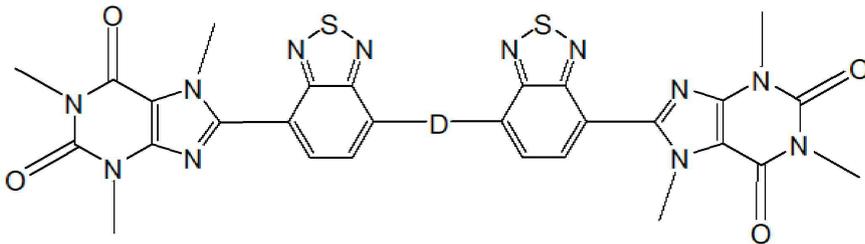
[0085] 상기 화학식 2로 나타내는 화합물은 하기 화학식 2-1 내지 2-3으로 나타내는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다:

[0086] [화학식 2-1]



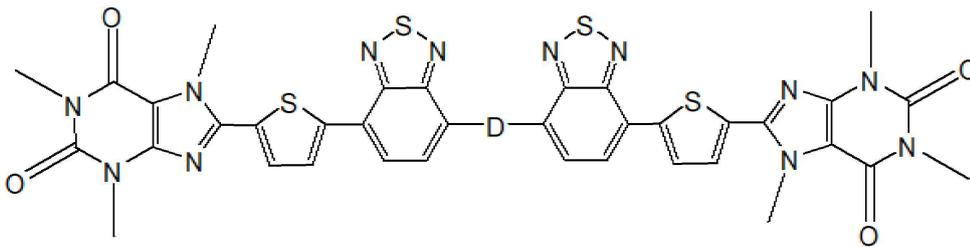
[0087]

[0088] [화학식 2-2]



[0089]

[0090] [화학식 2-3]

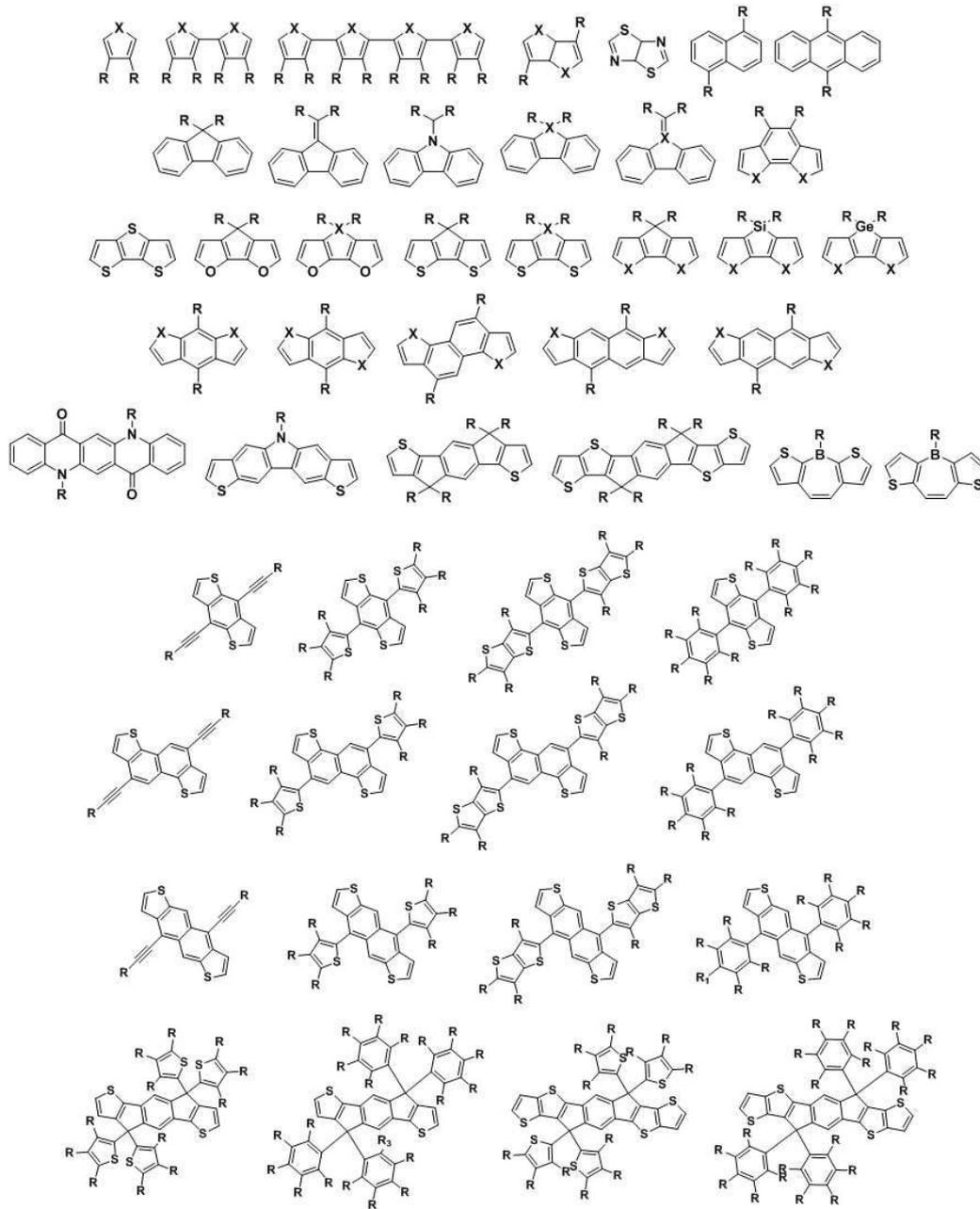


[0091]

[0092] 화학식 2-1 내지 2-3에서,

[0093] D는 독립적으로 전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular) 또는 전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)이다. 또한, 상기 전자 주개 특성을 갖는 분자(p-type molecular)는 하기 화학식 3로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상일 수 있다:

[0094] [화학식 3]



[0095]

[0096] 상기 화학식 3에서,

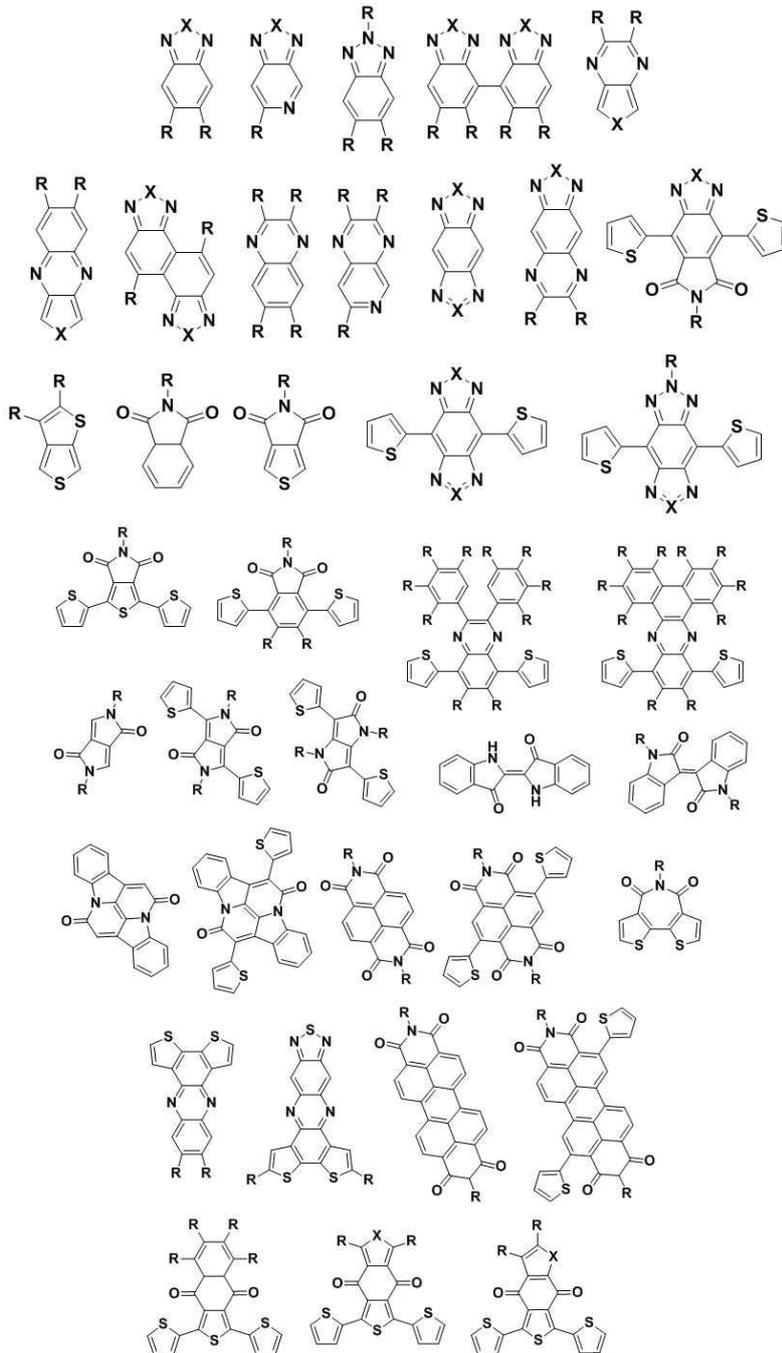
[0097] X는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 및 게르마늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종이며,

[0098] R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 티아노기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴설폭시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 붕소기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 카바졸기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 티오닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 실릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 에스터기 또는 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로 고리기이다.

[0099] 예를 들어, 전자 주개 특성을 갖는 분자는 플루오레닐, 카바졸, 비티오펜(bithiophene), 벤조디티오펜(benzodithiophene), 비티에닐-벤조디티오펜(bithienyl-benzodithiophene), 인다세노디티오펜(indacenodithiophene), 인다세노디티에노티오펜(Indacenodithienothiophene), 디티에노실론(dithenosilole), 디티에노피롤(dithienopyrrole), 벤조디퓨란(benzodifuran) 및 이들의 유도체로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 종 이상의 반복단위를 포함할 수 있다.

