

## (12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국(43) 국제공개일  
2016년 6월 23일 (23.06.2016) WIPO | PCT

(10) 국제공개번호

WO 2016/099218 A2

## (51) 국제특허분류:

C08G 61/12 (2006.01) H01L 51/42 (2006.01)  
C08G 75/06 (2006.01)

## (21) 국제출원번호:

PCT/KR2015/013984

## (22) 국제출원일:

2015년 12월 18일 (18.12.2015)

## (25) 출원언어:

한국어

## (26) 공개언어:

한국어

## (30) 우선권정보:

10-2014-0184885 2014년 12월 19일 (19.12.2014) KR

(71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.)  
[KR/KR]; 07336 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).

(72) 발명자: 이지영 (LEE, Jiyoung); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김진석 (KIM, Jinseck); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이동구 (LEE, Dong-gu); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이재철 (LEE, Jaechol); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR).

(74) 대리인: 정순성 (CHUNG, Soon-Sung); 06253 서울시 강남구 강남대로 318, 타워 837 빌딩, 6층, Seoul (KR).

(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

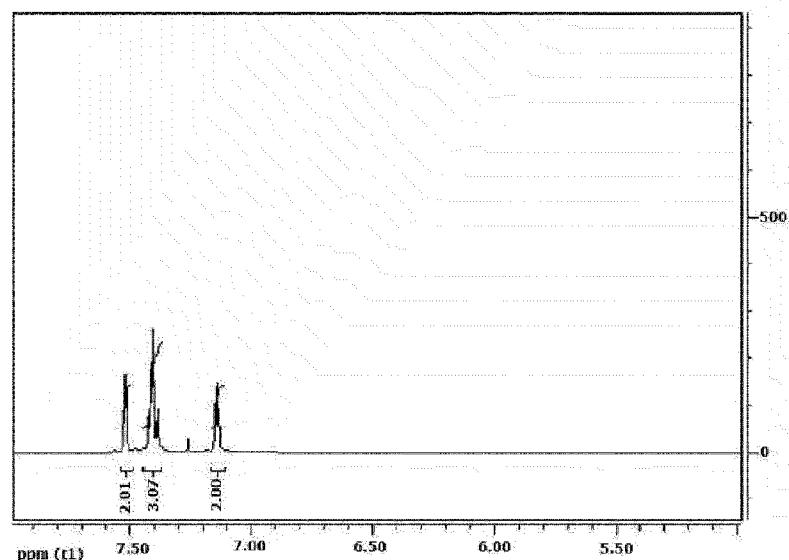
(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

## 공개:

- 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

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

(54) 발명의 명칭: 중합체 및 이를 포함하는 유기 태양 전지



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

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

## 명세서

### 발명의 명칭: 중합체 및 이를 포함하는 유기 태양 전지 기술분야

[1] 본 명세서는 2014년 12월 19일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2014-0184885 호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

[2] 본 명세서는 중합체 및 이를 포함하는 유기 태양 전지에 관한 것이다.

### 배경기술

[3] 유기 태양전지는 광기전력효과(photovoltaic effect)를 응용함으로써 태양에너지를 직접 전기에너지로 변환할 수 있는 소자이다. 태양전지는 박막을 구성하는 물질에 따라 무기 태양전지와 유기 태양전지로 나눌 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.

[4] 태양전지는 태양 에너지로부터 가능한 많은 전기 에너지를 출력할 수 있도록 효율을 높이는 것이 중요하다. 이러한 태양전지의 효율을 높이기 위해서는 반도체 내부에서 가능한 많은 엑시톤을 생성하는 것도 중요하지만 생성된 전하를 손실됨 없이 외부로 끌어내는 것 또한 중요하다. 전하가 손실되는 원인 중의 하나가 생성된 전자 및 정공이 재결합(recombination)에 의해 소멸하는 것이다. 생성된 전자나 정공이 손실되지 않고 전극에 전달되기 위한 방법으로 다양한 방법이 제시되고 있으나, 대부분 추가 공정이 요구되고 이에 따라 제조 비용이 상승할 수 있다.

[5] [선행기술문헌]

[6] [비특허문헌]

[7] Two-layer organic photovoltaic cell(C.W.Tang, Appl. Phys. Lett., 48, 183.(1996))

[8] 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 상세한 설명

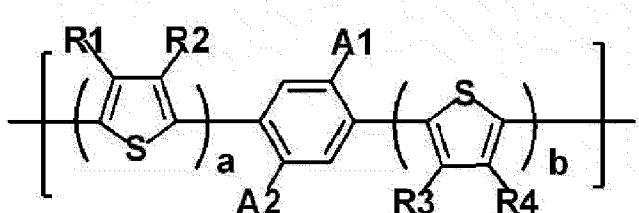
#### 기술적 과제

[9] 본 명세서는 중합체 및 이를 포함하는 유기 태양 전지를 제공하는 것을 목적으로 한다.

## 과제 해결 수단

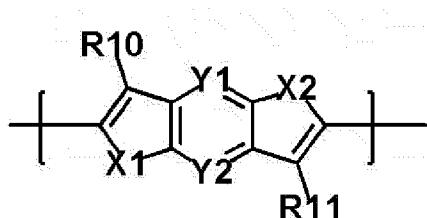
- [10] 본 명세서는 하기 화학식 1로 표시되는 제1 단위;  
 [11] 하기 화학식 2로 표시되는 제2 단위; 및  
 [12] 하기 화학식 3 또는 4로 표시되는 제3 단위를 포함하는 중합체를 제공한다.  
 [13] [화학식 1]

[14]



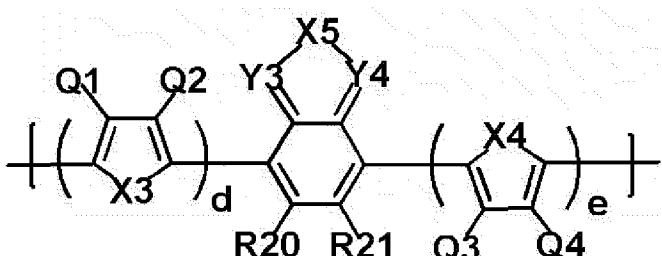
[15] [화학식 2]

[16]



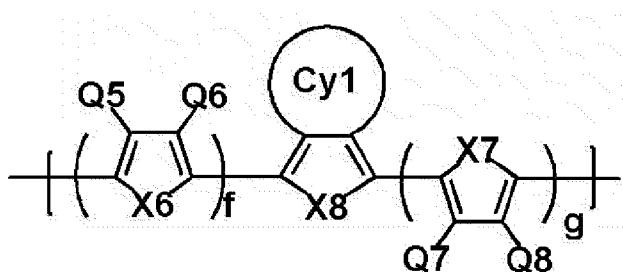
[17] [화학식 3]

[18]



[19] [화학식 4]

[20]



- [21] 화학식 1 내지 4에 있어서,  
 [22] X1 내지 X8은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CRR', NR, O, SiRR',  
 PR, S, GeRR', Se 및 Te로 이루어진 군에서 선택되고,  
 [23] Y1 내지 Y4은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 CR", N, SiR", P 및  
 GeR"로 이루어진 군에서 선택되며,  
 [24] Cy1은 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된

혜테로고리이고,

- [25] 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 혜테로고리기이며,
- [26] R20 및 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알콕시기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴옥시기이고,
- [27] a, b, d, e, f 및 g는 각각 0 내지 3의 정수이며,
- [28] a, b, d, e, f 및 g가 2 이상인 경우, 2 이상의 팔호 내의 구조는 서로 동일하거나 상이하고,
- [29] A1 및 A2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 불소; 또는 염소이다.
- [30] 또한, 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 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 전술한 중합체를 포함하는 것인 유기 태양 전지를 제공한다.

### 발명의 효과

- [31] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체는 전기전도성 물질로 열적 안정성을 가지며, 높은 전자이동도를 갖는다. 따라서, 유기 태양 전지에 적용하는 경우에 우수한 전기적 특성 및 우수한 수명 특성을 기대할 수 있다.
- [32] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체는 HOMO 에너지 준위가 높아, 이를 포함하는 유기태양 전지를 구현하는 경우에 개방 전압의 특성이 우수하다.

### 도면의 간단한 설명

- [33] 도 1은 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지를 나타낸 도이다.
- [34] 도 2는 제조예 1에서 합성한 화학식 A의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [35] 도 3은 제조예 1에서 합성한 화학식 A-1의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [36] 도 4는 제조예 2에서 합성한 화학식 B-3의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [37] 도 5는 제조예 2에서 합성한 화학식 B-4의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.
- [38] 도 6은 중합체 1의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.
- [39] 도 7은 중합체 2의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.
- [40] 도 8은 중합체 3의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.
- [41] 도 9는 중합체 4의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.
- [42] 도 10은 실험예 1의 rpm에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.

- [43] 도 11는 실험에 2의 rpm에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.
- [44] 도 12는 실험에 3의 rpm에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.
- [45] 도 13은 실험에 18에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.
- [46] 도 14는 실험에 18의 유기 태양 전지의 입사 광전 변환 효율을 나타낸 도이다.
- [47] 도 15는 실험에 19 내지 22에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.
- [48] [부호의 설명]
- [49] 101: 애노드(ITO)
- [50] 102: 정공수송층(PEDOT:PSS)
- [51] 103: 광활성층
- [52] 104: 캐소드 (Al)

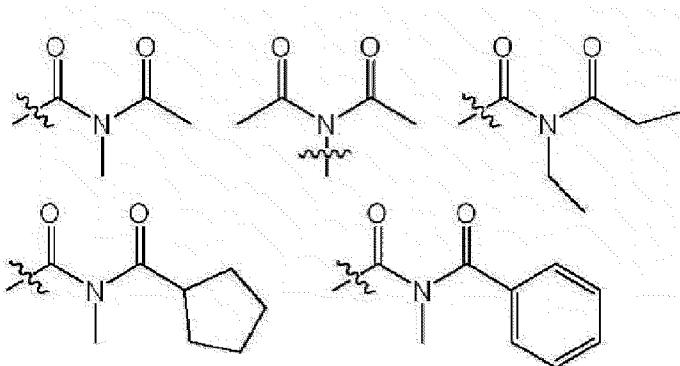
### 발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [53] 이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.
- [54] 본 명세서에 있어서 '단위'란 중합체의 단량체에 포함되는 반복되는 구조로서, 단량체가 중합에 의하여 중합체 내에 결합된 구조를 의미한다.
- [55] 본 명세서에 있어서 '단위를 포함'의 의미는 중합체 내의 주쇄에 포함된다는 의미이다.
- [56] 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.
- [57] 본 명세서에 있어서, 에너지 준위는 에너지의 크기를 의미하는 것이다. 따라서, 진공준위로부터マイ너ス(-) 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.
- [58] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 제1 단위; 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위; 및 상기 화학식 3 또는 4로 표시되는 제3 단위를 포함한다.
- [59] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [60] 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.

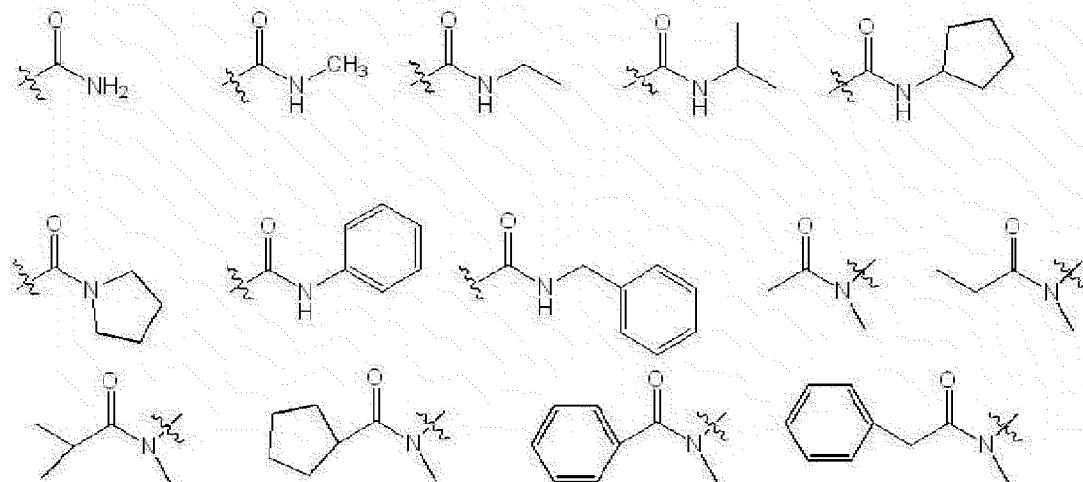
- [61] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된" 이라는 용어는 중수소; 할로겐기; 니트릴기; 니트로기; 이미드기; 아미드기; 히드록시기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬티옥시기; 치환 또는 비치환된 아릴티옥시기; 치환 또는 비치환된 알킬술폭시기; 치환 또는 비치환된 아릴술폭시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 봉소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되었거나, 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.
- [62] 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.

[63]



- [64] 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.

[65]



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

[67] 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.

[68] 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.

[69] 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-프로포록시, 이소프로포록시, 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.

[70] 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.

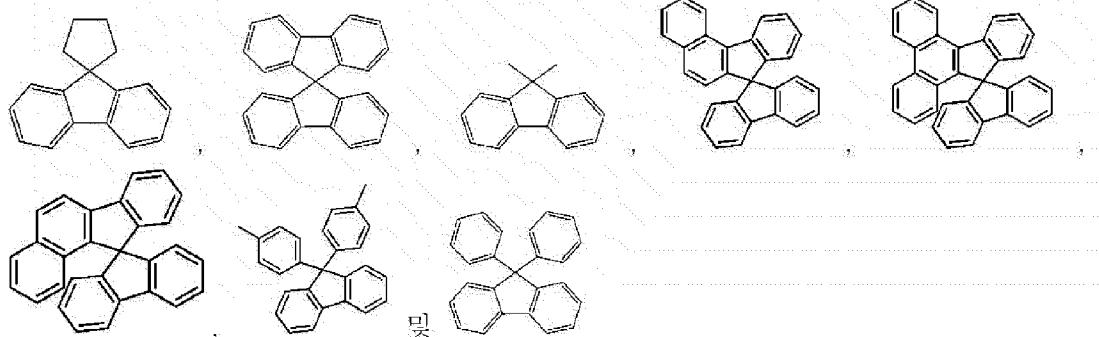
[71] 본 명세서에서 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 25인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[72] 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.

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

[74] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,

[75]



[76] 등이 될 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[77] 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, 쿼놀리닐기, 쿼나졸린기, 쿼녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미디닐기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소쿼놀린기, 인돌기, 카바졸기, 벤즈옥사졸기, 벤즈이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 폐난쓰롤린기(phenanthroline), 티아졸릴기, 이소옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 폐노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[78] 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, 폐닐아민기, 나프틸아민기, 비페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, 폐닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, 폐닐톨릴아민기, 트리페닐아민기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[79] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, 아릴티옥시기 및 아릴술폭시기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 폐녹시, p-토릴옥시, m-토릴옥시, 3,5-디메틸-폐녹시, 2,4,6-트리메틸폐녹시, p-tert-부틸폐녹시, 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 폐닐티옥시기, 2-메틸페닐티옥시기, 4-tert-부틸페닐티옥시기 등이 있으며, 아릴술폭시기로는 벤젠술폭시기, p-톨루엔술폭시기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[80] 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.

[81] 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.

[82] 본 명세서에서 상기 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.

[83] 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 방향족일 수 있으며, 1가기가 아닌 것을 제외하고는 전술한 헤테로고리의 예시 중에서 선택될 수 있다.