[0100] 아울러, 상기 전자 받개 특성을 갖는 분자(n-type molecular)는 하기 화학식 4로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상일 수 있다:

[0101] [화학식 4]



[0102]

[0103] 상기 화학식 4에서,

[0104] X는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 및 게르마늄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종이며,

- [0105] R은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 티아노기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴설폭시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 붕소기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아달킬아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 아릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 카바졸기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알콕시기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 티오닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 실릴기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 치환 또는 비치환된 에스터기 또는 질소, 산소, 황, 셀레늄, 텔루륨 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 방향족 헤테로 고리기이다.
- [0106] 예를 들어, 전자 받개 특성을 갖는 분자는 벤조디티오펜-4,8-디온(benzodithiophene-4,8-dione), 벤조티아졸(benzothiazole), 티아디아졸로피리딘(thiadiazolopyridine), 디케토피롤로피롤(diketopyrrolopyrrole), 인디고(Indigo), 나프탈렌디이미드(naphthalenediimide), 페릴렌디이미드(perylenediimide), 비티오펜디카복실이미드(bithiophenedicarboximide), 티에노피롤레디온(Thienopyrroledione) 및 퀴녹살린(quinoxaline)으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상 또는 이의 유도체를 포함할 수 있다.
- [0107] 하나의 예로서, 본 발명에 따른 유기태양전지는 유기반도체 화합물과 더불어 전자 주개 물질 및 전자 받개 물질을 포함할 수 있다.
- [0108] 상기 전자 주개(donor) 물질은 PTB7(Poly[[4,8-bis[(2-ethylhexyl)oxy]benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl][3-fluoro-2-[(2-ethylhexyl)carbonyl]thieno[3,4-b]thiophenediyl]]), PCE10(Poly[4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl-alt-(4-(2-ethylhexyl)-3-fluorothieno[3,4-b]thiophene)-2-carboxylate-2-6-diyl]), P3HT(Poly-3-hexylthiophene) 또는 PCE12(Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene)-alt-(5,5-(1',3'-di-2-thienyl-5',7'-bis(2-ethylhexyl)benzo[1',2'-c:4',5'-c']dithiophene-4,8-dione))]을 포함할 수 있다. 구체적으로, 전자 주개 물질은 PTB7(Poly[[4,8-bis[(2-ethylhexyl)oxy]benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl][3-fluoro-2-[(2-ethylhexyl)carbonyl]thieno[3,4-b]thiophenediyl]] 또는 PCE10(Poly[4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl-alt-(4-(2-ethylhexyl)-3-fluorothieno[3,4-b]thiophene)-2-carboxylate-2-6-diyl]))를 포함할 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 전자 주개 물질은 PTB7(Poly[[4,8-bis[(2-ethylhexyl)oxy]benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl][3-fluoro-2-[(2-ethylhexyl)carbonyl]thieno[3,4-b]thiophenediyl]])일 수 있다.
- [0109] 또한, 상기 전자 받개 물질은 PCBM60(Phenyl-C60-butyric acid methyl ester), PCBM70(Phenyl-C70-butyric acid methyl ester), ITIC(3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(4-hexylphenyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene)), ITIC-Th(3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(5-hexylthienyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene), 또는 ITIC-4F(3,9-bis(2-methylene-((3-(1,1-dicyanomethylene)-6,7-difluoro)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(4-hexylphenyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene)을 포함할 수 있다. 구체적으로, 전자 받개 물질은 ITIC(3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(4-hexylphenyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene) 또는 ITIC-Th(3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(5-hexylthienyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene)일 수 있다. 보다 구체적으로, 전자 받개 물질은 ITIC(3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(4-hexylphenyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene)일 수 있다.
- [0110] 상기와 같이 전자 받개 화합물로 비풀러렌 화합물 또는 풀러렌 화합물을 포함하는 경우 이를 포함하는 광전변환 소자의 전자 이동이 원활하거나 전자 주개 화합물과의 최적의 혼합물을 만들 수 있는 이점이 있을 수 있다. 본 발명에 따른 광전변환소자는 유기태양전지, 염료감응형 태양전지, 페로브스카이트 태양전지, 유기전계효과 트랜지스터 또는 유기발광 다이오드일 수 있다.
- [0111] 하나의 예로서, 본 발명에 따른 유기태양전지는 상기 서술한 유기반도체 화합물을 포함하는 광활성층을 포함할 수 있다. 구체적으로, 본 발명에 따른 유기태양전지는 기재; 제1 버퍼층; 상기 서술한 고분자를 포함하는 광활

성층; 제2 버퍼층 및 전극을 포함할 수 있다.

[0112] 구체적으로, 상기 기재는 알루미늄(Al), 인듐 주석 산화물(indium tin oxide, ITO), 금 (Au), 은 (Ag), 플로린 이 도핑된 주석 산화물 (fluorine doped tin oxide; FTO), 알루미늄이 도핑된 아연 산화물 (aluminium doped zink oxide, AZO), 인듐 아연 산화물 (indium zink oxide, IZO), 인듐 아연 주석 산화물 (indium zink tin oxide, IZTO) ZnO-Ga₂O₃, ZnO-Al₂O₃ 및 안티모니 주석 산화물 (antimony tin oxide, ATO)으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다. 보다 구체적으로 상기 기재는 알루미늄(Al), 인듐 주석 산화물 (indium tin oxide, ITO), 인듐 아연 산화물 (indium zink oxide, IZO) 또는 인듐 아연 주석 산화물 (indium zink tin oxide, IZTO)일 수 있다.

[0113] 또한, 상기 제1 버퍼층 및 제2 버퍼층은 각각 독립적으로 아연 산화물, 티타늄 산화물, 몰리브덴 산화물, 니켈 산화물 및 텅스텐 산화물로 이루어진 군으로부터 선택된 1종 이상을 포함할 수 있다. 구체적으로, 제1 버퍼층 및 제2 버퍼층은 각각 독립적으로 아연산화물, 티타늄 산화물 또는 몰리브덴 산화물을 포함할 수 있다. 보다 구체적으로, 제1 버퍼층 및 제2 버퍼층을 각각 독립적으로 아연산화물 또는 몰리브덴 산화물일 수 있다.

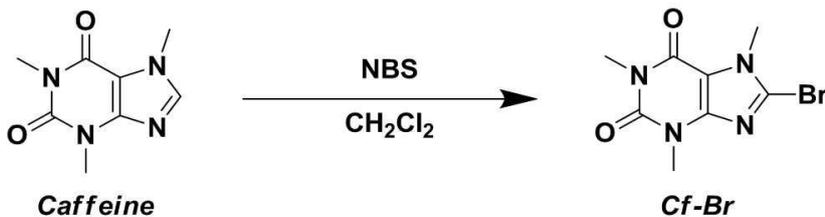
[0114] 아울러, 상기 전극은 알루미늄(Al), 인듐 주석 산화물(indium tin oxide, ITO), 금 (Au) 및 은 (Ag)으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상일 수 있다. 구체적으로 상기 전극은 알루미늄, 금 또는 은일 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 전극은 알루미늄일 수 있다.

[0115] 하나의 예로서, 본 발명에 따른 유기태양전지는 상기와 같은 구성을 가짐으로써 우수한 에너지 변환효율을 나타낼 수 있다. 구체적으로, 본 발명에 따른 유기태양전지는 에너지 변환효율이 8.5% 이상일 수 있다. 보다 구체적으로, 본 발명의 유기태양전지는 에너지 변환효율이 8.6% 이상 또는 8.7% 이상일 수 있다.

[0116] 또한, 본 발명은 상기 서술한 유기반도체 화합물을 포함하는 페로브스카이트 태양전지를 제공할 수 있다. 구체적으로, 본 발명의 페로브스카이트 태양전지는 상기 서술한 유기반도체 화합물을 포함하는 정공수송층을 포함할 수 있다. 상기와 같이 유기반도체 화합물은 정공수송층에서 전자의 이동을 원활하게 하는 역할을 한다.

[0118] 이하, 상기 서술한 내용을 바탕으로, 실시예와 도면을 참조하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것으로, 본 발명의 권리범위를 한정하려는 것은 아니다.

[0120] 제조예 1: 8-브로모-1,3,7-트리메틸-1H-퓨린-2,6(3H,7H)-디온의 합성 (Cf-Br)



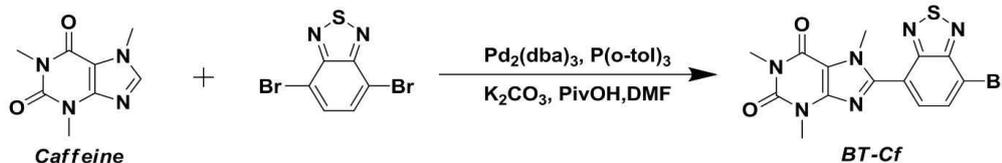
[0121]

[0122] 250 ml 2구 둥근 바닥 플라스크에 카페인(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione, 5.0 g, 25.75 mmol)과 NBS(N-Bromosuccinimide, 9.2 g, 51.49 mmol)를 넣고 깨끗하게 정제된 디클로로메탄 77 ml를 넣고 온전히 녹인다. 증류수 26 ml를 첨가한 후 봉쇄하여 5일 동안 교반한다. 아황산수소나트륨 포화수용액으로 ?칭 하고 차가운 수산화나트륨 30 ml를 투입하여 40 분간 교반한다. 디클로로메탄으로 추출한 뒤 황산나트륨을 이용하여 탈수 및 필터링을 하고 용매를 제거한다. 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hexane = 1:1)로 흰색 고체인 Cf-Br (8-bromo-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione) 3.2 g (11.72 mmol, 45.5%)를 얻었다.

[0123] 상기 Cf-Br 화합물의 ¹H NMR 결과 데이터는 다음과 같고, 도 2a에 나타내었다.

[0124] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 3.406 (s, 3H), 3.563 (s, 3H), 3.969 (s, 3H). GC-MS (m/z) : 272.07

[0125] 제조예 2. 8-(7-브로모벤조[c][1.2.5]싸이아디아졸-4-일)-1,3,7-트리메틸-1H-퓨린-2,6(3H,7H)-디온의 합성 (BT-Cf)



[0126]

[0127]

50 ml 쉬링크 플라스크에 카페인(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione, 680 mg, 3.4 mmol)과 4,7-디브로모벤조[c][1,2,5]싸이아디아졸(1 g, 3.4 mmol, 1 eq)과 피발릭산(Pivalic acid, 102 mg, 1.02 mmol)과 탄산칼륨(1.64 g, 11.9 mmol)과 트리스(디벤질리렌아세톤)디팔라듐(0) (153 mg, 170 μmol)과 트리(o-톨리)포스핀(153 mg, 510 μmol)을 질소분위기에서 넣는다. DMF 17 ml를 넣은 후 100°C에서 24시간 동안 가열한다. 상온으로 식힌 후 클로로포름으로 희석하여 필터링한다. 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hexane = 7:3)로 노란색 고체인 BT-Cf(8-(7-bromobenzo[c][1,2,5]thiadiazol-4-yl)-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione) 0.6 g (1.48 mmol, 44%)을 얻었다.

[0128]

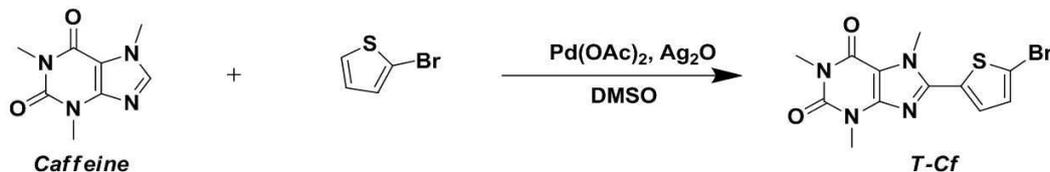
상기 BT-Br 화합물의 ^1H NMR 결과 데이터는 다음과 같고, 도 2b에 나타내었다.

[0129]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 3.469 (s, 3H), 3.644 (s, 3H), 3.961 (s, 3H), 7.819-7.831 (d, 1H), 8.021-8.041 (d, 1H). GC-MS (m/z) : 407.25

[0130]

제조예 3. 8-(5-브로모싸이오펜-2-닐)-1,3,7-트리메틸-1H-퓨린-2,6(3H,7H)-디온의 합성 (T-Cf)



[0131]

[0132]

25 ml 2구 둥근바닥플라스크에 2-브로모싸이오펜(163.04 mg, 1 mmol)과 카페인(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione, 776.76 mg, 4 mmol, 4 eq)과 초산팔라듐(11 mg, 50 μmol)과 산화은(495 mg, 4 mmol)을 5 ml DMSO에 질소분위기에서 녹인 후 80°C에서 10시간 가열한다. 디클로로메탄에 녹여 컬럼 크로마토그래피 (EA:CF = 1:1)으로 노란색 고체인 T-Cf (8-(5-bromothiophen-2-yl)-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione) 0.2 g (0.56 mmol, 60%)을 얻었다.

[0133]

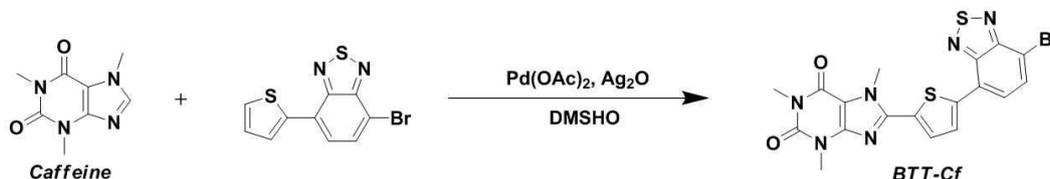
상기 T-Cf 화합물의 ^1H NMR 결과 데이터는 다음과 같고, 도 2c에 나타내었다.

[0134]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 3.434 (s, 3H), 3.603 (s, 3H), 4.176 (s, 3H), 7.146-7.155 (d, 1H), 7.304-7.315 (d, 1H). GC-MS (m/z) : 355.32

[0135]

제조예 4. 8-(5-(7-브로모벤조[c][1,2,5]싸이아디아졸-4-일)-1,3,7-트리메틸-1H-퓨린-2,6(3H,7H)-디온의 합성 (BTT-Cf)



[0136]

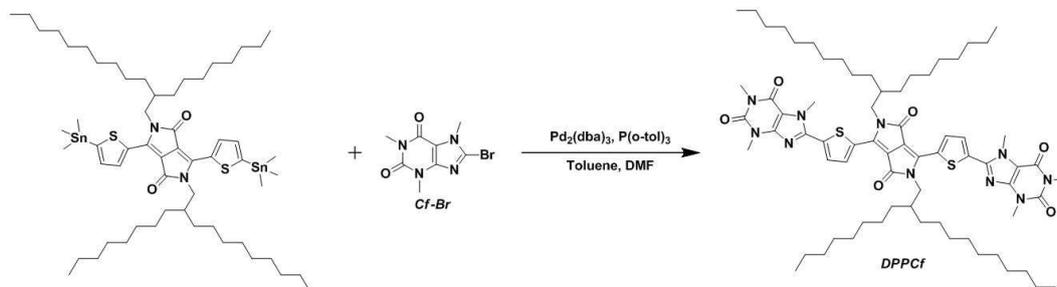
[0137]

25 ml 2구 둥근바닥플라스크에 4-브로모-7-(2-싸이오페닐)벤조[c][1,2,5]싸이아디아졸(0.162 g, 0.545 mmol)과 카페인(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione, 680 mg, 3.4 mmol)과 초산팔라듐(6 mg, 27 μmol)과 산화은(270 mg, 2.18 mmol)을 3 ml DMSO에 질소분위기에서 녹인 후 80°C에서 12시간 가열한다. 클로로포름에 녹여 플래시 컬럼 크로마토그래피 (EA:CF = 7:3)으로 오렌지 빛의 빨간색 고체인 BTT-Cf(8-(5-(7-bromobenzo[c][1,2,5]thiadiazol-4-yl)thiophen-2-yl)-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione) 0.24 g(0.49 mmol, 90%)을 얻었다.

[0138] 상기 BTT-Cf 화합물의 ¹H NMR 결과 데이터는 다음과 같고, 도 2d에 나타내었다.

[0139] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 3.438 (s, 3H), 3.648 (s, 3H), 4.280 (s, 3H), 7.663 (d, 1H), 7.830 (d, 1H), 7.900 (d, 1H), 8.150 (d, 1H).

[0141] 실시예 1 : DPPCf의 합성 (DPPCf)



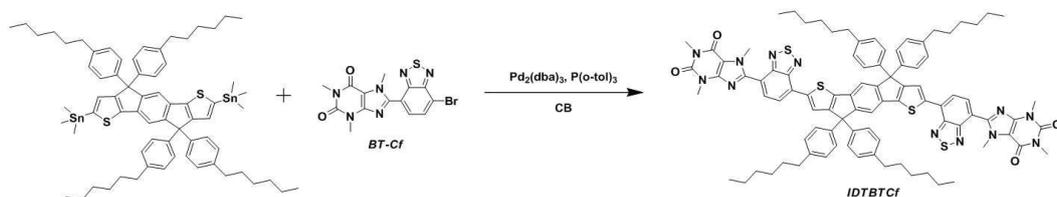
[0142]

[0143] 25 ml 마이크로웨이브 바이알에 2,5-비스(2-옥틸도데실)-3,6-비스(5-트리메틸스태닐)티오펜-2-일)피롤[3,4-c]피롤-1,4(2H,5H)-디온(162.2 mg, 0.136 mmol)과 Cf-Br (8-bromo-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione, 80 mg, 0.293 mmol, 2.15 eq)과 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐(0) (1.31 mg, 0.02 eq)과 트리(o-톨리)포스핀(3.4 mg, 0.01 mmol, 0.07 eq)을 넣고 톨루엔 2 ml와 DMF 0.2 ml에 모두 녹인 후 10분 동안 진공상태를 유지하고 질소 치환한다. 마이크로웨이브 반응장치에서 100℃에서 5분, 140℃에서 5분, 160℃에서 5분, 180℃에서 45분 동안 반응시킨 후 상온으로 식혀 클로로포름으로 추출 및 필터한다. 플래시 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hexane = 3:7)로 분홍빛 보라색 고체인 DPPCf(8,8'-(5,5'-(2,5-bis(2-octyldodecyl)-3,6-dioxo-2,3,5,6-tetrahydropyrrolo[3,4-c]pyrrole-1,4-diyl)bis(thiophene-5,2-diyl))bis(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione)) 80 mg (0.064 mmol, 48%)을 얻었다.

[0144] 상기 실시예 1에서 제조한 유기반도체 화합물(DPPCf)의 ¹H NMR 결과 데이터는 다음과 같고, 도 2e에 나타내었다.

[0145] ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 1.201-1.424 (m, 41H), 3.447 (s, 3H), 3.633 (s, 3H), 4.288 (s, 3H), 7.696-7.707 (d, 1H), 9.033-9.043 (d, 1H).

[0147] 실시예 2: IDTBTCf의 합성



[0148]

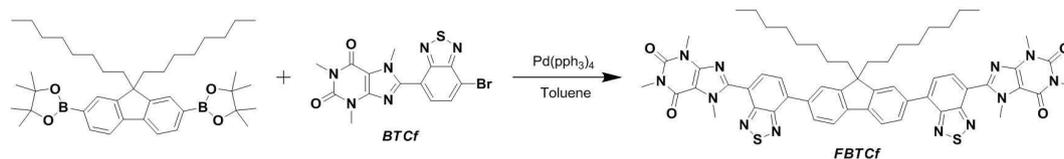
[0149] 25 ml 마이크로웨이브 바이알에 2,7-비스(5-트리메틸스태닐)-4,9-디히드로-4,4,9,9-테트라키스(5-헥실벤젠)-s-5,10-디히드로-인다세노[1,2-b:5,6-b']디티오펜(186 mg, 0.15 mmol) 과 BT-Cf (8-(7-bromobenzo[c][1,2,5]thiadiazol-4-yl)-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione, 146.6 mg, 0.36 mmol, 2.4 eq)과 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐(0) (2.65 mg, 0.02 eq)과 트리(o-톨리)포스핀(3.76 mg, 0.08 eq)을 넣고 클로로벤젠 2.5 ml에 모두 녹인 후 10분 동안 진공상태를 유지하고 질소 치환한다. 마이크로웨이브 반응장치에서 100℃에서 5분, 140℃에서 5분, 160℃에서 30분 동안 반응시킨 후 상온으로 식혀 클로로포름으로 추출 및 필터 한다. 플래시 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hexane = 4:6)로 정제 후 에탄올로 재결정하여 분홍빛 붉은색 고체인 IDT-BTCf(Indacenodithiophene-benzothiadiazolecaffeine) 161 mg (0.103 mmol, 68%)을 얻었다.