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

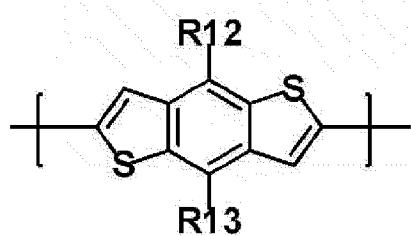
[85] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체는 화학식 1로 표시되는 제1 단위를

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.

- [86] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X1은 S이다.
- [87] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 X2는 S이다.
- [88] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, Y1은 CR"이다.
- [89] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Y2는 CR"이다.
- [90] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R10은 수소이다.
- [91] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R11은 수소이다.
- [92] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위는 하기 화학식 2-1로 표시된다.

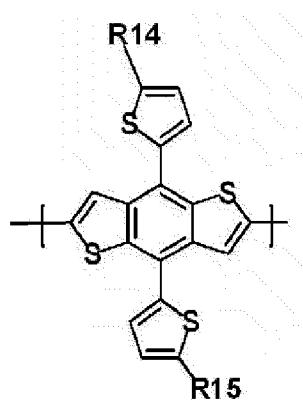
[93] [화학식 2-1]

[94]



- [95] 화학식 2-1에 있어서,
- [96] 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.
- [97] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 헤�테로고리이다.
- [98] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 S 원자를 1 이상 포함하는 헤�테로고리이다.
- [99] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 싸이오펜기이다.
- [100] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2로 표시되는 제2 단위는 하기 화학식 2-2로 표시된다.
- [101] [화학식 2-2]

[102]



[103] 화학식 2-2에 있어서,

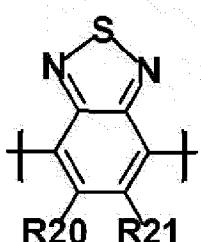
- [104] R14 및 R15는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 알콕시기이다.
- [105] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R14 및 R15는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기이다.
- [106] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R14 및 R15는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 2-에틸헥실기이다.
- [107] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R14 및 R15는 2-에틸헥실기이다.
- [108] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원 또는 6원의 고리이다.
- [109] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원 또는 6원의 N 원자를 1 이상 포함하는 헤테로고리이다.
- [110] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원 또는 6원의 N 원자를 1 이상 포함하는 단환의 헤테로고리이다.
- [111] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원의 고리이다.
- [112] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원의 단환 고리이다.
- [113] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 5원의 헤테로고리이다.
- [114] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 시클릭 케톤기이다.
- [115] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.
- [116] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 알킬기로 치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.
- [117] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 2-에틸헥실기로 치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.
- [118] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 Cy1은 치환 또는 비치환된 도데카닐기로

치환된 피롤리딘-2,5-다이온이다.

- [119] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X3는 S이다.
- [120] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 X4는 S이다.
- [121] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 X5는 S이다.
- [122] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Y3는 N이다.
- [123] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Y4는 N이다.
- [124] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 d는 0이다.
- [125] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 d는 1이다.
- [126] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 e는 1이다.
- [127] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 e는 0이다.
- [128] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Q1은 수소이다.
- [129] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Q2는 수소이다.
- [130] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Q3는 수소이다.
- [131] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 Q4는 수소이다.
- [132] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3으로 표시되는 제3 단위는 하기 화학식 3-1 또는 화학식 3-2로 표시된다.
- [133] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 화학식 4로 표시되는 제3 단위는 하기 화학식 3-3으로 표시된다.
- [134] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시된다.

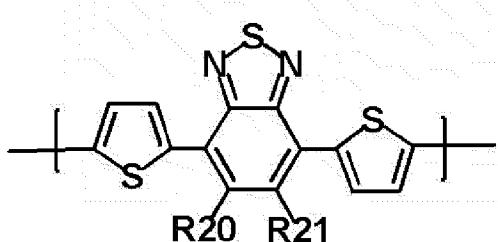
[135] [화학식 3-1]

[136]



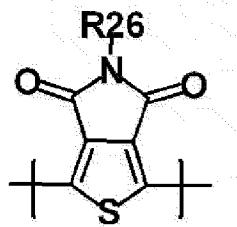
[137] [화학식 3-2]

[138]



[139] [화학식 3-3]

[140]



[141] 화학식 3-1 내지 3-3에 있어서,

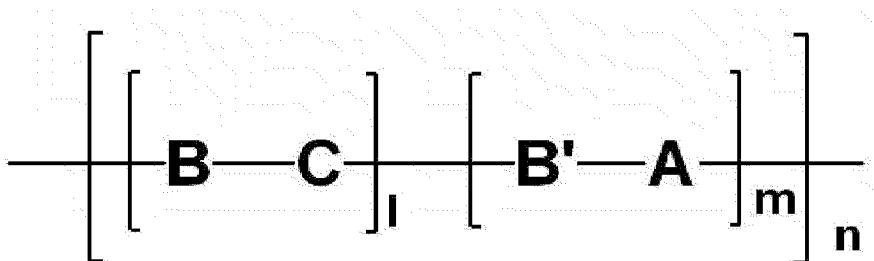
[142] R20 및 R21은 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고,

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

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

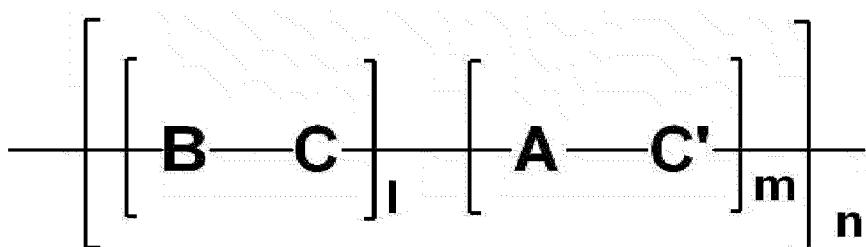
[145] [화학식 5]

[146]



[147] [화학식 6]

[148]



[149] 화학식 5 및 6에 있어서,

[150] 1은 몰분율로서,  $0 < 1 < 1$ 인 실수이며,[151] m은 몰분율로서,  $0 < m < 1$ 인 실수이고,[152]  $l+m = 1$ 이며,

[153] A는 상기 화학식 1로 표시되는 제1 단위이고,

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

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

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

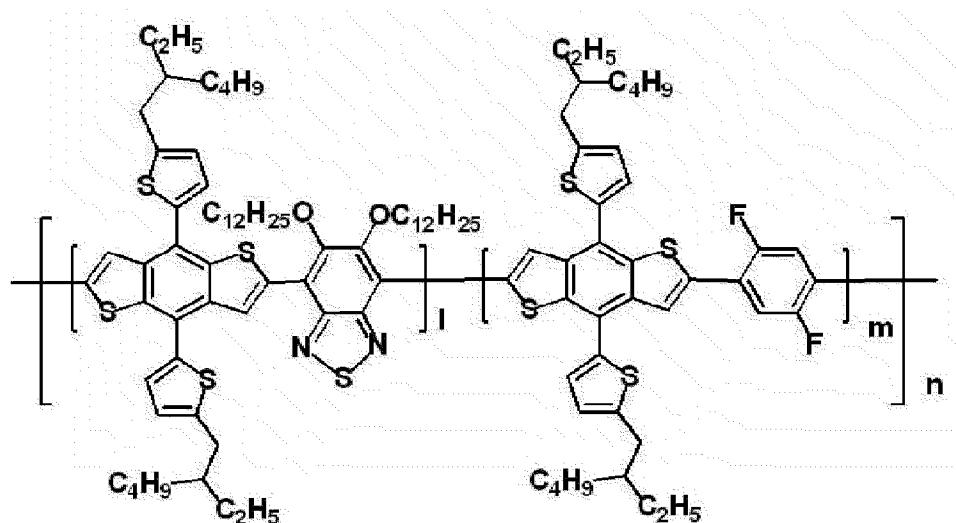
[157] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 5의 B는 상기 화학식 2-1로

- 표시되는 제2 단위이고, a 및 b는 0이다.
- [158] 본 명세서의 다른 실시상태에 있어서, 상기 화학식 6의 C는 상기 화학식 3-1 또는 화학식 3-3으로 표시되는 제3 단위이고, a 및 b는 1 내지 3의 정수이다.
- [159] 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.
- [160] 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.
- [161] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체는 단위 내 또는 이웃하여 있는 다른 단위와 비공유 결합성의 상호작용을 통하여, 중합체의 백분(backbone)의 비틀림 각(torsion angle)을 최소화 시켜, 중합체의 평면성을 향상시킨다. 또한, 비공유 결합성 상호작용은 파이-파이 스택킹( $\pi$ - $\pi$  stacking)을 향상시켜, 폴라론(polaron)과 엑시톤(exiton)의 비편재화(delocalization)로 인하여, 전하 이동도가 향상되며, 팩킹(packing)이 용이한 효과가 있다.
- [162] 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.
- [163] 따라서, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 중합체를 포함하는 경우에는 개방 전압의 증가를 유도할 수 있어, 높은 효율의 소자를 제공할 수 있다.
- [164] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 상기 화학식 3-1로 표시되는 단위이다.
- [165] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 상기 화학식 3-2로 표시되는 단위이다.
- [166] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 제3 단위는 상기 화학식 3-3으로 표시되는 단위이다.
- [167] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R1은 수소이다.
- [168] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R2는 수소이다.
- [169] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R3는 수소이다.
- [170] 본 명세서의 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R4는 수소이다.
- [171] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, a는 0이다.
- [172] 또 다른 실시상태에 있어서, a는 1이다.
- [173] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 b는 0이다.
- [174] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 b는 1이다.
- [175] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 알콕시기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리이다.
- [176] 또 하나의 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 알콕시기이다.

- [177] 또 다른 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기이다.
- [178] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R"는 치환 또는 비치환된 도데카닐옥시기이다.
- [179] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R"는 도데카닐옥시이다.
- [180] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, R"는 치환 또는 비치환된 헤테로고리이다.
- [181] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R"는 치환 또는 비치환된 S 원자를 1 이상 포함하는 헤테로고리이다.
- [182] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R"는 치환 또는 비치환된 싸이오펜기이다.
- [183] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R"는 알킬기로 치환된 싸이오펜기이다.
- [184] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R"는 탄소수 1 내지 20의 알킬기로 치환된 싸이오펜기이다.
- [185] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R"는 2-에틸헥실기로 치환된 싸이오펜기이다.
- [186] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기로 치환된 싸이오펜기이다.
- [187] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R12 및 R13은 2-에틸헥실기로 치환된 싸이오펜기이다.
- [188] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 상기 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 알콕시기이다.
- [189] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 상기 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알콕시기이다.
- [190] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 상기 R21은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 도데카닐옥시기이다.
- [191] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R20 및 R21은 도데카닐옥시이다.
- [192] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 알킬기이다.
- [193] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기이다.
- [194] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 2-에틸헥실기이다.
- [195] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R26은 2-에틸헥실기이다.
- [196] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 R26은 치환 또는 비치환된 도데카닐기이다.
- [197] 또 다른 실시상태에 있어서, 상기 R26은 도데카닐기이다.
- [198] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체는 하기 화학식 7 내지 하기 화학식 11 중 어느 하나로 표시되는 단위를 포함한다.

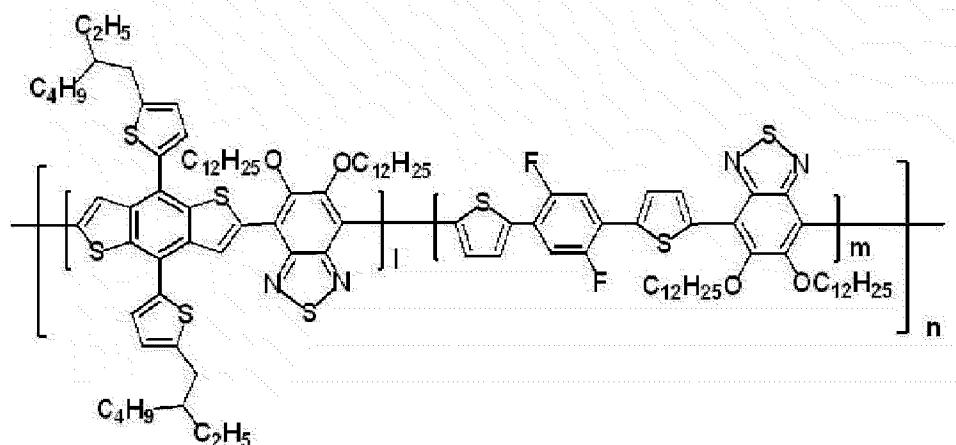
[199] [화학식 7]

[200]



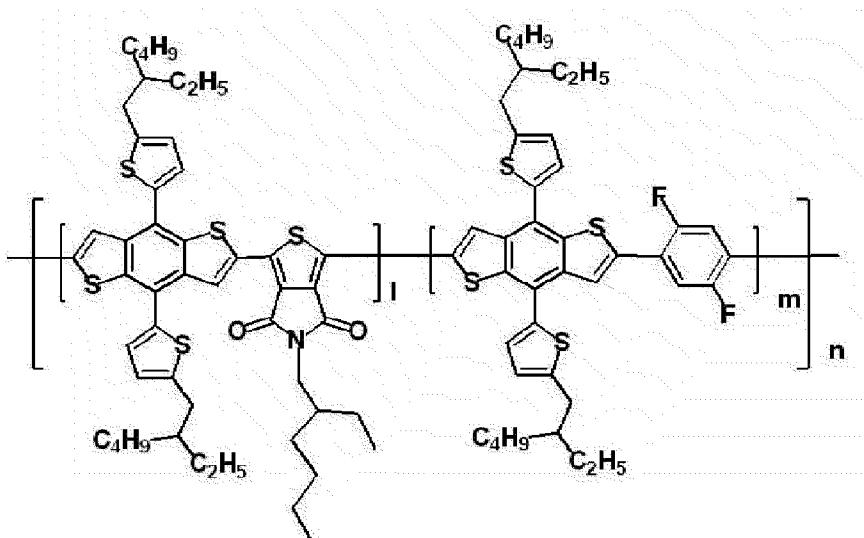
[201] [화학식 8]

[202]



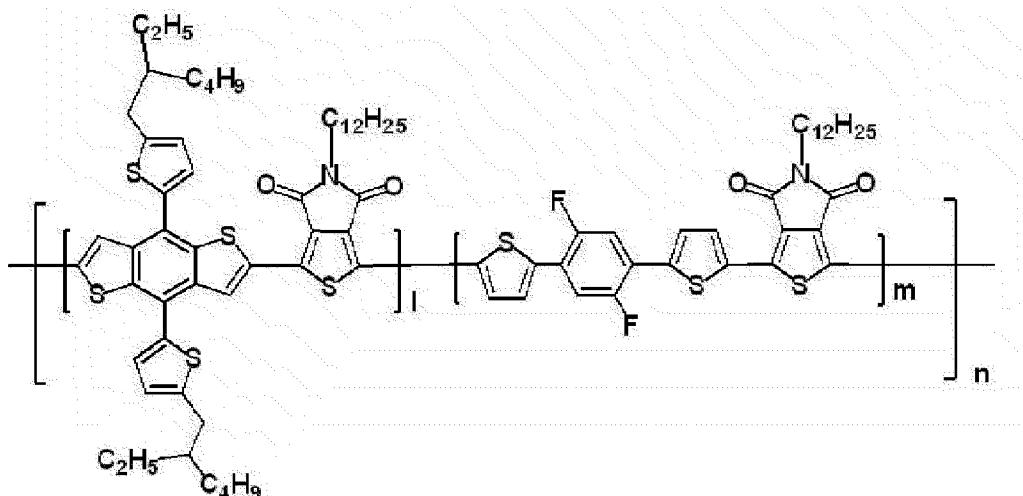
[203] [화학식 9]

[204]



[205] [화학식 10]

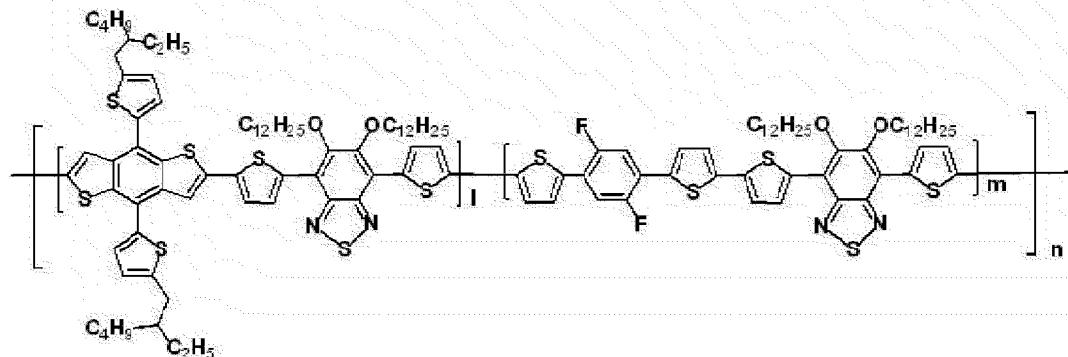
[206]



[207]

[화학식 11]

[208]



[209] 화학식 7 내지 11에 있어서,

[210] l은 몰분율로서,  $0 < l < 1$ 인 실수이며,[211] m은 몰분율로서,  $0 < m < 1$ 인 실수이고,[212]  $l+m = 1$ 이며,

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

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

[215] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 m은 0.5이다.