[0150] 상기 실시예 2에서 제조한 유기반도체 화합물(IDT-BTCf)의 ¹H NMR 결과 데이터는 다음과 같고, 도 2f에 나타내

었다.

[0151] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 0.850-0.883 (m, 8H), 1.260-1.360 (m, 14H), 2.562-2.601 (m, 4H), 3.472 (s, 3H), 3.658 (s, 3H), 3.962 (s, 3H), 7.110-7.131 (d, 1H), 7.261-7.279 (d, 1H), 7.915-7.934 (d, 1H), 7.967-7.986 (d, 1H), 8.168 (s, 1H).

[0153] 실시예 3. FBTCf의 합성 (8,8'-(7,7'-(9,9-dioctyl-9H-fluorene-2,7-diyl)bis(benzo[c][1,2,5]thiadiazole-7,4-diyl))bis(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione)



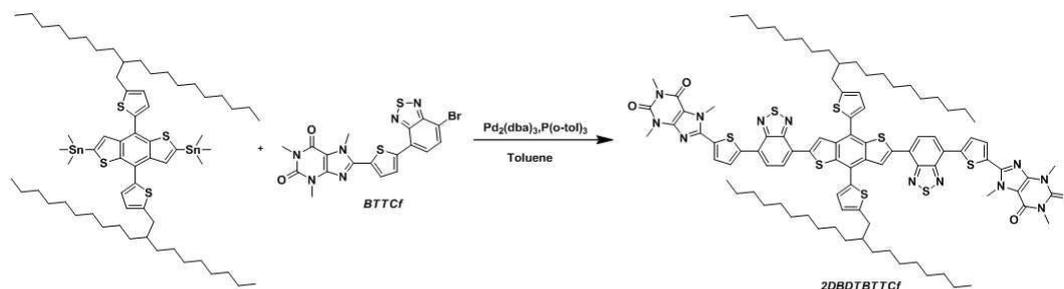
[0154]

[0155] 100 ml 2구 둥근바닥플라스크에 2,2'-(9,9-디옥틸-9H-플루오렌-2,7-다이일)비스(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-옥사보로레인)(77.11 mg, 0.12 mmol)과 8-(7-브로모벤조[c][1,2,5]사이아디아졸-4-일)-1,3,7-트리메틸-1H-퓨린-2,6(3H,7H)-디온(146.6mg, 0.36mmol, 3eq)과 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)(6.73 mg)를 3 ml 톨루엔에 모두 녹인 후 2 몰농도의 탄산칼륨 수용액 1,2 ml을 넣고 알리콧즈335(aliquat 336) 2 방울을 떨어트리고 질소 분위기를 만든다. 100°C에서 24시간 동안 교반한다. 상온으로 식힌 후 클로로포름으로 추출 및 필터한다. 아세트산에틸을 이용하여 플래시 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 형광 주홍색 고체인 FBTCf(8,8'-(7,7'-(9,9-dioctyl-9H-fluorene-2,7-diyl)bis(benzo[c][1,2,5]thiadiazole-7,4-diyl))bis(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione)를 50 mg(0.048 mmol, 40%)를 얻었다.

[0156] 상기 실시예 3에서 제조한 유기반도체 화합물(FBTCf)의 ^1H NMR 결과 데이터는 다음과 같고, 도 2g에 나타내었다.

[0157] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 0.765-0.799 (m, 3H), 0.899 (m, 2H), 1.130-1.190 (m, 10H), 3.495 (s, 3H), 3.687 (s, 3H), 4.034 (s, 3H), 7.967-8.084 (m, 5H).

[0159] 실시예 4. 2DBDTBTCf의 합성 (4,8-Bis(5-(2-octyldodecyl)thiophen-2-yl)benzo[1,2:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl)bis(benzo[c][1,2,5]thiadiazole-4-yl)thiophene-2-yl)-7,4-diyl))bis(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione)



[0160]

[0161] 25 ml 2구 둥근바닥플라스크에 (2,6-비스(트리메틸)-4,8-비스(2-옥틸도데실페닐)벤조[[1,2-b:4,5-b'] 디사이오렌(2DBDT, 46 mg, 0.037 mmol)와 8-(5-(7-브로모벤조[c][1,2,5]사이아디아졸-4-일)사이오페-2-닐)-1,3,7-트리메틸-1H-퓨린-2,6(3H,7H)-디온(BTT-Cf, 40 mg, 0.08 mmol, 2.2 eq)을 넣고 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(0.647 mg)과 트리(o-톨리)포스핀(0.902 mg)을 넣은 후 톨루엔(toluene) 3 ml를 투입하고 진공상태를 10 분간 유지한 후 질소분위기로 치환한다. 130°C에서 약 40시간 교반한다. 상온으로 식힌 후 클로로포름으로 녹여 컬럼 크로마토그래피 (EA:Hxn = 3:7)로 정제하여 빨간색 고체인 2DBDT-BTTCf(4,8-Bis(5-(2-octyldodecyl)thiophen-2-yl)benzo[1,2:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl)bis(benzo[c][1,2,5]thiadiazole-4-yl)thiophene-2-yl)-7,4-diyl))bis(1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione) 50 mg (0.03 mmol, 77%)를

얻었다. ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3)은 도 2h에 나타내었다.

[0162] ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3): δ 0.85-1.587 (m, 4H), 2.889-2.945 (m, 4H), 3.404 (s, 3H), 3.620 (s, 3H), 4.234 (s, 3H), 6.934-6.980 (d, 1H), 7.370-7.378 (m, 1H), 7.607-7.871 (m, 1), 7.8719 (s, 1H), 8.098-8.109 (d, 1H), 8.921 (s, 1H).

[0163] **실시예 5: 유기태양전지 제조**

[0164] 투명 유리기판 상에 ITO(Indium tin oxide; 10 Ω /sq의 시트 저항, 두께 1,500 Å)층이 형성된 기판 표면을 아세톤(acetone), 알코녹스(Alconox), 이소프로판올(isopropanol) 하에서 연속적으로 초음파 세정 후 건조시키고 UV-오존 세정기에서 15분 동안 처리하였다.

[0165] 다음에, ITO막으로 이루어지는 음극층 위에, 전자 수송 층으로서, 징크옥사이드(ZnO)를 스핀 코팅(spin-coating)에 의해 10~20 nm의 막 두께로 형성했다. 이 기판을 150°C에서 1시간 소성시킨 후, 노점 -76 °C 이하, 산소 1 ppm 이하의 드라이(dry) 질소 분위기의 글러브 박스(glove-box)로 이송하였다.

[0166] 광활성층 재료로는 도너물질로서 상업적으로 입수된 광활성층용 고분자인 PTB7과 억셉터물질로서 폴리렌(PCBM70)을 선택하였으며 실시예 6에 따른 유기화합물 'IDTBTCf' 소량을 1,8-디아이드옥탄(1,8-diiodooctane; DIO)를 포함한 클로로벤젠(chlorobenzene; CB)에 여러 가지 농도로 용해시켜 미리 글러브 박스에 이송한 후 40°C에서 24시간 교반하였다. 모든 시료는 스핀 코팅 10분 전 글러브 박스 안에서 0.5 μm PTFE 실린지 필터(Syringe filter)를 이용하여 여과하였다.

[0167] 모든 준비가 끝난 후, 앞서 준비된 ITO 및 징크옥사이드(ZnO)층 상에 스핀 코팅을 통하여 100 nm의 막 두께를 가지는 광활성층을 형성하였다. 이후, 40°C에서 10분 동안 열처리하여 잔류 용매를 제거하고 열 증착기(thermalevaporator)의 고진공 챔버(1×10^{-6} torr 이하)로 이송하였으며 광활성층 위에 정공 수송 층으로서 몰리브덴옥사이드(MoO_3) 5 nm, 양극 층(전극층)으로서 알루미늄(Al) 100 nm를 형성시켰다.

[0168] **비교예 1**

[0169] 광활성층에 'IDTBTCf'를 첨가하지 않은 것을 제외하고 실시예 5와 동일한 방법으로 유기태양전지를 제조하였다.

[0171] **실험예 1**

[0172] 본 발명에 따른 유기반도체 화합물의 성분을 확인하기 위하여 NMR(Bruker ARX 400 spectrometer) 분석을 수행하였으며, 그 결과는 도 2에 나타내었다.

[0173] 도 2a 내지 2d를 살펴보면, 제조예 1 내지 4에서 제조한 화합물은 공통적으로 3.5~4.5 ppm에서 카페인 피크가 나타나는 것을 통해 카페인이 포함된 화합물인 것을 알 수 있다.

[0174] 또한, 도 2e 내지 2h를 살펴보면, ^1H NMR 실험 결과를 통해 실시예 1 내지 4에서 제조한 유기반도체 화합물 모두에서 3.5 ppm 내지 4.5 ppm의 범위에서의 카페인 수소 피크를 확인할 수 있다. 유기 반도체 화합물의 화학 구조를 알 수 있다. 구체적으로, 도 2e를 살펴보면, ^1H NMR 실험 결과를 통해, 디케토피롤로피롤 코어 양단에 인접해있는 사이오펜의 수소가 9.0 ppm 과 7.7 ppm에 각각 나타났고, 디케토피롤로피롤 코어의 N에 붙어있는 첫 번째 탄소인 알파 탄소의 수소들이 4.2 ppm 부근에서 나타났고, 베타 탄소이자 3차 탄소의 수소가 1.9 ppm 부근에서 나타났다. 나머지 aliphatic chains의 수소는 3차 탄소를 기점으로 1.3 ppm 내지 1.2 ppm의 범위에서 차례대로 나타났다. 마지막으로 aliphatic chains의 마지막 수소가 0.9 ppm 내지 0.8 ppm에서 나타났다. 도 2f를 살펴보면, ^1H NMR 실험 결과를 통해, 인다세노디사이오펜 코어의 양단에 인접해있는 벤조사이아디아졸의 수소가 8.0 ppm 부근에서 나타났고, 인다세노디사이오펜의 사이오펜의 수소가 9.1 ppm 부근에서 나타났고, 인다세노디사이오펜의 벤젠의 수소가 7.5 ppm 부근에서 나타났고, 인다세노디사이오펜 코어의 aliphatic chain이 치환된 벤젠의 수소가 7.2 ppm 내지 7.1 ppm에서 나타났고, aliphatic chain의 알파 탄소의 수소가 2.4 ppm에서 나타났고, 나머지 aliphatic chains의 수소가 1.3 ppm 내지 1.2 ppm 부근에서 나타났다. 마지막으로 aliphatic chains의 마지막 수소가 0.9 ppm 내지 0.8 ppm에서 나타났다. 도 2g를 살펴보면, ^1H NMR 실험 결과를 통해, 플루오렌 코어 양단에 인접해있는 벤조사이아디아졸 수소 및 플루오렌 코어의 벤젠 수소가 8.0 ppm에서 나타났고,

플루오렌 코어의 aliphatic chains의 알파 탄소가 2.1 ppm에서, 나머지 수소들이 알파 탄소를 기점으로 차례대로 1.2 ppm 내지 0.9 ppm에서 나타났다. 마지막으로 aliphatic chains의 마지막 수소가 0.7 ppm에서 나타났다. 도 2h를 살펴보면, ¹H NMR 실험 결과를 통해, 디사이오닐벤조디사이오펜 코어의 양단에 벤조사이아디아졸의 수소가 7.8 ppm에서 나타났고, 벤조사이아디아졸에 인접해있는 사이오펜의 수소가 9.0 ppm 및 8.1 ppm에 각각 나타났고, 디사이오닐벤조디사이오펜 코어의 벤조디사이오펜의 수소가 7.6 ppm에서, 디사이오닐벤조디사이오펜의 aliphatic chain이 치환된 사이오펜의 수소가 7.0 ppm에서 나타났다. Aliphatic chains의 알파 탄소의 수소의 경우 3.0 ppm에서 나타났고, 베타 탄소의 수소가 1.6 ppm에서 나타났고, 나머지 수소가 베타 탄소를 기점으로 차례대로 1.3 ppm 내지 1.0 ppm 부근에서 나타났다. Aliphatic chains의 마지막 수소가 0.9 ppm에서 나타났다. 본 구조는 용해도 및 극성도 문제로 정제가 어려워 수소의 위치와 개수 동정에 어려운 점이 있다.

[0175] 이를 통해, 본 발명에 따른 유기반도체 화합물은 카페인을 포함하면서 분자간 수소결합에 따른 스택킹 효과를 나타낼 수 있음을 알 수 있다.

[0176] **실험예 2**

[0177] 본 발명에 따른 전도성 고분자의 광학적, 전기화학적 특성을 확인하기 위해, 상기 실시예 1 내지 실시예 3에서 제조된 유기반도체 화합물을 대상으로, UV(HP Agilent 8453 UV-Vis spectrophotometer)을 이용하여 350 nm 내지 800 nm 파범위에서 광흡수 스펙트럼을 측정하였고, 1 mV/s 의 주사 속도로 순환 전압 전류법(Cyclic voltammetry)을 이용한 전류 전위 곡선을 측정하였으며, 그 결과를 도 3, 도 4 및 표 1에 나타내었다.

표 1

		HOMO (eV)	LUMO (eV)	E _g (eV)	E _{1/2} (Ferrocene)
실시예 1 (DPPCf)	산화	-5.71	-4.04	1.67	0.45
	환원	-5.21	-3.54		
실시예 2 (IDBTCf)	산화	-5.44	-3.50	1.94	0.53
실시예 3 (FBTCf)	산화	-5.82	-3.41	2.41	0.436

[0179] 도 3을 살펴보면, 실시예 1에서 제조한 유기반도체 화합물(DPPCf)는 300nm 내지 800nm 범위의 가시광선을 전반적으로 잘 흡수하면서, 특히 300nm 내지 400 nm와 600nm 내지 750nm 파장의 광을 효율적으로 흡수하는 것을 알 수 있다. 또한, 실시예 2에서 제조한 유기반도체 화합물(IDBTCf)는 450nm 내지 600nm 파장의 광을 최대 흡수하고, 실시예 3에서 제조한 유기반도체 화합물(FBTCf)는 350nm 내지 500nm 파장의 광을 최대 흡수하는 것을 알 수 있다. 이를 통해, 본 발명에 따른 유기반도체 화합물은 카페인을 말단기로 포함함으로써, 가시광 영역의 파장을 효과적으로 흡수하고, 도너(donor) 및/또는 억셉터(acceptor) 분자의 종류에 따라 적절한 파장대역을 흡수하는 최적의 특성을 갖도록 할 수 있다. 도 4 및 표 1를 살펴보면, 실시예 1, 실시예 2 및 실시예 4에서 제조한 유기반도체 화합물의 에너지 레벨 측정된 결과이다. 이때, HOMO 또는 LUMO 에너지 준위는 시료와 같은 전해질 용액에서 같은 기준 전극을 사용하여 측정된 페로센(ferrocene)의 전위를 진공의 에너지 준위에 비하여 -4.8 eV로 정하고 HOMO(or LUMO)(eV)= -4.8-(-E_{onset}-E_{1/2}(Ferrocene))을 사용하여 계산하였다. 상기 유기반도체 화합물의 HOMO 에너지 준위 및 LUMO 에너지 준위를 비교하기 위해 측정된 데이터이다. 본 발명의 유기반도체 화합물의 HOMO 에너지 준위는 -5.4 eV 내지 -5.85 eV이므로 비교적 낮은 HOMO 에너지 준위를 나타내어 전하이동이 수월한 것을 알 수 있다.

[0180] **실험예 3**

[0181] 본 발명에 따른 유기태양전지의 에너지 효율을 평가하기 위해 실시예 5 및 비교예 1에서 제조한 유기태양전지를 대상으로 키슬리 2400 소스미터와 태양광 모의실험장치(Oriel 150W solar simulator)를 사용해 각각의 소자를 표준조건(Air Mass 1.5 Global, 100 mW/cm², 25℃)에서 단락전류밀도(short circuit current density, J_{sc}), 개방전압(open circuit voltage, V_{oc}), 필 팩터(fill factor, FF), 및 에너지 전환 효율(power conversion efficiency, PCE)을 측정하였다. 이때 상기 인공태양은 Si 태양전지셀(Fraunhofer Institute for Solar Energy System, Mono-Si + KG filter, Certificate No. C-ISE269)으로 검정하였으며, 유기태양전지의 활성 영역은 4-12 mm²로 제어하였다. 측정된 결과는 하기 표 2 및 도 5에 나타내었다.

[0182] 이때, 실시예 5는 실시예 6에서 제조한 IDBTCf의 함량을 각각 PTB7:PCBM70:IDBTCf=1:1.5:0.025 및

PTB7:PCBM70:IDTBTCf=1:1.5:0.015으로 조절한 2개의 유기태양전지로 실험을 진행하였다.

[0183] 또한, 본 발명에 따른 유기태양전지의 안정성을 평가하기 위해, 실시예 5 및 비교예 1에서 제조한 유기태양전지를 대상으로 질소 분위기인 글러브 박스에서 168시간 동안 보관하며 유기태양전지의 효율변화를 측정하였고, 그 측정된 결과는 하기 표 3 및 도 6에 나타내었다. 단, 상기 유기태양전지는 별도의 봉지공정은 거치지 않았다.

표 2

[0184]

구분	단락전류밀도 J _{sc} (mA/cm ²)	개방전압 V _{oc} (V)	필팩터 FF (%)	에너지 변환효율 PCE (%)
비교예 1	16.2	0.757	68.6	8.4
실시예 5-1 (0.025)	16.3	0.757	70.6	8.7
실시예 5-2 (0.015)	16.3	0.757	69.3	8.6

표 3

[0185]

시간		0 H	24 H	72 H	96 H	168 H
비교예 1	FF (%)	68.6	68.6	65.3	63.6	61.1
	PCE (%)	8.4	8.4	8.0	7.2	7.1
실시예 5	FF (%)	70.6	68.7	67.8	65.9	70.3
	PCE (%)	8.7	8.3	8.2	7.9	8.0

[0186] 도 5는 실시예 5 및 비교예 1에서 제조한 유기태양전지의 효율을 보여주는 그래프로, 단락전류밀도(short circuit current density, J_{sc}), 개방전압(open circuit voltage, V_{oc})을 나타내었다.

[0187] 표 2에서, 필팩터(FF)는 최대 전력점에서 전압값(V_{max}) X 전류밀도(J_{max}) / (J_{sc} X V_{oc})이고, 에너지 변환효율(PCE)은 FF X (J_{sc} X V_{oc}) / Pin이며, Pin은 100[mW/cm²]이다.

[0188] 상기 표 2 및 도 5를 살펴보면, 실시예 5에서 제조한 유기태양전지는 단락전류밀도가 16.3mA/cm² 이상이고, 개방전압이 0.757 V 이상, 필팩터(fill factor)는 69% 이상으로 에너지 변환효율이 8.6% 이상으로 우수한 것을 확인할 수 있다. 반면, 비교예 1에서 제조한 유기태양전지는 단락전류밀도가 16.2mA/cm²이고, 개방전압이 0.757 V, 필팩터(fill factor)는 68.6%로 에너지 변환효율이 8.4%임을 확인할 수 있다. 본 발명에 따른 유기반도체 화합물을 포함하는 유기태양전지가 좀 더 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 이를 통해, 본 발명에 따른 유기반도체 화합물을 광활성층에 포함함으로써 광활성층과 전극의 에너지 레벨 사이에서 캐스캐이드(cascade) 구조를 형성하며 에너지 장벽을 감소시키는 전하의 이동 통로로서 역할을 하여 우수한 에너지 변환효율을 나타내는 것을 알 수 있다. 이는 실시예 5에서 제조한 유기태양전지는 실시예 2에서 제조한 유기반도체 화합물을 포함함으로써 수소결합 및 반데르발스 힘에 의한 이차결합을 통한 스택킹 효과로 충전물을 향상시켰기 때문이다.