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

[217] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 m은 0.25이다.

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

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

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

[221] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 중합체의 말단기는 브로모

싸이오펜기](bromo-thiophene)이다.

- [222] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 중합체의 말단기는 트라이플루오로-벤젠기(trifluoro-benzene)이다.
- [223] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 중합체의 수평균 분자량은 5,000 g/mol 내지 1,000,000 g/mol이 바람직하다.
- [224] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 중합체는 1 내지 10의 분자량 분포를 가질 수 있다. 바람직하게는 상기 중합체는 1 내지 3의 분자량 분포를 가진다.
- [225] 분자량 분포는 낮을수록, 수평균 분자량이 커질수록 전기적 특성과 기계적 특성이 더 좋아진다.
- [226] 또한, 일정 이상의 용해도를 가져서 용액도포법 적용이 유리하도록 하기 위해 수평균 분자량은 100,000이하인 것이 바람직하다.
- [227] 상기 중합체는 후술하는 제조예를 기초로 제조될 수 있다. 상기 중합체 각 단위의 단량체를 클로로 벤젠을 용매로 하여,  $Pd_2(dba)_3$ ,  $P(o-tolyl)_3$ , 넣고 마이크로웨이브 반응기로 중합하여 제조하였다.
- [228] 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.
- [229] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 중합체를 포함하는 것인 유기 태양 전지를 제공한다.
- [230] 본 명세서에서 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.
- [231] 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.
- [232] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지가 외부 광원으로부터 광자를 받으면 전자 주개와 전자 반개 사이에서 전자와 정공이 발생한다. 발생된 정공은 전자 도너층을 통하여 양극으로 수송된다.
- [233] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 정공 수송층, 정공 주입층 또는 정공 수송과 정공 주입을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 정공 수송층, 정공 주입층 또는 정공 수송과 정공 주입을 동시에 하는 층은 상기 중합체를

포함한다.

- [234] 또 하나의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는 층을 포함하고, 상기 전자주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는 층은 상기 중합체를 포함한다.
- [235] 도 1 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 태양 전지를 나타낸 도이다.
- [236] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지가 외부 광원으로부터 광자를 받으면 전자 주개와 전자 반개 사이에서 전자와 정공이 발생한다. 발생된 정공은 전자 도너층을 통하여 양극으로 수송된다.
- [237] 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.
- [238] 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.
- [239] 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.
- [240] 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.
- [241] 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 따르면, 상기 유기태양전지가 노말 구조인 경우, 기판 상에 형성되는 제1 전극이 애노드일 수 있다.
- [242] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 인버티드(Invetered) 구조이다. 상기 인버티드 구조는 기판 상에 캐소드가 형성되는 것을 의미할 수 있다. 구체적으로, 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기태양전지가 인버티드 구조인 경우, 기판 상에 형성되는 제1 전극이 캐소드일 수 있다.
- [243] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기 태양 전지는 텐덤(tandem) 구조이다. 이 경우 상기 유기 태양 전지는 2층 이상의 광활성층을 포함할 수 있다. 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기태양 전지는 광활성층이 1층 또는 2층 이상일 수 있다.
- [244] 또 하나의 실시상태에 있어서, 베퍼층이 광활성층과 정공수송층 사이 또는 광활성층과 전자수송층 사이에 구비될 수 있다. 이때, 정공 주입층이 애노드와 정공수송층사이에 더 구비될 수 있다. 또한, 전자주입층이 캐소드와 전자수송층

사이에 더 구비될 수 있다.

- [245] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 광활성층은 전자 주개 및 반개로 이루어진 군에서 선택되는 1 또는 2 이상을 포함하고, 상기 전자 주개물질은 상기 중합체를 포함한다.
- [246] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자 반개 물질은 플러렌, 플러렌 유도체, 바소쿠프로인, 반도체성 원소, 반도체성 화합물 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 구체적으로 플러렌(fullerene), 플러렌 유도체(PCBM((6,6)-phenyl-C61-butyric acid-methylester) 또는 PCBCR((6,6)-phenyl-C61-butyric acid-cholesteryl ester), 페릴렌(perylene) PBI(polybenzimidazole), 및 PTCBI(3,4,9,10-perylene-tetracarboxylic bis-benzimidazole)로 이루어진 군에서 선택되는 1 또는 2 이상의 화합물이다.
- [247] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자 주개 및 전자 반개는 별크 혜테로 정션(BHJ)을 구성한다.
- [248] 별크 혜테로 정션이란 광활성층에서 전자 주개 물질과 전자 반개 물질이 서로 섞여 있는 것을 의미한다.
- [249] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 광활성층은 첨가제를 더 포함한다.
- [250] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 첨가제의 분자량은 50 g/mol 내지 300 g/mol이다.
- [251] 또 하나의 실시상태에 있어서, 상기 첨가제의 끓는점은 30 °C 내지 300 °C의 유기물이다.
- [252] 본 명세서에서 유기물이란 탄소 원자를 적어도 1 이상 포함하는 물질을 의미한다.
- [253] 하나의 실시상태에 있어서, 상기 첨가제는 1,8-다아이오도옥탄(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.
- [254] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 광활성층은 n 형 유기물층 및 p 형 유기물층을 포함하는 이층 박막(bilayer) 구조이며, 상기 p형 유기물층은 상기 중합체를 포함한다.
- [255] 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.
- [256] 상기 애노드 전극은 투명하고 전도성이 우수한 물질이 될 수 있으나, 이에

한정되지 않는다. 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는  $\text{SnO}_2 : \text{Sb}$ 와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸싸이오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)싸이오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

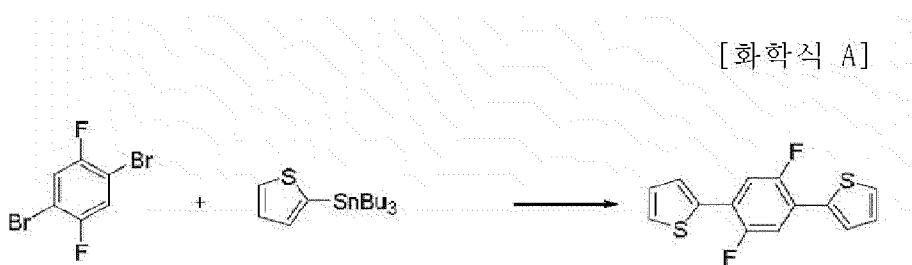
- [257] 상기 애노드 전극의 형성 방법은 특별히 한정되지 않으나, 예컨대 스퍼터링, E-빔, 열증착, 스판코팅, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅, 닉터 블레이드 또는 그라비아 프린팅법을 사용하여 기판의 일면에 도포되거나 필름 형태로 코팅됨으로써 형성될 수 있다.
- [258] 상기 애노드 전극을 기판 상에 형성하는 경우, 이는 세정, 수분제거 및 친수성 개질 과정을 거칠 수 있다.
- [259] 예컨대, 패터닝된 ITO 기판을 세정제, 아세톤, 이소프로필 알코올(IPA)로 순차적으로 세정한 다음, 수분 제거를 위해 가열판에서 100~150°C에서 1~30분간, 바람직하게는 120°C에서 10분간 건조하고, 기판이 완전히 세정되면 기판 표면을 친수성으로 개질한다.
- [260] 상기와 같은 표면 개질을 통해 접합 표면 전위를 광활성층의 표면 전위에 적합한 수준으로 유지할 수 있다. 또한, 개질 시 애노드 전극 위에 고분자 박막의 형성이 용이해지고, 박막의 품질이 향상될 수도 있다.
- [261] 애노드 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.
- [262] 애노드 전극 또는 기판의 상태에 따라 상기 방법 중 한가지를 선택할 수 있다. 다만, 어느 방법을 이용하든지 공통적으로 애노드 전극 또는 기판 표면의 산소이탈을 방지하고 수분 및 유기물의 잔류를 최대한 억제하는 것이 바람직하다. 이 때, 전 처리의 실질적인 효과를 극대화할 수 있다.
- [263] 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.
- [264] 그러나, 본 명세서에 있어서의 패터닝된 ITO 기판의 표면 개질 방법은 특별히 한정시킬 필요는 없으며, 기판을 산화시키는 방법이라면 어떠한 방법도 무방하다.
- [265] 상기 캐소드 전극은 일함수가 작은 금속이 될 수 있으나, 이에 한정되지 않는다. 구체적으로 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al,  $\text{LiO}_2/\text{Al}$ , LiF/Fe, Al:Li, Al:BaF<sub>2</sub>, Al:BaF<sub>2</sub>:Ba와 같은 다층 구조의 물질이 될 수 있으나, 이에

한정되는 것은 아니다.

- [266] 상기 캐소드 전극은  $5 \times 10^{-7}$  torr 이하의 진공도를 보이는 열증착기 내부에서 증착되어 형성될 수 있으나, 이 방법에만 한정되는 것은 아니다.
- [267] 상기 정공수송층 및/또는 전자수송층 물질은 광활성층에서 분리된 전자와 정공을 전극으로 효율적으로 전달시키는 역할을 담당하며, 물질을 특별히 제한하지는 않는다.
- [268] 상기 정공수송층 물질은 PEDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene) doped with poly(styrenesulfonic acid)), 몰리브데늄 산화물( $\text{MoO}_x$ ); 바나듐 산화물( $\text{V}_2\text{O}_5$ ); 니켈 산화물( $\text{NiO}$ ); 및 텉스텐 산화물( $\text{WO}_x$ ) 등이 될 수 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [269] 상기 전자수송층 물질은 전자추출금속 산화물(electron-extracting metal oxides)이 될 수 있으며, 구체적으로 8-히드록시퀴놀린의 금속착물;  $\text{Alq}_3$ 를 포함한 착물;  $\text{LiQ}$ 를 포함한 금속착물;  $\text{LiF}$ ;  $\text{Ca}$ ; 티타늄 산화물( $\text{TiO}_x$ ); 아연 산화물( $\text{ZnO}$ ); 및 세슘 카보네이트( $\text{Cs}_2\text{CO}_3$ ) 등이 될 수 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [270] 광활성층은 전자공여체 및/또는 전자수용체와 같은 광활성 물질을 유기용매에 용해시킨 후 용액을 스픬 코팅, 딥코팅, 스크린 프린팅, 스프레이 코팅, 닉터 블레이드, 브러쉬 페인팅 등의 방법으로 형성할 수 있으나, 이들 방법에만 한정되는 것은 아니다.

### 발명의 실시를 위한 형태

- [271] 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.
- [272] 제조예 1. 화학식 A-1의 제조
- [273]

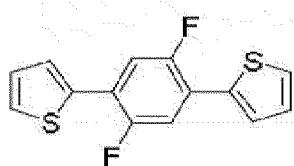


- [274] 두 개의 출발물질에 톨루엔을 넣고, 0.05 당량의 테트라카이스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ( $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ )를 첨가한 후,  $80^\circ\text{C}$ 에서 15시간 교반 시키면 반응용액이 점점 검정색으로 진행됨을 알 수 있다. 워크업 (Work up)을 해주고 황산 마그네슘(magnesium sulfate)로 건조한 후 재결정을 하면 흰색의 파우더를 4.3g 얻었다.

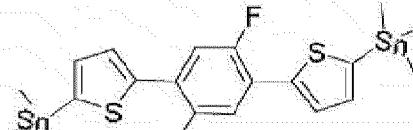
[275] 도 2는 제조예 1에서 합성한 화학식 A의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[276]

[화학식 A]



[화학식 A-1]

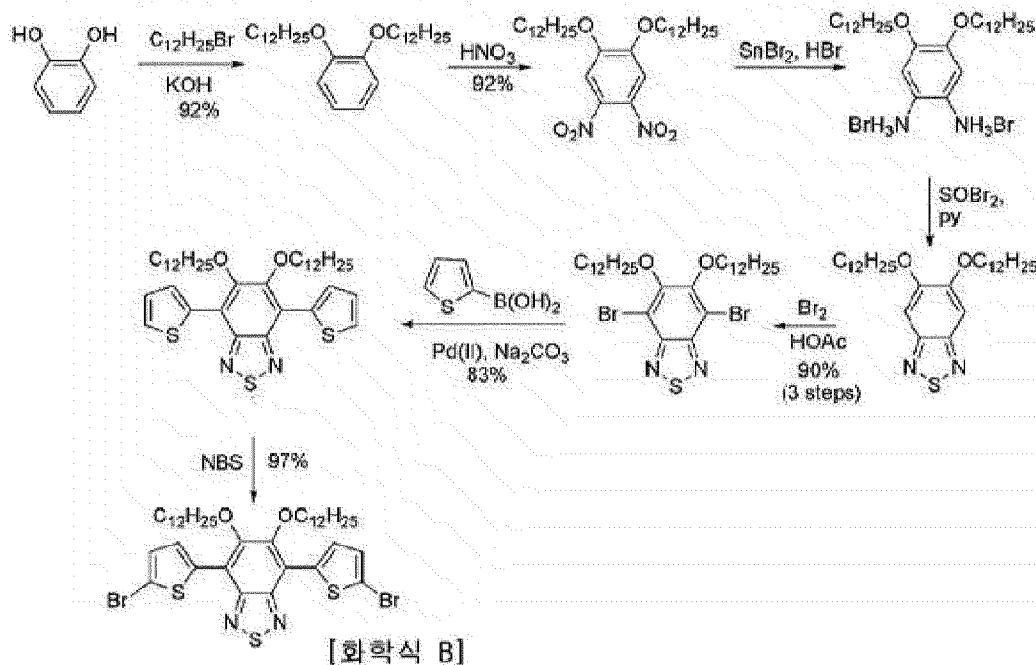


[277] 출발물질을 테트라하이드로퓨란(THF)에 녹이고 -78 °C로 온도를 낮춘 후 5 n-부틸리튬(n-BuLi)을 2.1 당량 첨가한 후 30분간 교반시켰다. 1시간 동안 실온에서 추가로 교반시켜 주면 용액색이 노란색으로 변하였다. 다시 -78 °C로 온도를 낮추고 2.1 당량의 트리메틸틴 클로라이드(trimethyltin chloride)를 첨가하고 천천히 실온으로 온도를 올리면서 12시간 동안 교반하였다. 12시간 후 황토색의 용액으로 색이 변하였고, 워크업(work up) 후 재결정을 하면 광택이 있는 판상의 노란색 고체를 얻을 수 있었다.

[278] 도 3은 제조예 1에서 합성한 화학식 A-1의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[279] 제조예 2. 화학식 B의 제조

[280]



[281] 상기 화학식 B의 화합물은 JOURNAL OF POLYMER SCIENCE PART A: POLYMER CHEMISTRY 2011, 49, 4387-4397 4389를 기초로 합성하였다.

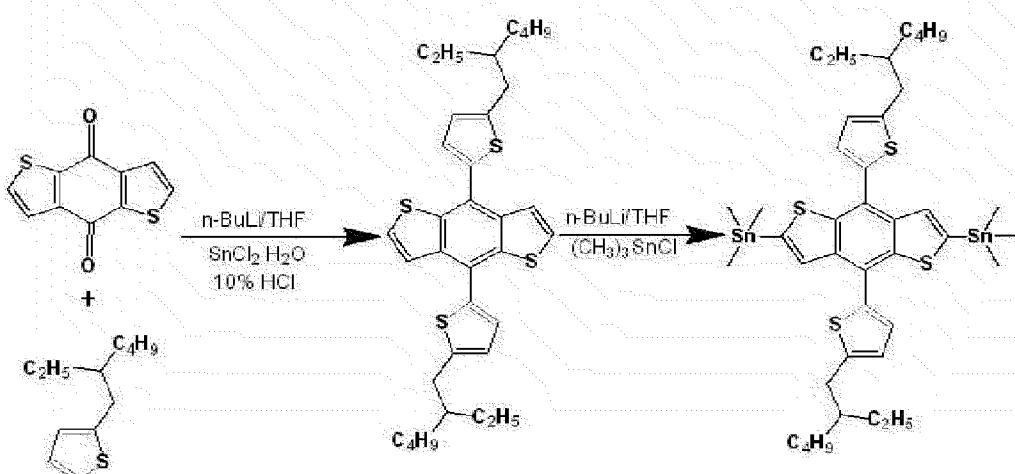
[282] 도 4는 제조예 2에서 합성한 화학식 B-3의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[283] 도 5는 제조예 2에서 합성한 화학식 B-4의 NMR 스펙트럼을 나타낸 도이다.

[284] 제조예 3. 화학식 C-1의 합성

[285]

[화학식 C]



[286] (1) 화학식 C의 합성

[287] 500 ml의 테트라하이드로퓨란 (THF)에

2-(2-에틸헥실)티오펜(2-(2-ethylhexyl)thiophene, 10.0 g, 59.4 mmol)을 넣고 녹인 뒤 -78°C까지 온도를 낮추었다. 이 온도에서 헥산(hexane)에 녹아있는 2.5M n-BuLi (2.5M n-Butyllithium in hexane, 24.0 ml, 59.4 mmol)을 천천히 넣고, 30분 동안 교반하였다. 이 후, 0°C까지 온도를 높이고 이 상태에서 1시간 교반 후, 4,8-데하이드로벤조[1,2-b:4,5-b']디티오펜-4,8-다이온(4,8-dehydrobenzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-4,8-dione, 3.3 g, 14.8 mmol)을 한 번에 넣고 50 °C에서 3시간 동안 교반하였다. 이 용액을 상온으로 온도를 낮춘 다음, 틴(II)클로라이드 다이하이드레이트( $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) (tin(II)chloride dehydrate, 26g)과 10% HCl (56 ml)를 넣고 추가적으로 3시간 동안 교반하였다. 이 용액에 얼음을 부어 넣고, 다이에틸 에테르 (Diethyl ether)로 2번 추출한 뒤, 물로 2번 씻어주고, 황산마그네슘( $\text{MgSO}_4$ )(Magnesium sulfate)로 잔여 물을 제거하였다. 남은 용액을 감압하에 용매를 제거하고 실리카 컬럼(silica column, eluent; Petroleum)을 통해서 노란색의 밀도 높은 액체를 얻었다.

[288] 수율: 64 %

[289] (2) 화학식 C-1의 합성

100 ml의 테트라하이드로퓨란 (THF)에 5(3.9 g, 7.59 mmol)을 넣고 녹인 뒤 0 °C까지 온도를 낮추었다. 이 온도에서 헥산(hexane)에 녹아있는 1.6M n-BuLi (1.6M n-Butyllithium in hexane, 10.4ml, 16.7 mmol)을 천천히 넣고, 1시간 동안 상온에서 교반하였다. 이 용액에 THF에 녹아있는 1M 트라이메틸틴클로라이드 (1M Trimethyltinchloride in THF, 22.7 ml, 22.7 mmol)을 한 번에 넣고 2시간 교반하였다. 이 용액에 물을 부어 넣고, 다이에틸 에테르 (Diethyl ether)로 2번 추출한 뒤, 물로 2번 씻어주고, 황산마그네슘( $\text{MgSO}_4$ )(Magnesium sulfate)로 잔여 물을 제거하였다. 남은 용액을 감압하에 용매를 제거하고 에탄올 (ethanol)로 재결정하여 연한 노란색 결정의 고체를 얻었다.

[화학식 C-1]

- [291] 수율: 87 %
- [292] 중합체의 제조
- [293] 상기 중합체 각 제1 단위 내지 제3 단위의 단량체를 클로로 벤젠을 용매로 하여,  $Pd_2(dbu)_3$ ,  $P(o-tolyl)_3$ , 넣고 마이크로웨이브 반응기로 중합하여 제조하였다.
- [294] 유기 태양 전지의 제조 및 특성 측정
- [295] 실험 예 1. 유기 태양전지의 제조-1
- [296] 하기 중합체 1과  $PC_{61}BM$  을 1:1로 클로로벤젠(Chlorobenzene, CB)에 녹여 복합 용액(composit solution)을 제조하였다. 이때, 농도는 2.5 wt%로 조절하였으며, 유기 태양전지는 ITO/PEDOT:PSS/광활성층/AI의 구조로 하였다. ITO는 바타입(bar type)으로  $1.5 * 1.5\text{ cm}^2$ 가 코팅된 유리 기판은 중류수, 아세톤, 2-프로판올을 이용하여 초음파 세척하고, ITO 표면을 10 분 동안 오존 처리한 후 45 nm 두께로 PEDOT:PSS(AI4083)를 스플레이팅하여  $235^\circ\text{C}$ 에서 5 분 동안 열처리하였다. 광활성층의 코팅을 위해서는 중합체  $PC_{61}BM$  복합용액을 각각 500rpm, 1,000 rpm, 1500 rpm 및 2,000 rpm으로 10초간 스플레이팅하여,  $3 \times 10^{-8}\text{ torr}$  진공 하에서 열 증발기(thermal evaporator)를 이용하여 100 nm 두께로  $1\text{ \AA/s}$  속도로 Al을 증착하여 유기 태양전지를 제조하였다.
- [297] [중합체 1]
- [298]
- 
- [299] 도 6은 중합체 1의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.
- [300] 실험 예 2. 유기 태양전지의 제조-2
- [301] 상기 실험 예 1에서 중합체 1과  $PC_{61}BM$  을 1:2로 제조한 것을 제외하고는 실험 예 1과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.
- [302] 실험 예 3. 유기 태양전지의 제조-3
- [303] 상기 실험 예 1에서 중합체 1과  $PC_{61}BM$  을 1:3으로 제조한 것을 제외하고는 실험 예 1과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.
- [304] 상기 실험 예 1 내지 3에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을  $100\text{ mW/cm}^2$ (AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 1에 그 결과를 나타내었다.

[305] [표1]

	활성층		V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>SC</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	PCE <sub>avg</sub> (%)
	종합체: PC <sub>61</sub> BM	rpm					
실험 예 1	1:1	500	0.778	2.471	0.382	0.73	0.79
			0.808	2.663	0.418	0.9	
			0.806	2.415	0.372	0.73	
		1000	0.813	2.812	0.393	0.90	0.89
			0.798	2.901	0.383	0.89	
			0.803	2.798	0.397	0.89	
		1500	0.789	3.406	0.383	1.03	1.08
			0.791	3.666	0.403	1.17	
			0.789	3.461	0.380	1.04	
		2000	0.811	3.953	0.427	1.37	1.35
			0.768	4.097	0.411	1.29	
			0.806	4.031	0.430	1.40	
실험 예 2	1:2	500	0.802	3.091	0.423	1.05	1.17
			-	-	-	-	
			0.799	3.554	0.456	1.29	
		1000	0.785	3.664	0.394	1.13	1.16
			0.780	3.900	0.397	1.21	
			0.776	3.795	0.393	1.16	
		1500	0.807	5.072	0.422	1.73	1.76
			0.808	5.23	0.441	1.86	
			0.807	4.998	0.418	1.69	
		2000	0.819	5.424	0.469	2.08	1.97
			0.795	5.673	0.438	1.97	
			0.784	5.748	0.410	1.85	

실험 예 3	1:3	500	0.785	3.265	0.438	1.12	0.8
			0.769	1.722	0.380	0.5	
			0.787	2.297	0.433	0.78	
		1000	0.778	2.471	0.382	0.73	0.79
			0.808	2.663	0.418	0.90	
			0.806	2.415	0.372	0.73	
		1500	0.814	4.833	0.453	1.78	1.74
			0.784	4.944	0.417	1.62	
			0.810	4.815	0.465	1.81	
		2000	0.816	4.737	0.489	1.89	1.92
			0.803	4.927	0.484	1.91	
			0.807	4.928	0.488	1.94	

[306] 도 10은 실험 예 1의 rpm에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.

[307] 도 11는 실험 예 2의 rpm에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.

[308] 도 12는 실험 예 3의 rpm에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.

#### 실험 예 4. 유기 태양전지의 제조-4

[310] 상기 실험 예 2에서 중합체 1과 PC<sub>61</sub>BM 을 1500 rpm 으로 스피ń코팅한 후, 각각 어닐링을 하지 않은 경우, 80 °C, 130 °C 및 200 °C 로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 2와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

#### 실험 예 5. 유기 태양전지의 제조-5

[312] 상기 실험 예 4에서 중합체 1과 PC<sub>61</sub>BM 을 1500 rpm 으로 스피ń코팅한 후, 각각 어닐링을 하지 않은 경우, 100 °C, 150 °C 및 250 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 4와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

#### 실험 예 6. 유기 태양전지의 제조-6

[314] 상기 실험 예 4에서 중합체 1과 PC<sub>61</sub>BM 을 2000 rpm 으로 스피ń코팅한 후, 각각 어닐링을 하지 않은 경우, 80 °C, 130 °C 및 200 °C 로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 4와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

#### 실험 예 7. 유기 태양전지의 제조-7

[316] 상기 실험 예 6에서 중합체 1과 PC<sub>61</sub>BM 을 2000 rpm 으로 스피ń코팅한 후, 각각 어닐링을 하지 않은 경우, 100 °C, 150 °C 및 250 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 6과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[317] 상기 실험 예 4 내지 7에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100

mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 2에 그 결과를 나타내었다.

[318] [표2]

	활성층		V <sub>OC</sub> (V)	J <sub>SC</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	PCE <sub>avg</sub> (%)
	중합체: PC <sub>61</sub> BM	어닐링(°C)					
실험 예 4	1:2	-	0.807	5.072	0.422	1.73	1.76
			0.808	5.23	0.441	1.86	
			0.807	4.998	0.418	1.69	
	80	80	0.873	4.825	0.426	1.8	1.82
			0.873	4.952	0.446	1.93	
			0.871	4.731	0.423	1.74	
	130	130	0.802	5.004	0.438	1.76	1.77
			0.802	5.146	0.453	1.87	
			0.805	4.937	0.426	1.69	
	200	200	0.816	3.507	0.402	1.15	1.13
			0.806	3.552	0.405	1.16	
			0.807	3.384	0.392	1.07	
실험 예 5	1:2	-	0.819	5.424	0.469	2.08	1.97
			0.795	5.673	0.438	1.97	
			0.784	5.748	0.410	1.85	
	100	100	0.861	5.196	0.458	2.05	2.00
			0.847	5.380	0.446	2.03	
			0.838	5.471	0.418	1.92	
	150	150	0.759	5.223	0.459	1.82	1.84
			0.743	5.341	0.440	1.75	
			0.756	5.489	0.470	1.95	
	250	250	0.352	3.109	0.407	0.45	0.42
			0.315	3.140	0.380	0.38	
			0.336	3.219	0.397	0.43	

실험 예 6	1:3	-	0.814	4.833	0.453	1.78	1.74
			0.784	4.944	0.417	1.62	
			0.810	4.815	0.465	1.81	
		80	0.874	4.557	0.448	1.78	1.81
			0.872	4.675	0.476	1.94	
			0.866	4.505	0.440	1.73	
		130	0.769	4.5	0.447	1.55	1.61
			0.772	4.57	0.475	1.71	
			0.770	4.534	0.454	1.58	
		200	0.774	2.962	0.421	0.96	0.99
			0.767	3.114	0.422	1.01	
			0.778	3.065	0.419	1.00	
실험 예 7	1:3	-	0.816	4.737	0.489	1.89	1.92
			0.803	4.927	0.484	1.91	
			0.807	4.928	0.488	1.94	
		100	0.851	4.434	0.479	1.81	1.85
			0.845	4.652	0.480	1.89	
			0.845	4.640	0.472	1.85	
		150	0.744	4.175	0.470	1.46	1.52
			0.736	4.466	0.481	1.58	
			0.738	4.437	0.466	1.53	
		250	0.334	1.916	0.398	0.26	0.22
			0.299	1.921	0.365	0.21	
			0.303	1.916	0.342	0.20	

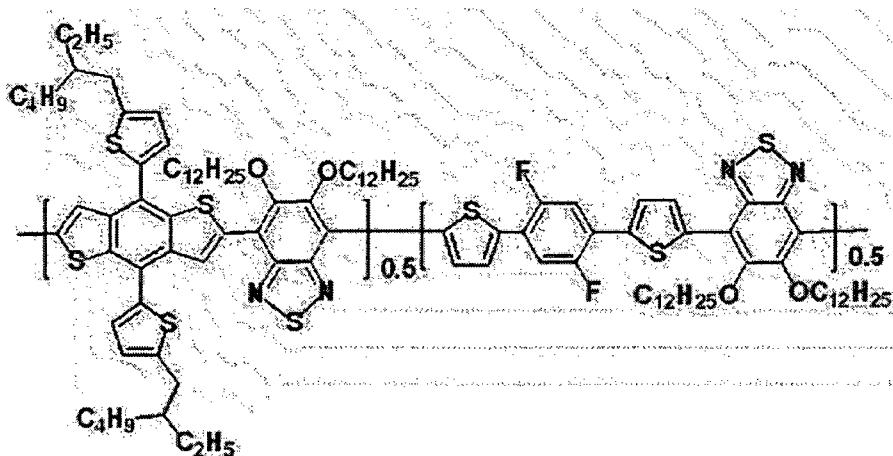
[319] 실험 예 8. 유기 태양전지의 제조-8

[320] 하기 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM을 1:1로 클로로벤젠(Chlorobenzene, CB)에 녹여 복합용액(composit solution)을 제조하였다. 이 때, 농도는 2.5 wt%로 조절하였으며, 유기 태양전지는 ITO/PEDOT:PSS/광활성층/AI의 구조로 하였다. ITO는 바타입(bar type)으로 1.5 \* 1.5 cm<sup>2</sup>가 코팅된 유리 기판은 증류수, 아세톤, 2-프로판올을 이용하여 초음파 세척하고, ITO 표면을 10 분 동안 오존 처리한 후 45 nm 두께로 PEDOT:PSS(AI4083)를 4000 rpm으로 40초간 스피드코팅하고, 235 °C에서 10 분 동안 열처리하였다. 광활성층의 코팅을 위해서는 중합체 PC<sub>61</sub>BM

복합용액을 각각 500rpm, 1,000 rpm, 1500 rpm 및 2,000 rpm으로 10초간 스픬코팅하여,  $3 \times 10^{-8}$  torr 진공 하에서 열 증발기(thermal evaporator)를 이용하여 100 nm 두께로 1 Å/s 속도로 Al을 증착하여 유기 태양전지를 제조하였다.