[0189] 표 3 및 도 6을 살펴보면, 비교예 1에서 제조한 유기태양전지는 시간에 따라 필팩터(FF)가 68.6%에서 61.1%로 약 7.5% 정도 크게 감소하고, 에너지 변환효율이 8.4% 에서 7.1%로 약 1.3% 정도 감소하였으나, 실시예 5에서 제조한 유기태양전지는 168시간 이상 지남에도 불구하고 필팩터(FF)가 65.9% 이상 유지되고 에너지 변환효율도 7.9% 이상 유지되는 것을 확인할 수 있다. 이를 통해, 본 발명에 따른 유기태양전지는 카페인을 함유하는 유기반도체 화합물을 광활성층에 포함함으로써 이차결합에 따라 우수한 필팩터와 에너지 변환효율을 오래 유지하는 것을 알 수 있다.

부호의 설명

[0191] 101 : 캐소드/애노드; ITO(Indium Tin Oxide) 유리 기판

102 : 캐소드/애노드 버퍼층; ZnO

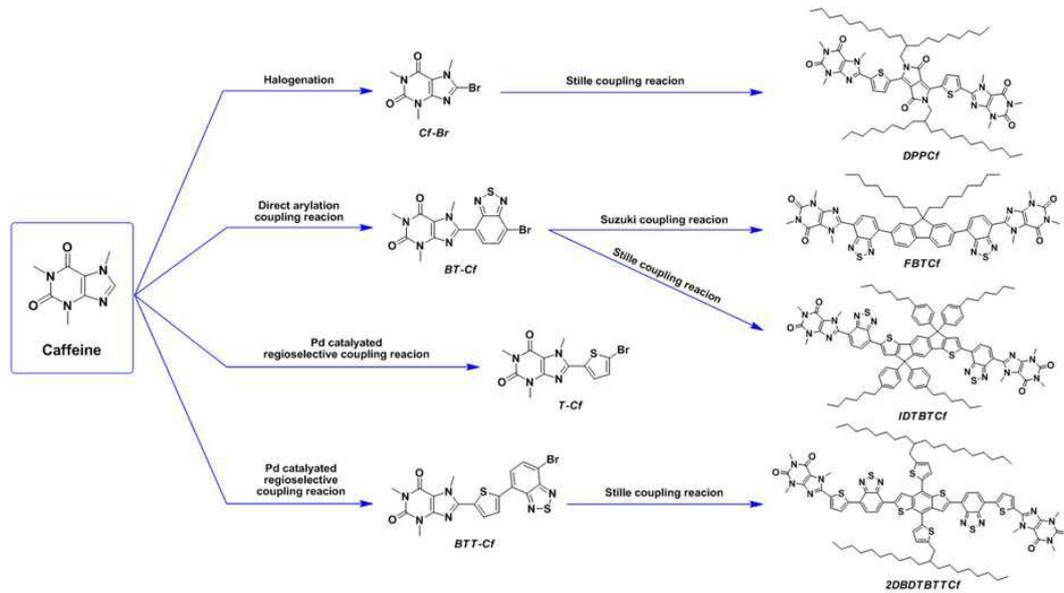
103 : 광활성층

104 : 애노드/캐소드 버퍼층; MoO3

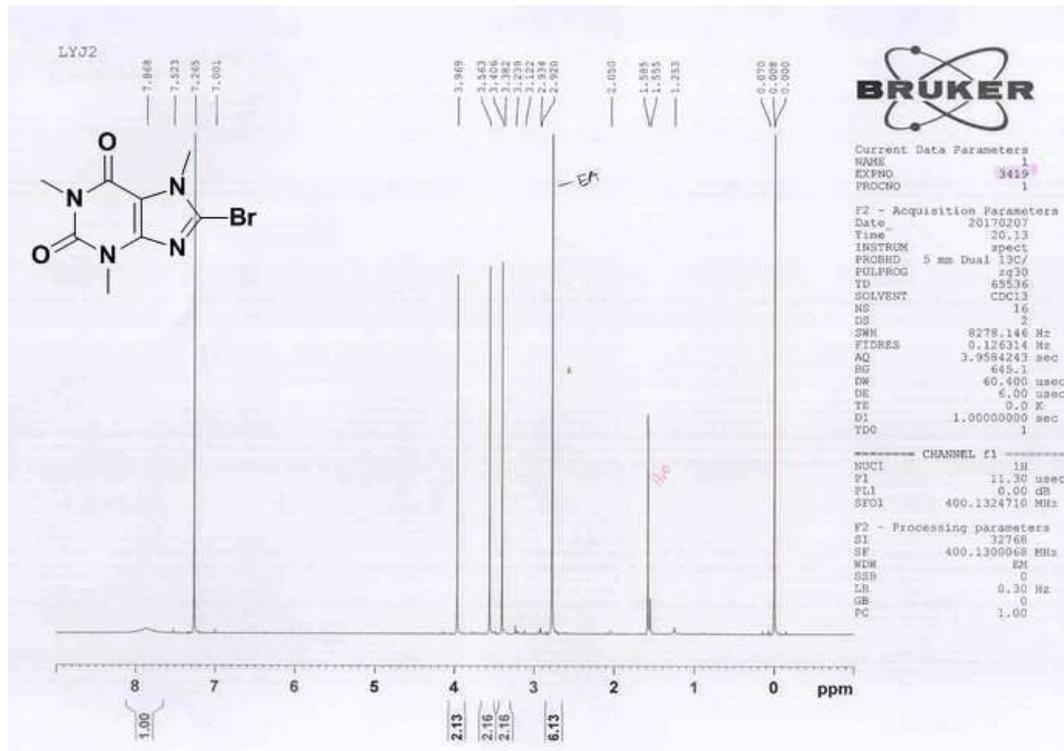
105 : 애노드/캐소드; Ag

도면

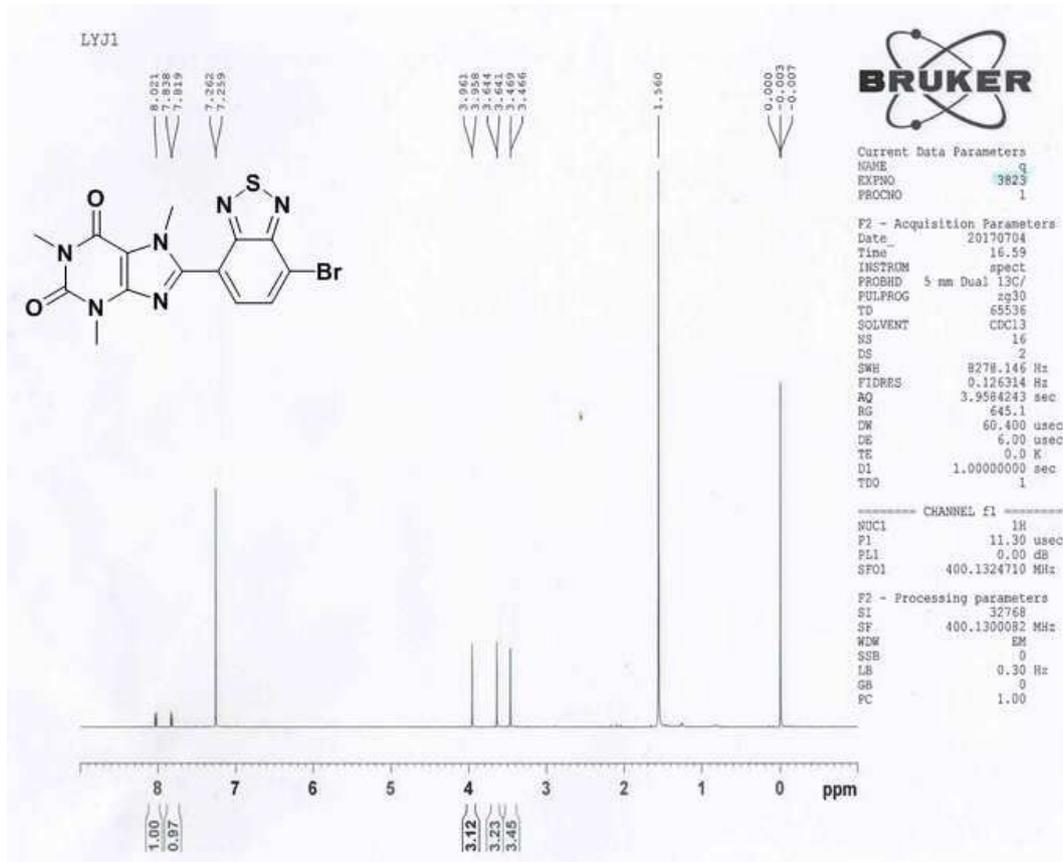
도면1



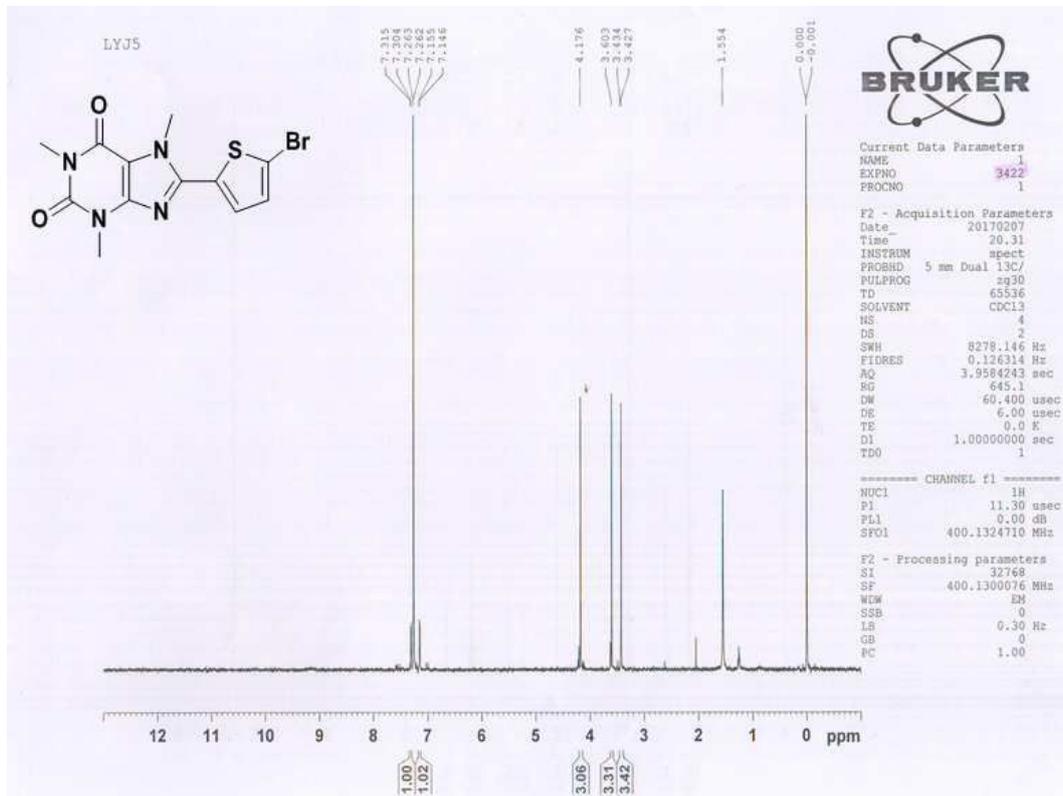
도면2a



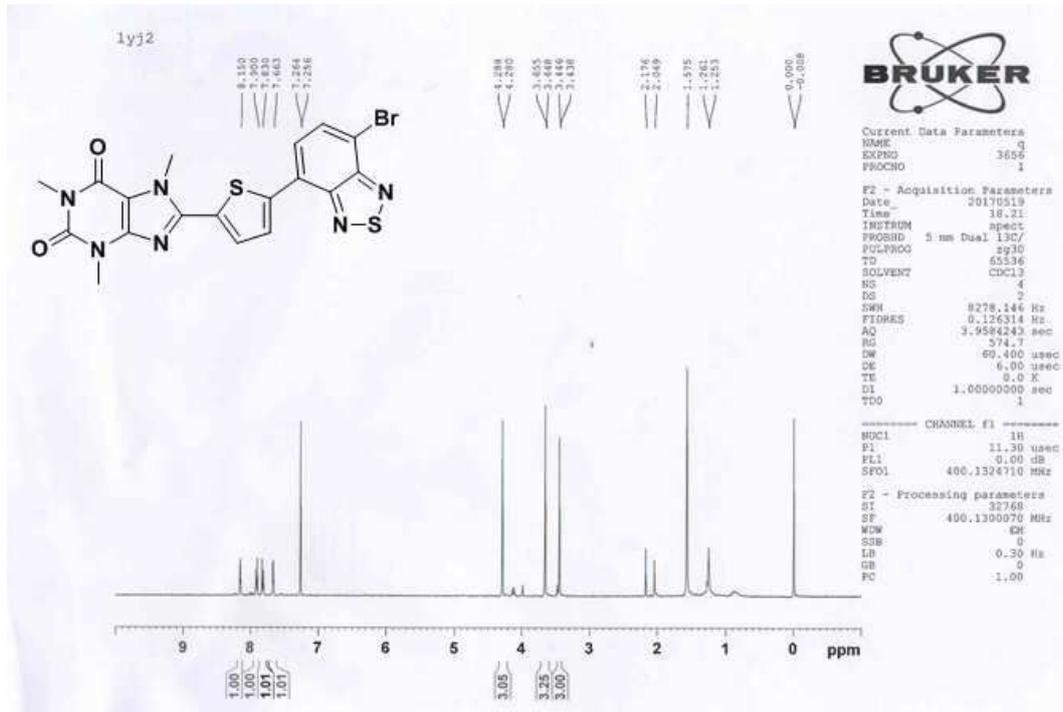
도면2b



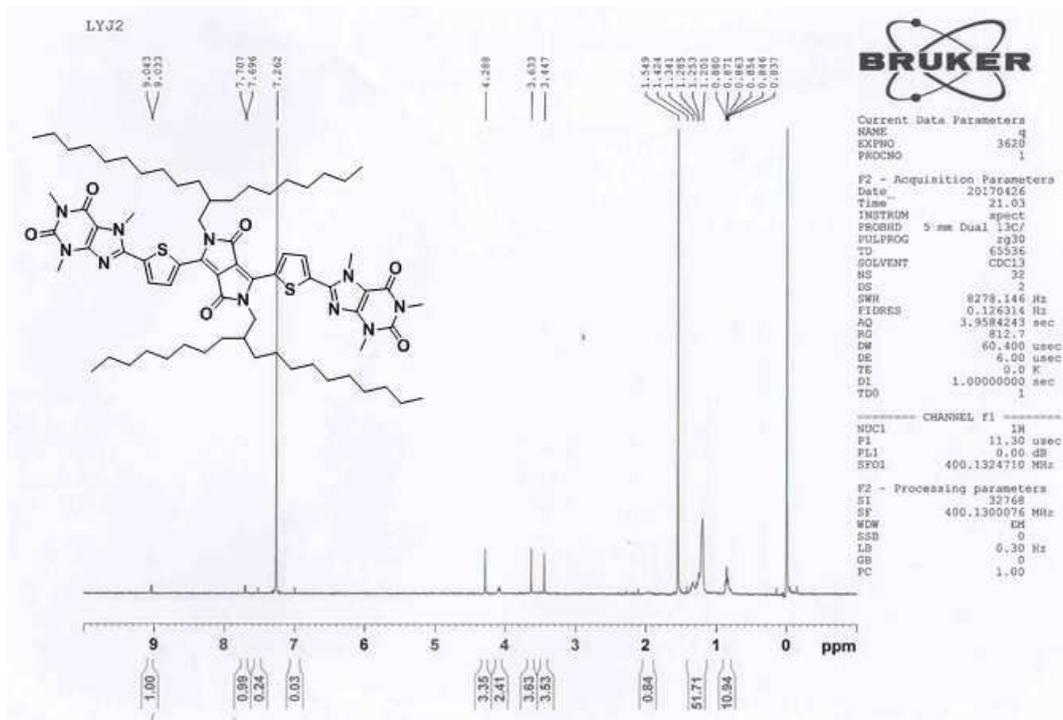