[321] [중합체 2]

[322]



[323] 도 7은 중합체 2의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.

[324] 실험 예 9. 유기 태양전지의 제조-9

[325] 상기 실험 예 8에서 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM을 1:2로 제조한 것을 제외하고는 실험 예 8과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[326] 실험 예 10. 유기 태양전지의 제조-10

[327] 상기 실험 예 8에서 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM을 1:3으로 제조한 것을 제외하고는 실험 예 8과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[328] 실험 예 11. 유기 태양전지의 제조-11

[329] 상기 실험 예 8에서 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM을 1:2로 제조하고, 농도를 4.0 wt%로 조절한 것을 제외하고는 실험 예 8과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[330] 상기 실험 예 8 내지 11에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100 mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 3에 그 결과를 나타내었다.

[331] [표3]

	활성층		V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>SC</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	PCE <sub>avg</sub> (%)
	중합체: PC <sub>61</sub> BM	rpm					
실험 예 8	1:1(2.5 wt%)	500	0.713	4.866	0.357	1.24	1.37 ± 0.12
			0.718	5.485	0.373	1.47	
			0.724	5.182	0.374	1.40	
		1000	0.724	6.061	0.401	1.76	1.85 ± 0.08
			0.714	6.632	0.403	1.91	
			0.720	6.608	0.395	1.88	
		1500	0.742	7.523	0.393	2.2	2.27 ± 0.07
			0.732	8.023	0.395	2.32	
			0.731	8.034	0.390	2.29	
		2000	0.746	8.688	0.400	2.6	2.38 ± 0.25
			0.726	8.457	0.396	2.43	
			0.698	8.271	0.364	2.1	
실험 예 9	1:2(2.5 wt%)	500	0.768	3.974	0.458	1.4	1.31 ± 0.12
			0.781	3.56	0.441	1.22	
		1000	0.765	5.293	0.588	2.29	2.21 ± 0.1
			0.748	5.04	0.557	2.1	
			0.761	5.298	0.554	2.23	
		1500	0.794	7.329	0.588	3.42	3.39 ± 0.15
			0.78	7.151	0.58	3.23	
			0.793	7.474	0.595	3.52	
		2000	0.797	7.289	0.587	3.41	3.26 ± 0.15
			0.786	6.815	0.58	3.1	
			0.793	6.902	0.597	3.27	

실험 예 10	1:3(2.5 wt%)	500	0.782	5.022	0.511	2.01	2.09 ± 0.18
			0.763	4.623	0.555	1.96	
			0.791	5.766	0.503	2.29	
		1000	0.8	4.835	0.6	2.32	2.46 ± 0.38
			0.81	5.633	0.637	2.90	
			0.793	4.567	0.599	2.17	
		1500	0.808	5.694	0.633	2.91	2.9 ± 0.25
			0.798	5.959	0.606	2.88	
		2000	0.812	0.633	0.616	2.87	2.96 ± 0.42
			0.805	0.606	0.605	3.05	
실험 예 11	1:2(4.0 wt%)	500	0.797	5.59	0.448	2	2.01 ± 0.19
			0.791	6.102	0.455	2.19	
			0.79	5.107	0.452	1.82	
		1000	0.758	6.508	0.522	2.57	2.55 ± 0.03
			0.753	6.335	0.529	2.53	
		1500	0.797	6.603	0.568	2.99	3.17 ± 0.2
			0.784	6.929	0.575	3.12	
			0.795	7.602	0.562	3.39	
		2000	0.788	6.664	0.574	3.02	3.02

[332] **실험 예 12. 유기 태양전지의 제조-12**

[333] 상기 실험 예 9에서 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM 을 1500 rpm 으로 스핀코팅한 후, 80 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 9와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[334] **실험 예 13. 유기 태양전지의 제조-13**

[335] 상기 실험 예 9에서 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM 을 2000 rpm 으로 스핀코팅한 후, 100 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 9와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[336] **실험 예 14. 유기 태양전지의 제조-14**

[337] 상기 실험 예 11에서 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM 을 1500 rpm 으로 스핀코팅한 후, 120 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 11과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[338] **실험 예 15. 유기 태양전지의 제조-15**

[339] 상기 실험 예 11에서 중합체 2와 PC<sub>61</sub>BM 을 2000 rpm 으로 스핀코팅한 후, 140

°C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 11과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[340] 상기 실험 예 12 내지 15에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100 mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 4에 그 결과를 나타내었다.

[341] [표4]

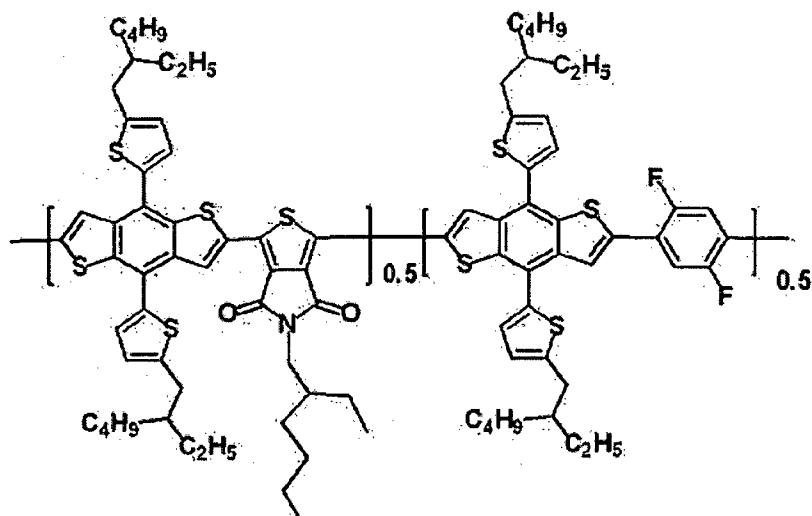
	활성층		V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	PCE <sub>avg</sub> (%)
	rpm	어닐링(°C)					
실험 예 12	1500	80	0.863	7.321	0.592	3.74	3.63 ± 0.14
			0.849	7.002	0.583	3.47	
			0.858	7.244	0.591	3.67	
실험 예 13	2000	100	0.867	6.883	0.589	3.52	3.33 ± 0.16
			0.856	6.358	0.59	3.21	
			0.859	6.497	0.584	3.26	
실험 예 14	1500	120	0.849	6.045	0.565	2.9	3.03 ± 0.13
			0.841	6.297	0.569	3.01	
			0.842	6.832	0.55	3.16	
실험 예 15	2000	140	0.843	5.959	0.552	2.77	2.77

[342] 실험 예 16. 유기 태양전지의 제조-16

[343] 상기 제조 예에서 제조한 하기 중합체 3과 PC<sub>61</sub>BM을 1:2로 클로로벤젠(Chlorobenzene, CB)에 녹여 복합 용액(composit solution)을 제조하였다. 이때, 농도는 2.5 wt%로 조절하였으며, 유기 태양전지는 ITO/PEDOT:PSS/광활성층/AI의 구조로 하였다. ITO는 바타입(bar type)으로 1.5 \* 1.5 cm<sup>2</sup>가 코팅된 유리 기판은 증류수, 아세톤, 2-프로판올을 이용하여 초음파 세척하고, ITO 표면을 10 분 동안 오존 처리한 후 45 nm 두께로 PEDOT:PSS(AI4083)를 4000 rpm으로 40초간 스판코팅하고, 235 °C에서 10 분 동안 열처리하였다. 광활성층의 코팅을 위해서는 중합체 PC<sub>61</sub>BM 복합용액을 각각 500rpm, 1,000 rpm, 1500 rpm 및 2,000 rpm으로 10초간 스판코팅하여, 3x10<sup>-8</sup> torr 진공 하에서 열 증발기(thermal evaporator)를 이용하여 100 nm 두께로 1 Å/s 속도로 Al을 증착하여 유기 태양전지를 제조하였다.

[344] [중합체 3]

[345]



[346] 도 8은 중합체 3의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.

[347] 중합체 3의 물성은 하기와 같다.

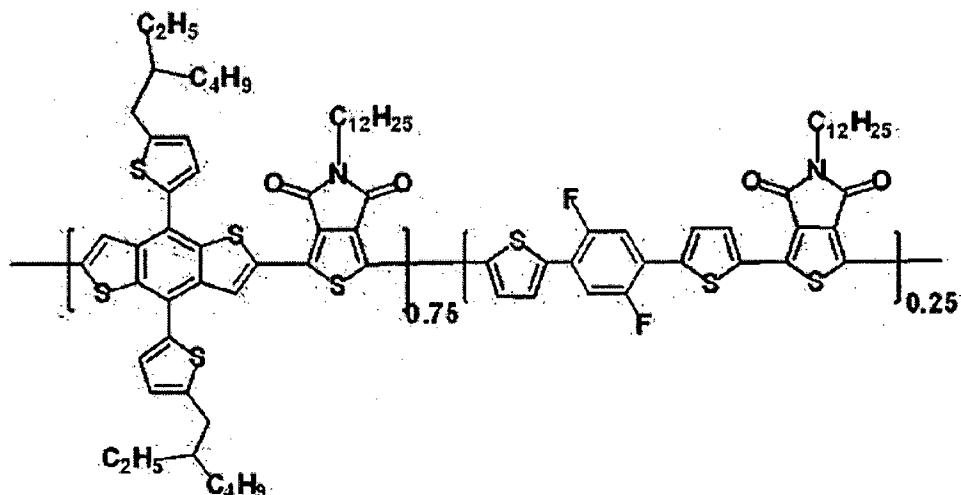
[348]

LUMO	HOMO	Band gap	Mn	Mw	PDI
3.54	5.49	1.95 (f) 1.96 (s)	69280	96221	1.38

[349] 실험 예 17. 유기 태양전지의 제조-17[350] 상기 실험 예 16에서 중합체 3 대신 하기 중합체 4와 PC<sub>61</sub>BM 을 1:2로 제조하고, 농도를 4 wt%로 조절한 것을 제외하고는 실험 예 16과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[351] [중합체 4]

[352]



[353] 도 9는 중합체 4의 UV-vis 흡수 펙트럼을 나타낸 도이다.

[354] 중합체 4의 물성은 하기와 같다.

[355]

LUMO	HOMO	Band gap	Mn	Mw	PDI
3.69	5.58	1.89(f)	36854	55640	1.51

[356] 상기 실험 예 16 및 17에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100 mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 5에 그 결과를 나타내었다.

[357] [표5]

	활성층		V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	PCE <sub>avg</sub> (%)
	중합체: PC <sub>61</sub> BM	rpm					
실험 예 16	1:2(2.5 wt%)	500	0.951	11.12	0.503	5.319	4.92
			0.945	9.784	0.488	4.513	
		1000	0.975	8.588	0.622	5.217	5.05
			0.967	8.969	0.609	5.282	
			0.95	7.919	0.618	4.65	
		1500	0.952	9.058	0.622	5.372	5.4
			0.957	9.142	0.619	5.421	
		2000	0.946	8.684	0.609	5.005	4.96
			0.942	8.52	0.61	4.897	
			0.946	8.641	0.607	4.966	
실험 예 17	1:2(4 wt%)	1000	0.918	11.72	0.61	6.56	6.75 ± 0.2
			0.915	11.303	0.643	6.65	
			0.915	12.17	0.631	7.02	
		700	0.914	12.146	0.585	6.49	6.57 ± 0.17
			0.911	12.372	0.605	6.82	
			0.908	12.103	0.584	6.41	
		1500	0.9	9.319	0.639	5.35	5.56 ± 0.14
			0.91	9.244	0.674	5.67	
			0.91	9.334	0.663	5.64	

[358] 실험 예 18. 유기 태양전지의 제조-18

[359] 상기 실험 예 17에서 하기 중합체 4와 PC<sub>71</sub>BM의 비율을 1:1.5로 제조한

복합용액에 다이페닐에테르(DPE:diphenylether)을 3 vol% 첨가한 것을 제외하고, 실험예 17과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[360] [표6]

	활성층		V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	Cal.J <sub>sc</sub>
	중합체: PC <sub>61</sub> BM	첨가제					
실험예 18	1:1.5	-	0.87	10.01	0.69	6.01	9.81
		DPE	0.88	14.51	0.65	8.25	14.03
		DPE	0.87	12.39	0.72	7.68	11.52

[361] 도 13은 실험예 18에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.

[362] 도 14는 실험예 18의 유기 태양 전지의 입사 광전 변환 효율을 나타낸 도이다.

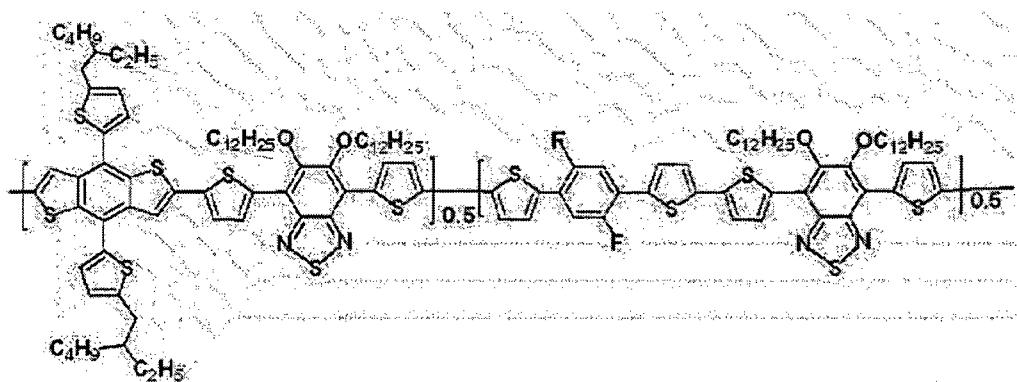
[363] 도 13 및 14에서 thick은 광활성층을 230nm의 두께로 코팅 한 것을 의미하며, thin은 광활성층을 100 내지 120nm의 두께로 코팅한 것을 의미한다.

#### 실험예 19. 유기 태양전지의 제조-19

[365] 하기 중합체 5와 PC<sub>61</sub>BM을 1:3으로 클로로벤젠(Clorobenzene, CB)에 녹여 복합용액(composit solution)을 제조하였다. 이 때, 농도는 2.5 wt%로 조절하였으며, 유기 태양전지는 ITO/PEDOT:PSS/광활성층/Al의 구조로 하였다. ITO는 바타입(bar type)으로 1.5 \* 1.5 cm<sup>2</sup>가 코팅된 유리 기판은 증류수, 아세톤, 2-프로판올을 이용하여 초음파 세척하고, ITO 표면을 10 분 동안 오존 처리한 후 45 nm 두께로 PEDOT:PSS(AI4083)를 4000 rpm으로 40초간 스픬코팅하고, 235 °C에서 10 분 동안 열처리하였다. 광활성층의 코팅을 위해서는 중합체 PC<sub>61</sub>BM 복합용액을 각각 500rpm, 1,000 rpm, 1500 rpm 및 2,000 rpm으로 10초간 스픬코팅하여, 3x10<sup>-8</sup> torr 진공 하에서 열 증발기(thermal evaporator)를 이용하여 100 nm 두께로 1 Å/s 속도로 Al을 증착하여 유기 태양전지를 제조하였다.

[366] [중합체 5]

[367]



[368] 상기 중합체 5의 물성은 하기와 같다.

[369]

LUMO	HOMO	Band gap	Mn	Mw	PDI
3.58	5.37	1.81(s) 1.79(f)	31298	52414	1.67

[370] 실험 예 20. 유기 태양전지의 제조-20

[371] 상기 실험 예 19에서 중합체 5와 PC<sub>61</sub>BM 을 1:2로 제조한 것을 제외하고는 실험 예 19와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[372] 실험 예 21. 유기 태양전지의 제조-21

[373] 상기 실험 예 19에서 중합체 5와 PC<sub>61</sub>BM 을 1:3으로 제조한 것을 제외하고는 실험 예 19와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[374] 실험 예 22. 유기 태양전지의 제조-22

[375] 상기 실험 예 19에서 중합체 5와 PC<sub>61</sub>BM 을 1:2로 제조하고, 농도를 4 wt%로 조절한 것을 제외하고는 실험 예 19와 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[376] 상기 실험 예 19 내지 22에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100 mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 7에 그 결과를 나타내었다.

[377] [표7]

	활성총		V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>SC</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	PCE <sub>avg</sub> (%)
	중합체: PC <sub>61</sub>	BM					
실험 예 19	1:1(2.5 wt%)	700	0.663	7.876	0.374	1.95	1.92 ± 0.04
			0.658	7.506	0.38	1.88	
			0.657	7.838	0.377	1.94	
		1000	0.659	7.878	0.45	2.34	2.47 ± 0.13
			0.654	8.289	0.481	2.61	
			0.654	8.294	0.455	2.47	
		1500	0.673	8.542	0.488	2.8	2.86 ± 0.13
			0.67	9.172	0.49	3.01	
			0.665	9.128	0.456	2.77	
		2000	0.681	9.846	0.49	3.29	3.31 ± 0.01
			0.676	9.774	0.506	3.34	
			0.118	8.605	0.263	0.27	
실험 예 20	1:2(2.5 wt%)	700	0.649	9.84	0.492	3.15	3.26 ± 0.13
			0.645	10.272	0.489	3.24	
			0.643	10.621	0.499	3.41	
		1000	0.644	8.754	0.538	3.03	3.01 ± 0.07
			0.64	8.987	0.532	3.06	
			0.638	9.176	0.501	2.93	
		1500	0.661	9.532	0.604	3.8	3.97 ± 0.14
			0.659	9.897	0.621	4.05	
			0.657	9.954	0.618	4.04	
		2000	0.668	9.813	0.648	4.25	4.01 ± 0.23
			0.663	9.274	0.651	4.00	
			0.663	8.889	0.642	3.78	

실험 예 21	1:3(2.5 wt%)	700	0.649	8.979	0.533	3.11	3.19 ± 0.07
			0.644	9.358	0.533	3.21	
			0.643	9.251	0.547	3.25	
		1000	0.646	8.232	0.597	3.17	3.12 ± 0.07
			0.641	8.177	0.602	3.15	
			0.64	7.783	0.61	3.04	
		1500	0.662	8.939	0.655	3.87	3.83 ± 0.05
			0.658	8.674	0.673	3.84	
			0.655	8.73	0.659	3.77	
		2000	0.665	9.061	0.678	4.09	3.7 ± 0.33
			0.658	7.812	0.692	3.56	
			0.658	7.684	0.684	3.46	
실험 예 22	1:2(4 wt%)	700	0.634	9.884	0.436	2.73	2.75 ± 0.03
			0.63	10.23	0.424	2.73	
			0.628	10.457	0.424	2.78	
		1000	0.64	11.141	0.455	3.25	3.2 ± 0.16
			0.635	11.215	0.467	3.33	
			0.63	10.503	0.456	3.02	
		1500	0.643	10.449	0.459	3.08	3.07 ± 0.02
			0.634	10.217	0.47	3.05	
			0.635	10.382	0.469	3.09	
		2000	0.637	9.352	0.485	2.89	2.93 ± 0.05
			0.63	9.567	0.496	2.99	

[378] 도 15는 실험 예 19 내지 22에 따른 유기 태양 전지의 전압에 따른 전류 밀도를 나타낸 도이다.

#### 실험 예 23. 유기 태양전지의 제조-23

[380] 상기 실험 예 20에서 중합체 5와 PC<sub>61</sub>BM 을 1000 rpm 으로 스픬코팅한 후, 120 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 20과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

#### 실험 예 24. 유기 태양전지의 제조-24

[382] 상기 실험 예 20에서 중합체 5와 PC<sub>61</sub>BM 을 1500 rpm 으로 스픬코팅한 후, 100 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 20과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를

제조하였다.

[383] 실험 예 25. 유기 태양전지의 제조-25

[384] 상기 실험 예 20에서 중합체 5와 PC<sub>61</sub>BM 을 2000 rpm 으로 스핀코팅한 후, 80 °C로 열처리 한 것을 제외하고, 실험 예 20과 동일한 방법으로 유기 태양 전지를 제조하였다.

[385] 상기 실험 예 23 내지 25에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을 100 mW/cm<sup>2</sup>(AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 8에 그 결과를 나타내었다.

[386] [표8]

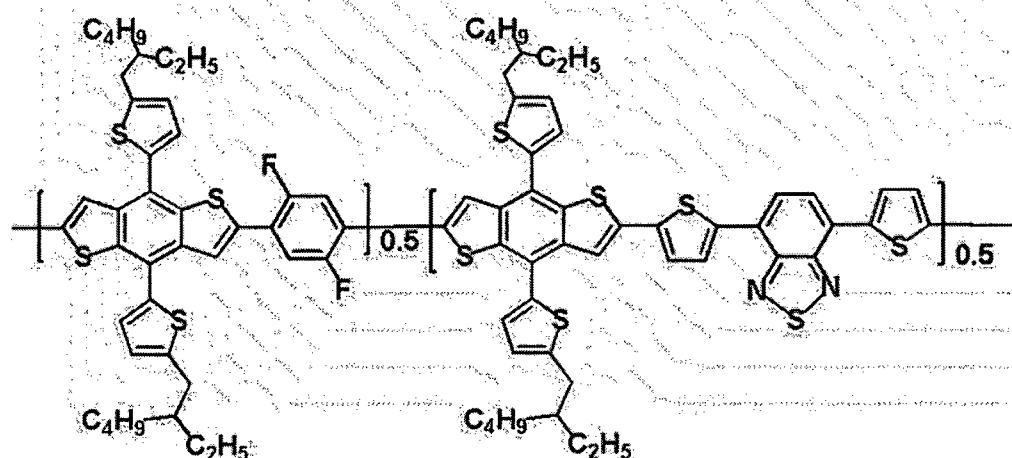
	활성층		V <sub>OC</sub> (V)	J <sub>SC</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	PCE(%)	PCE <sub>avg</sub> (%)
	rpm	어닐링(°C)					
실험 예 23	1000	120	0.696	7.293	0.556	2.82	2.85 ± 0.06
			0.693	7.495	0.56	2.91	
			0.69	7.575	0.537	2.81	
실험 예 24	1500	100	0.705	8.567	0.607	3.67	3.8 ± 0.12
			0.704	8.958	0.618	3.9	
			0.703	8.914	0.613	3.84	
실험 예 25	2000	80	0.7	9.138	0.644	4.12	3.9 ± 0.22
			0.698	8.647	0.647	3.9	
			0.698	8.263	0.638	3.68	

[387] 비교예 1. 유기 태양 전지의 제조

[388] 하기 중합체 6과 PC<sub>61</sub>BM 을 1:1로 클로로벤젠(Clorobenzene, CB)에 녹여 복합 용액(composit solution)을 제조하였다. 이 때, 농도는 2.5 wt%로 조절하였으며, 유기 태양전지는 ITO/PEDOT:PSS/광활성층/AI 의 구조로 하였다. ITO는 바타입(bar type)으로 1.5 \* 1.5 cm<sup>2</sup>가 코팅된 유리 기판은 중류수, 아세톤, 2-프로판올을 이용하여 초음파 세척하고, ITO 표면을 10 분 동안 오존 처리한 후 45 nm 두께로 PEDOT:PSS(AI4083)를 스핀코팅하여 235 °C에서 5 분 동안 열처리하였다. 광활성층의 코팅을 위해서는 중합체 PC<sub>61</sub>BM 복합용액을 10초간 스핀코팅하여, 3x10<sup>-8</sup> torr 진공 하에서 열 증발기(thermal evaporator)를 이용하여 100 nm 두께로 1 Å/s 속도로 Al 을 증착하여 유기 태양전지를 제조하였다.

[389] [중합체 6]

[390]



[391] 상기 비교예 1에서 제조된 유기 태양 전지의 광전변환특성을  $\text{mW}/\text{cm}^2$ (AM 1.5) 조건에서 측정하고, 하기 표 9에 그 결과를 나타내었다.

[392] [표9]

	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	FF (%)	PCE(%)
비교예 1	0.628	1.017	0.610	0.39

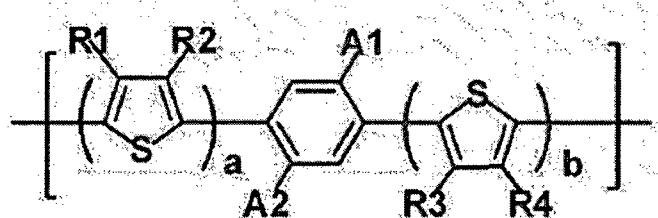
[393] 상기  $V_{oc}$ 는 개방전압을,  $J_{sc}$ 는 단락전류를, FF는 충전율(Fill factor)를, PCE는 에너지 변환 효율을 의미한다. 개방전압과 단락전류는 각각 전압-전류 밀도 곡선의 4사분면에서 X축과 Y축 절편이며, 이 두 값이 높을수록 태양전지의 효율은 바람직하게 높아진다. 또한 충전율(Fill factor)은 곡선 내부에 그릴 수 있는 직사각형의 넓이를 단락전류와 개방전압의 곱으로 나눈 값이다. 이 세 가지 값을 조사된 빛의 세기로 나누면 에너지 변환 효율을 구할 수 있으며, 높은 값일수록 바람직하다.

[394] 상기 표 9의 결과로 보아, 본 명세서의 일 실시상태에 따라, 상기 화학식 3으로 표시되는 제3 단위가 R20 및 R21을 포함하는 경우, 높은 개방 전압 및 높은 효율의 소자를 제공할 수 있는 것을 확인할 수 있다.

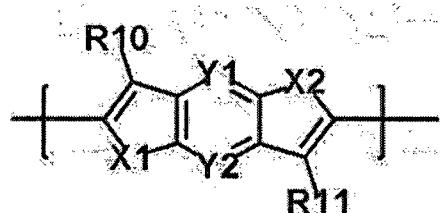
[395] 이는 R20, R21의 O원자; 화학식 1로 표시되는 제1 단위의 A1 및 A2; 및 화학식 2로 표시되는 제2 단위의 S 원자가 서로 상호작용을 통하여, 평면 구조(planar structure)를 형성하기 때문이다.

## 청구범위

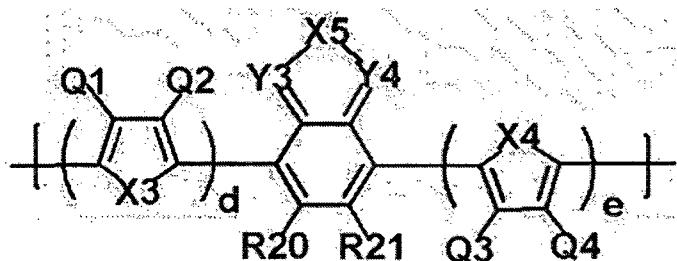
[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 제1 단위;  
 하기 화학식 2로 표시되는 제2 단위; 및  
 하기 화학식 3 또는 4로 표시되는 제3 단위를 포함하는 중합체:  
 [화학식 1]



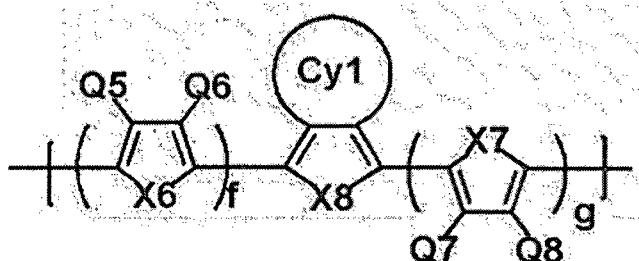
[화학식 2]



[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,

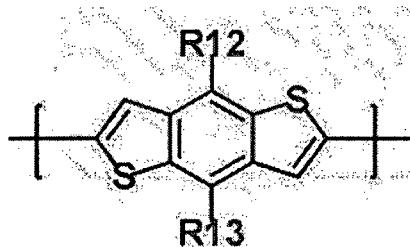
Cy1은 치환 또는 비치환된 탄화수소고리; 또는 치환 또는 비치환된

혜테로고리이고,  
 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 아릴술폭시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는  
 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된  
 혜테로고리이며,  
 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 화학식 2로 표시되는 제2 단위는 하기 화학식 2-1로 표시되는 것인  
 중합체:

## [화학식 2-1]



화학식 2-1에 있어서,

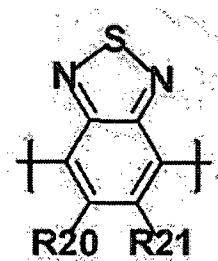
R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는  
 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된  
 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 혜테로고리이다.

## [청구항 3]

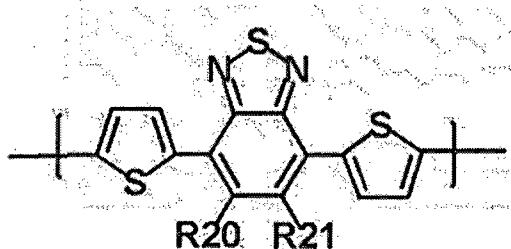
청구항 1에 있어서,

상기 제3 단위는 하기 화학식 3-1 내지 3-3 중 어느 하나로 표시되는 것인  
 중합체:

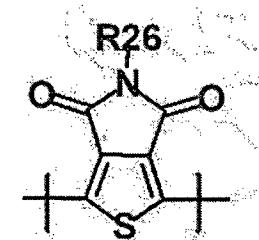
## [화학식 3-1]



[화학식 3-2]



[화학식 3-3]



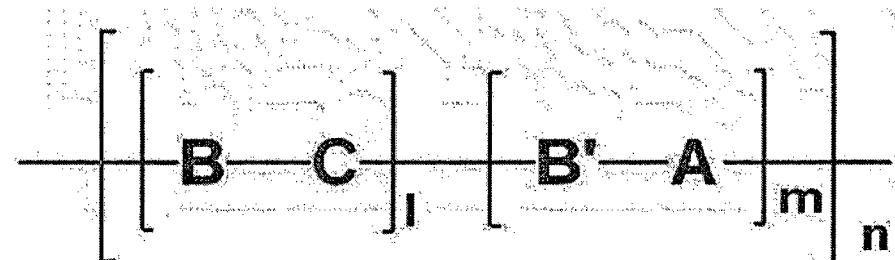
화학식 3-1 내지 3-3에 있어서,  
R20 및 R21은 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고,  
R26은 수소; 할로겐기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된  
알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된  
헤테로고리기이다.