도면2c



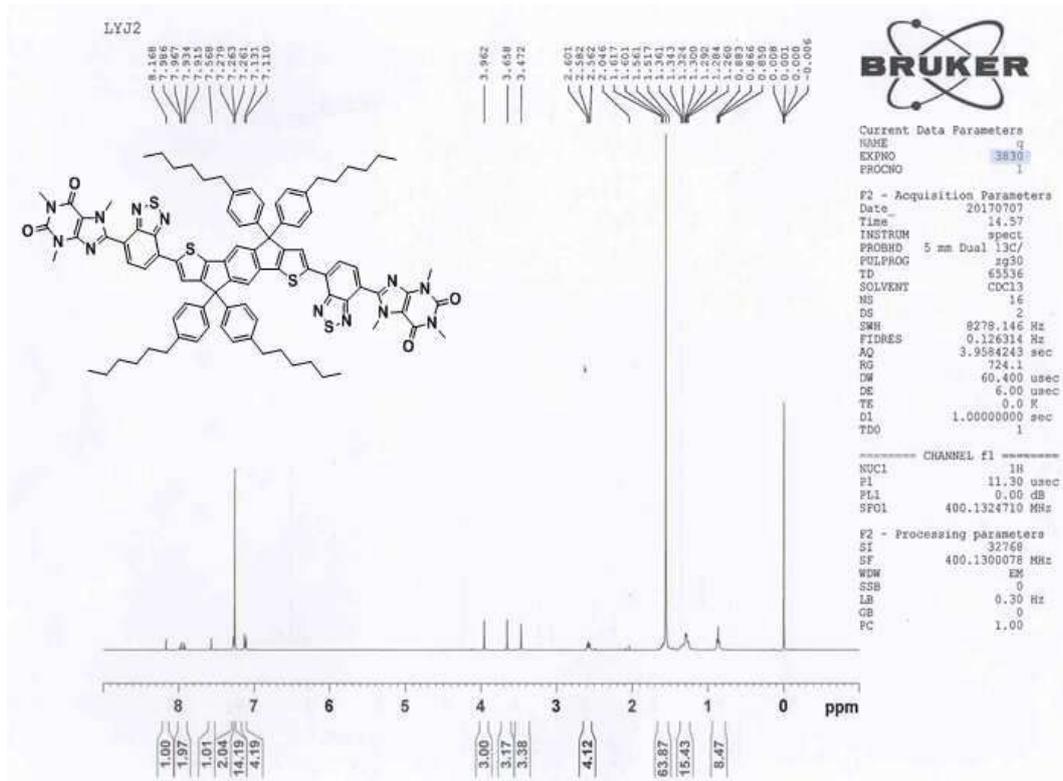
도면2d



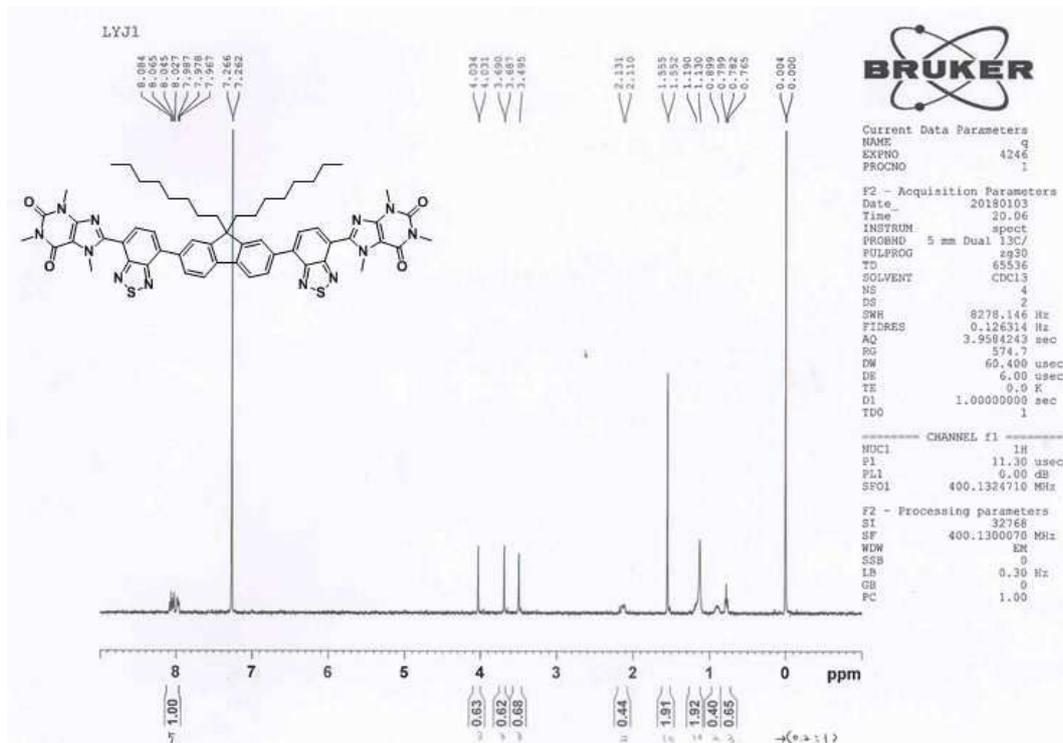
도면2e



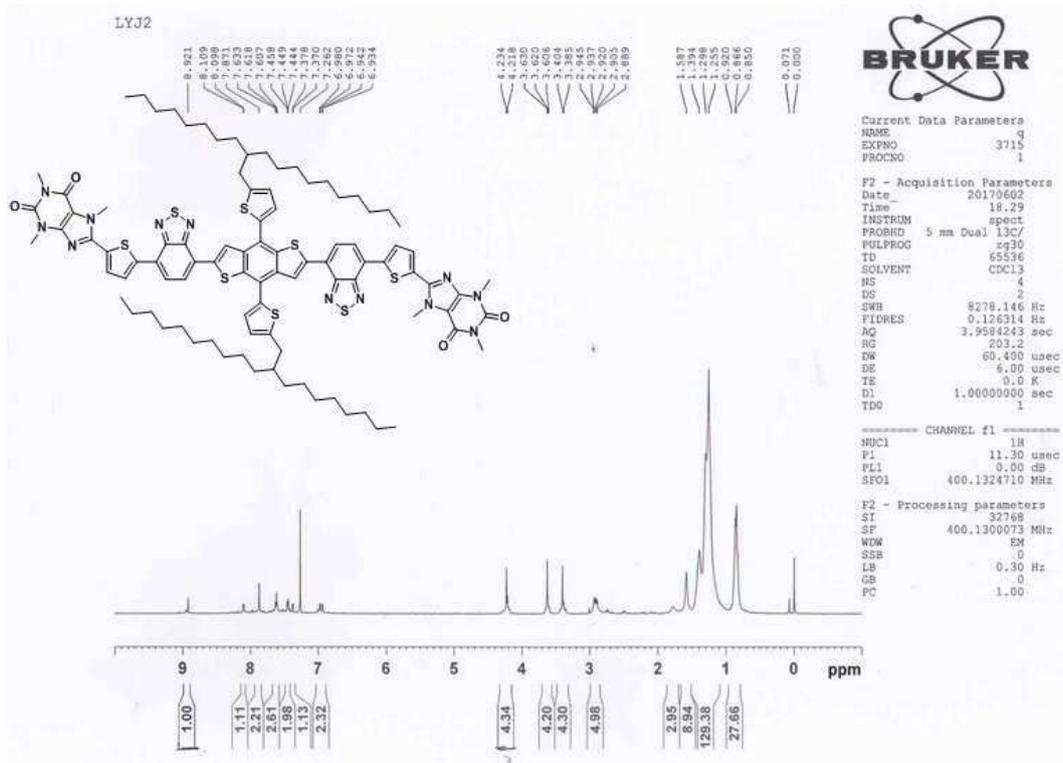
도면2f



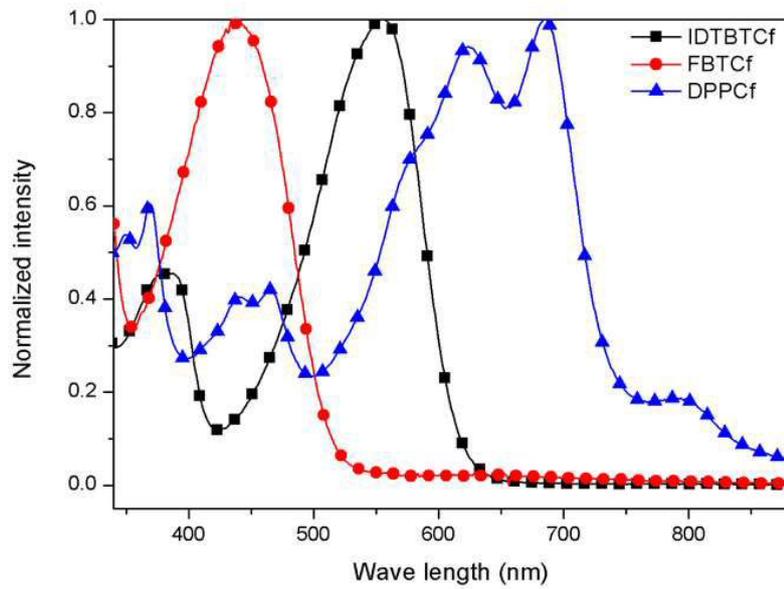
도면2g



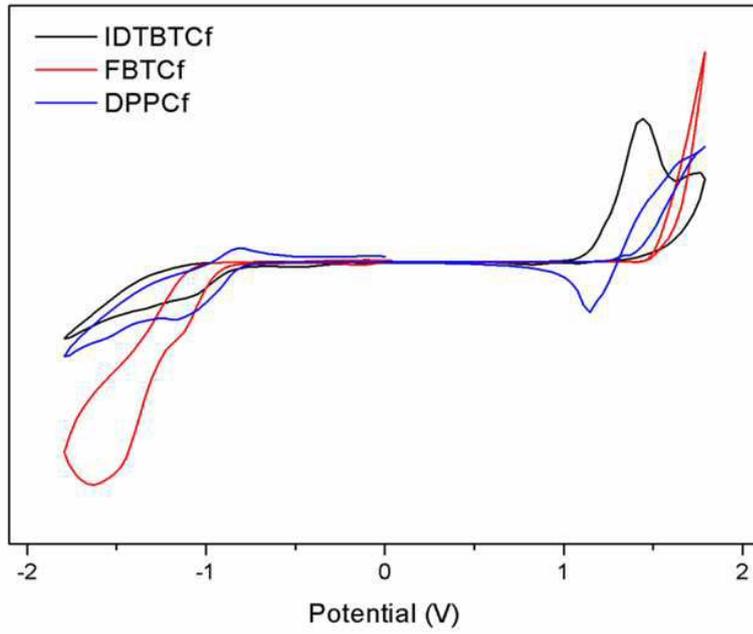
도면2h



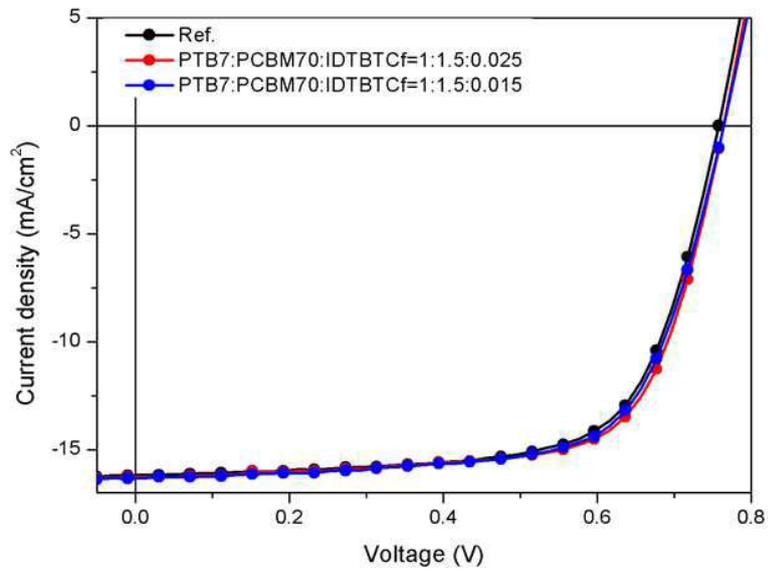
도면3



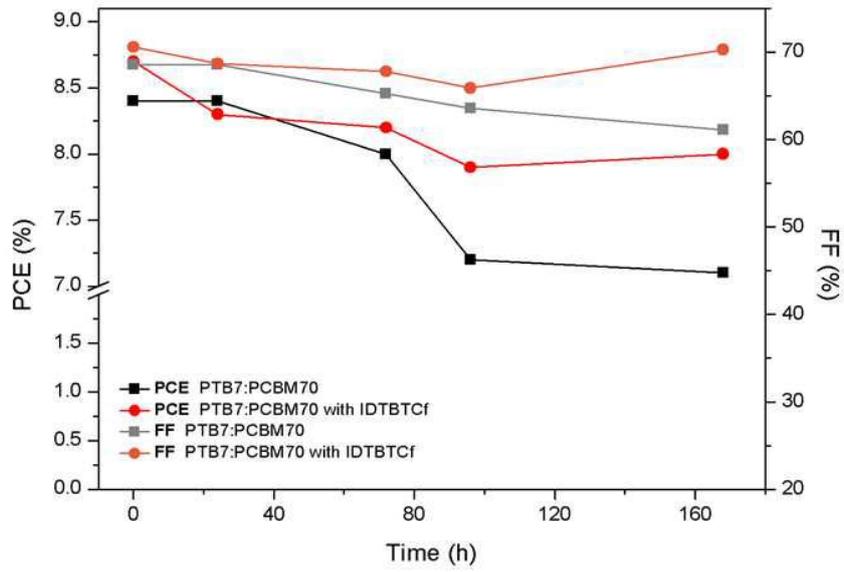
도면4



도면5



도면6



도면7