## [청구항 4]

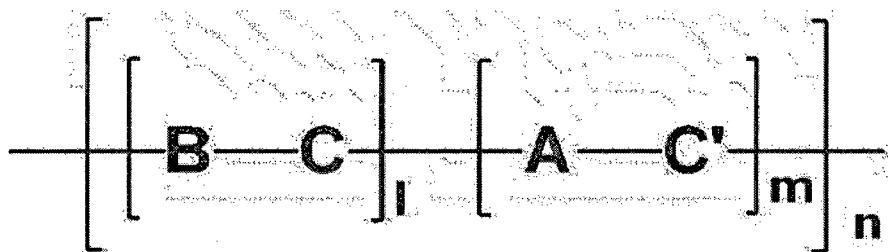
청구항 1에 있어서,

상기 중합체는 하기 화학식 5 또는 하기 화학식 6으로 표시되는 단위를  
포함하는 것인 중합체:

[화학식 5]



[화학식 6]



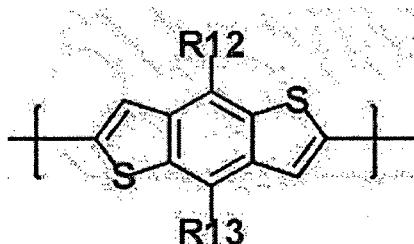
화학식 5 및 6에 있어서,  
 $l$ 은 몰분율로서,  $0 < l < 1$ 인 실수이며,  
 $m$ 은 몰분율로서,  $0 < m < 1$ 인 실수이고,  
 $l+m = 1$ 이며,  
A는 상기 화학식 1로 표시되는 제1 단위이고,  
B 및  $B'$ 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 상기 화학식 2로  
표시되는 제2 단위이며,  
C 및  $C'$ 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 상기 화학식 3  
또는 화학식 4로 표시되는 제3 단위이고,  
n은 단위의 반복수로서, 1 내지 10,000의 정수이다.

[청구항 5]

화학식 5의 B는 하기 화학식 2-1로 표시되는 제2 단위이고,

a 및 b는 0인 것인 중합체:

[화학식 2-1]



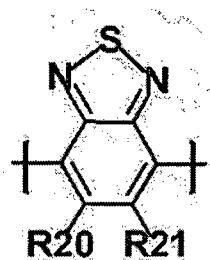
화학식 2-1에 있어서,  
R12 및 R13은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는  
비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된  
아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[청구항 6]

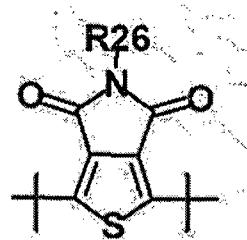
화학식 6의 C는 하기 화학식 3-1 또는 3-3으로 표시되는 제3 단위이고,

a 및 b는 각각 1 내지 3의 정수인 것인 중합체:

[화학식 3-1]



[화학식 3-3]



화학식 3-1 및 3-3에 있어서,

R20 및 R21은 상기 화학식 3에서 정의한 바와 동일하고,

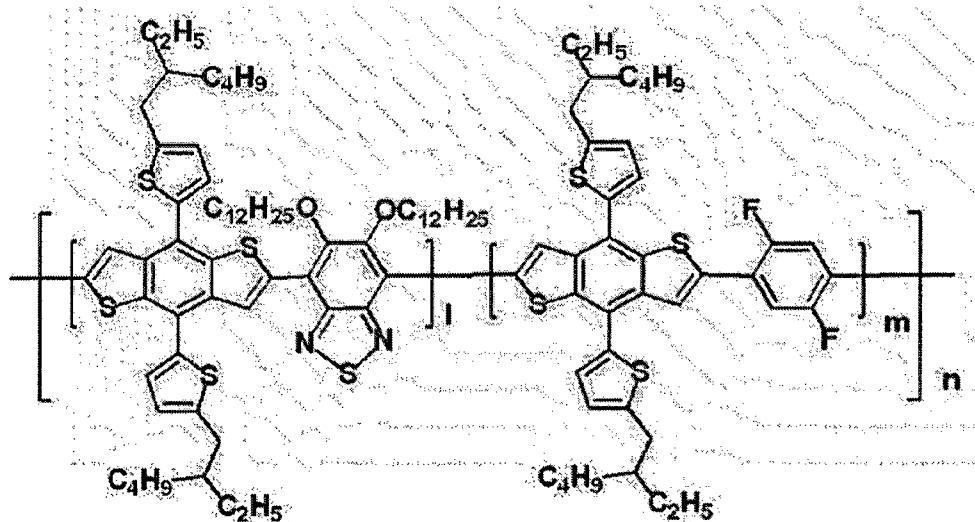
R26은 수소; 할로겐기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로고리기이다.

[청구항 7]

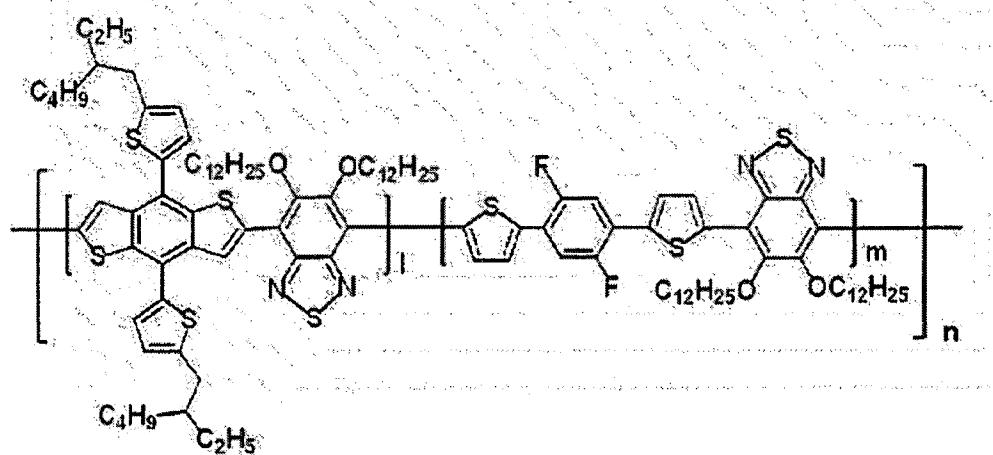
청구항 1에 있어서,

상기 중합체는 하기 화학식 7 내지 11 중 어느 하나로 표시되는 단위를 포함하는 것인 중합체:

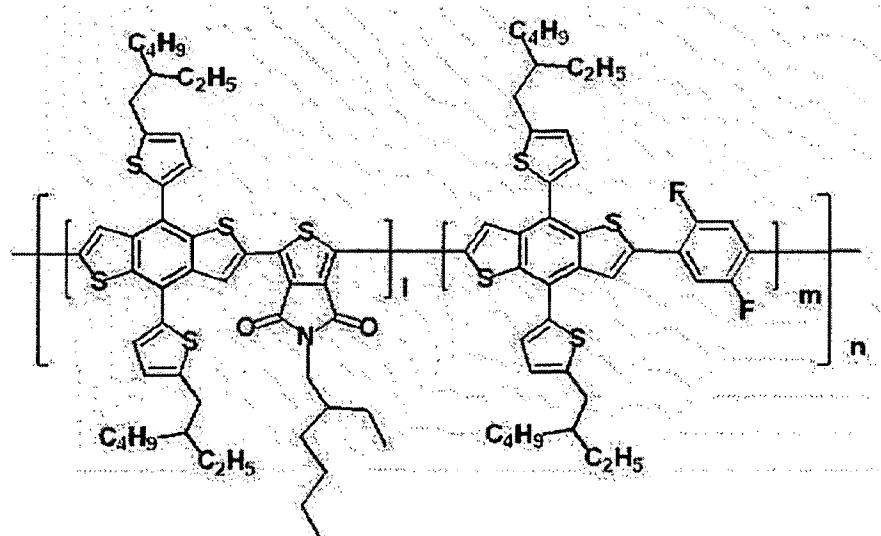
[화학식 7]



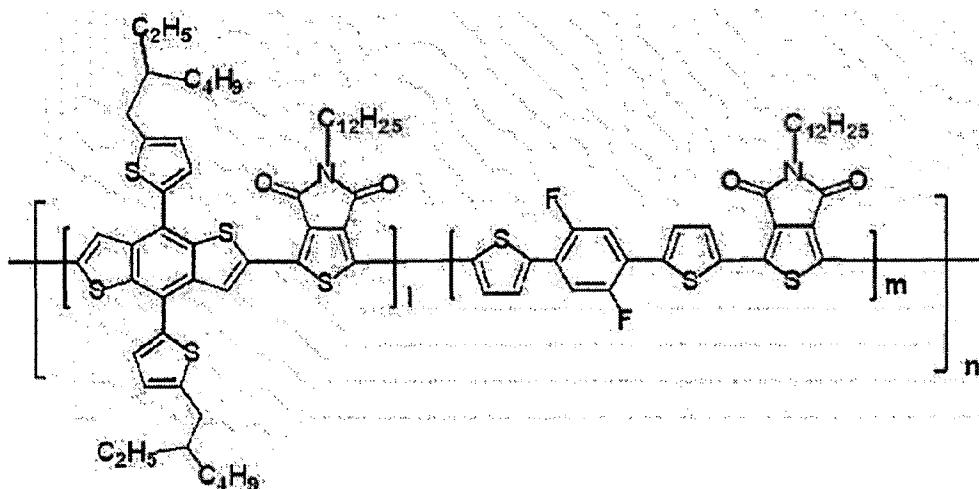
[화학식 8]



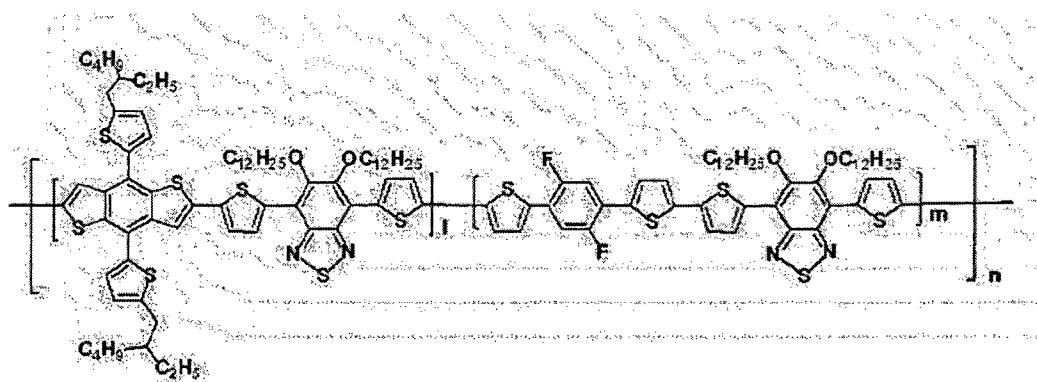
[화학식 9]



[화학식 10]



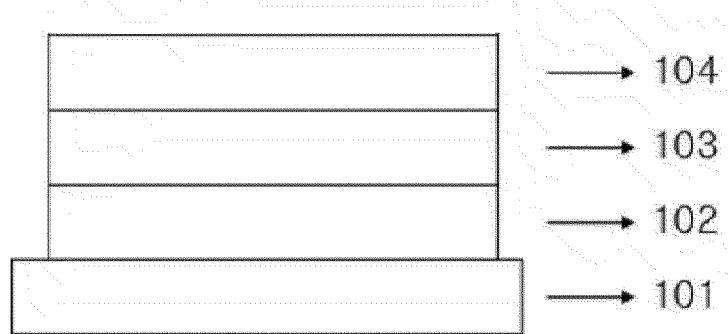
[화학식 11]



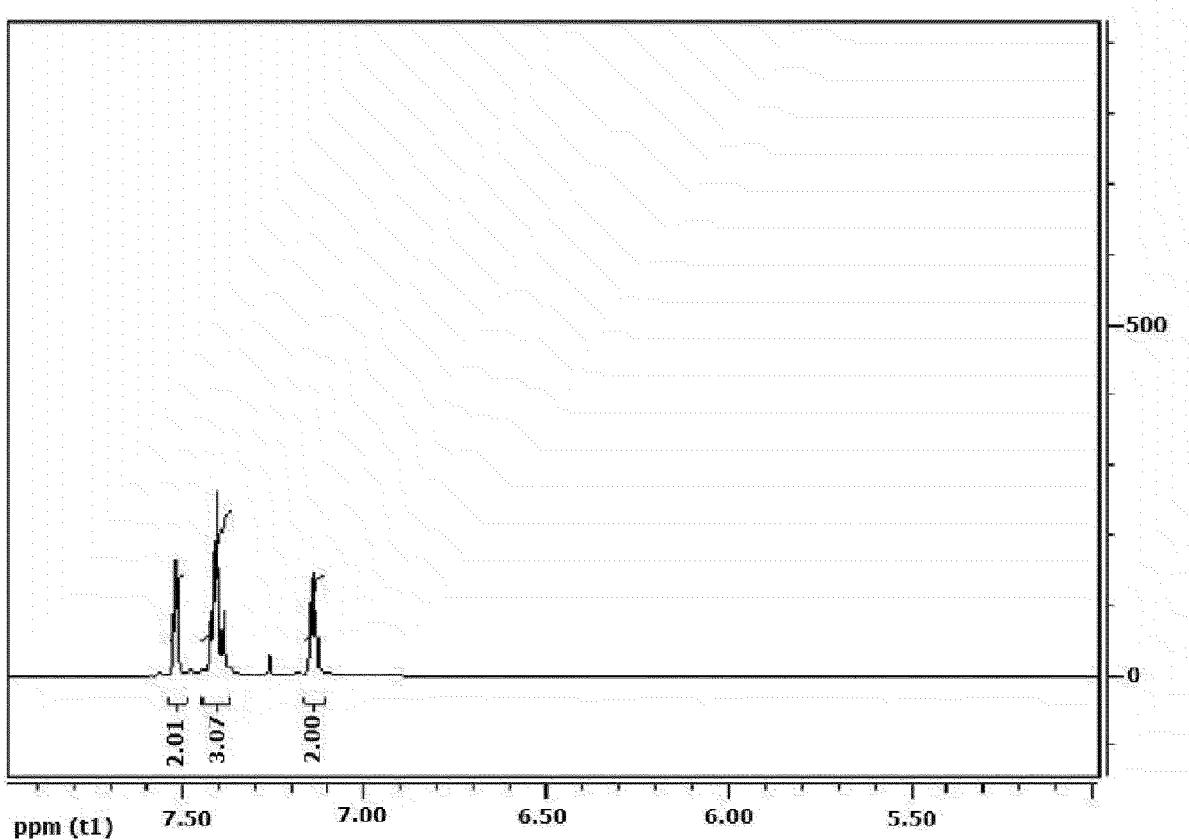
화학식 7 내지 11에 있어서,  
 1은 몰분율로서,  $0 < 1 < 1$ 인 실수이며,  
 m은 몰분율로서,  $0 < m < 1$ 인 실수이고,  
 $l+m = 1$ 이며,  
 n은 단위의 반복수로서, 1 내지 10,000의 정수이다.

- [청구항 8] 청구항 1에 있어서,  
 상기 중합체는 랜덤 중합체인 것인 중합체.
- [청구항 9] 청구항 1에 있어서,  
 상기 중합체의 수평균 분자량은 5,000 g/mol 내지 1,000,000 g/mol인 것인 중합체.
- [청구항 10] 청구항 1에 있어서,  
 상기 중합체의 분자량 분포는 1 내지 10인 것인 중합체.
- [청구항 11] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되고, 광활성층을 포함하는 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 10 중 어느 하나의 항에 따른 중합체를 포함하는 것인 유기 태양 전지.
- [청구항 12] 청구항 11에 있어서,  
 상기 광활성층은 전자 주개 및 전자 반개로 이루어진 군에서 선택되는 1 또는 2 이상을 포함하고,  
 상기 전자 주개는 상기 중합체를 포함하는 것인 유기 태양 전지.
- [청구항 13] 청구항 12에 있어서,  
 상기 전자 주개 및 전자 반개는 별크 헤테로 정션(BHJ)을 구성하는 것인 유기 태양 전지.
- [청구항 14] 청구항 11에 있어서,  
 상기 광활성층은 n형 유기물층 및 p형 유기물층을 포함하는 이층 박막(bilayer)구조이며,  
 상기 p형 유기물층은 상기 중합체를 포함하는 것인 유기 태양 전지.

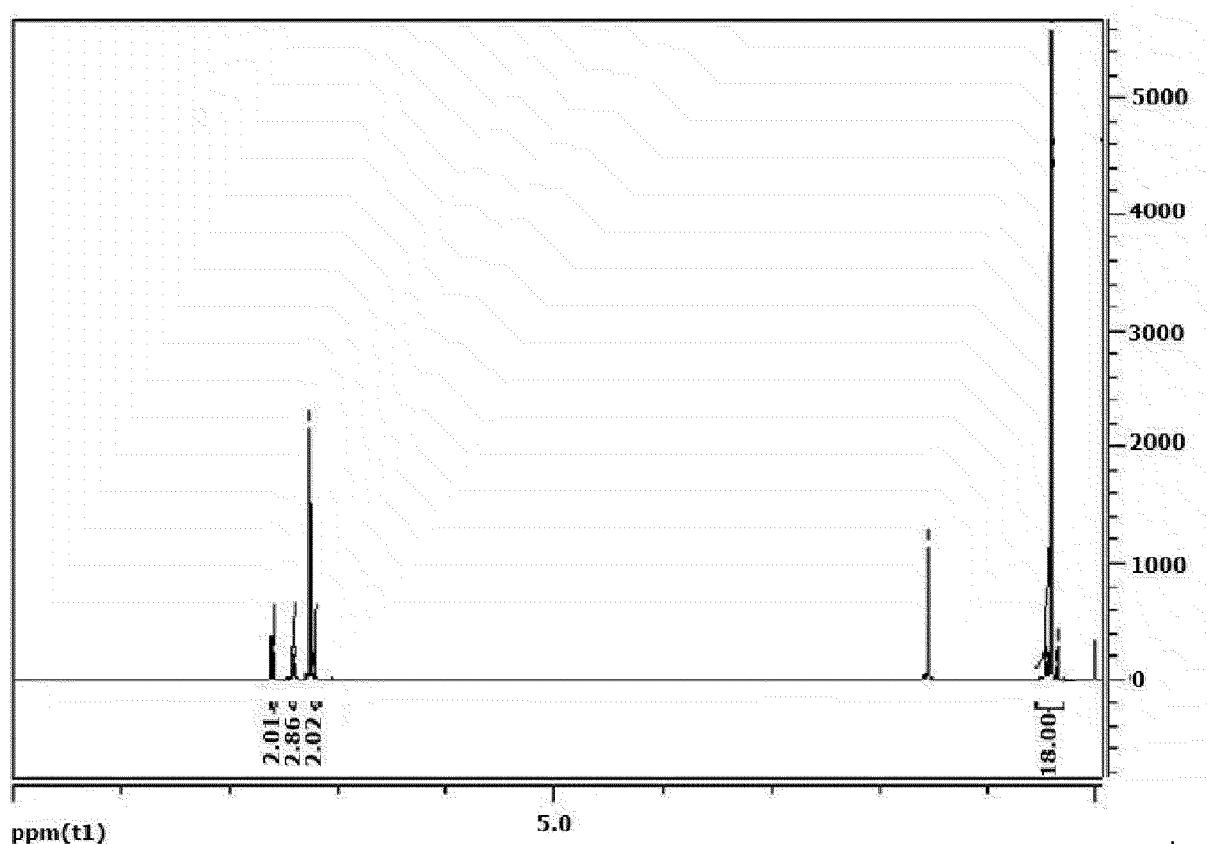
[도1]



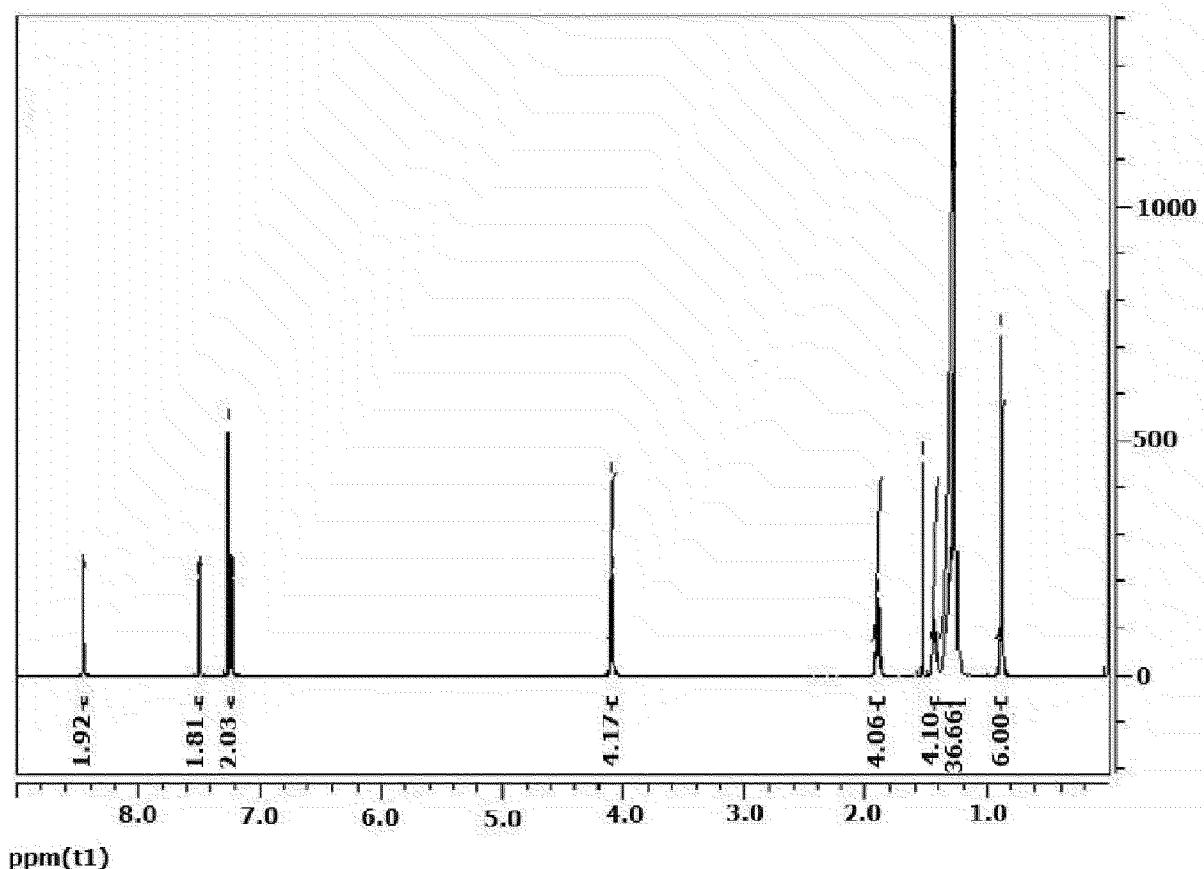
[도2]



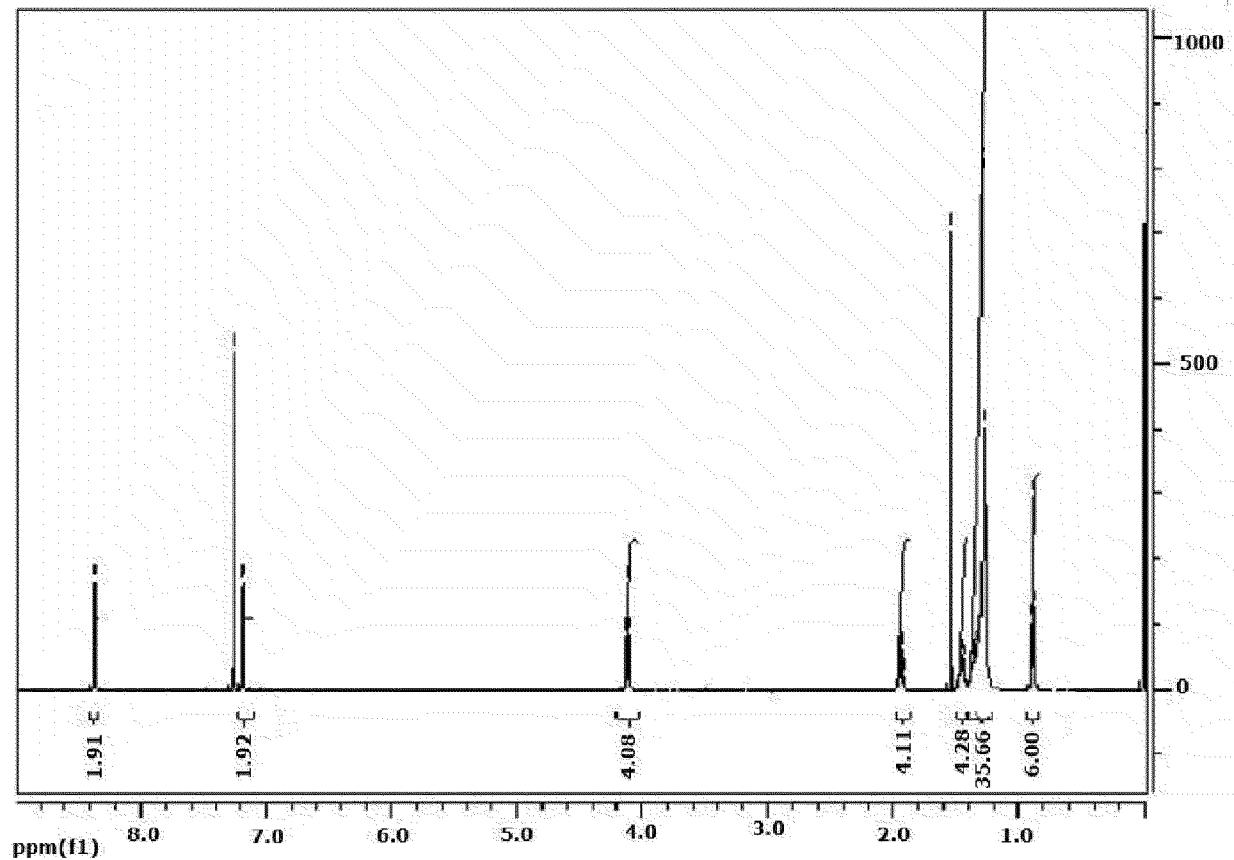
[도3]



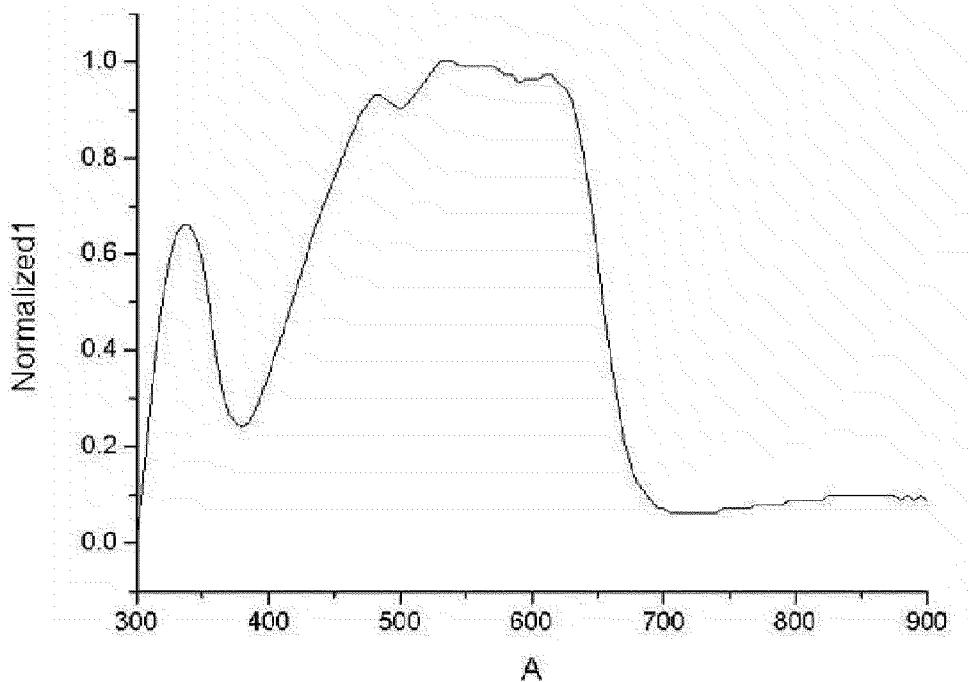
[도4]



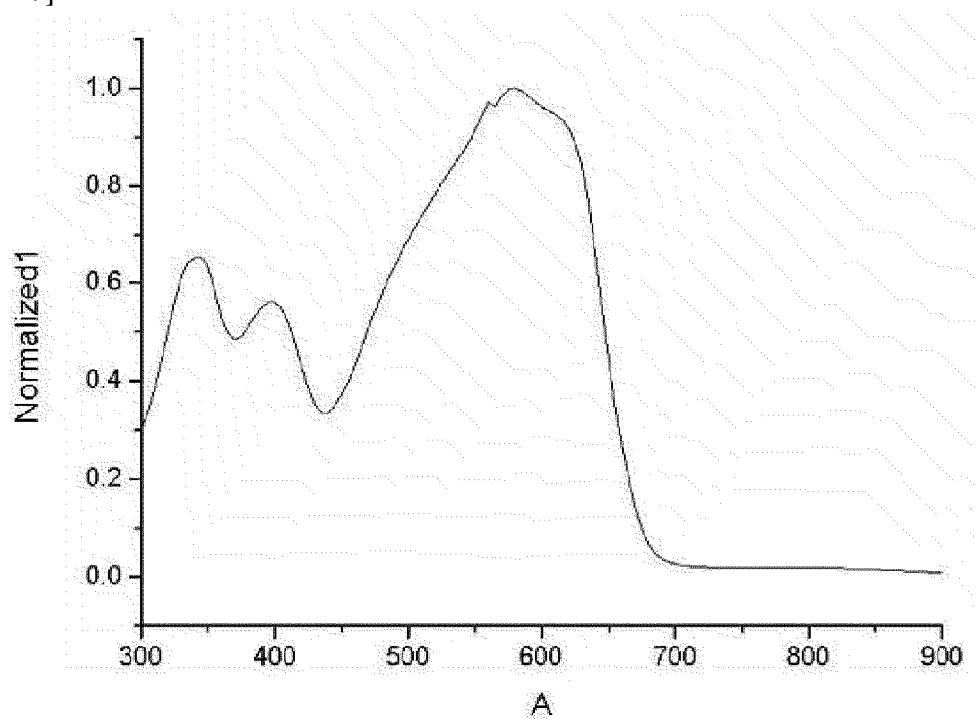
[도5]



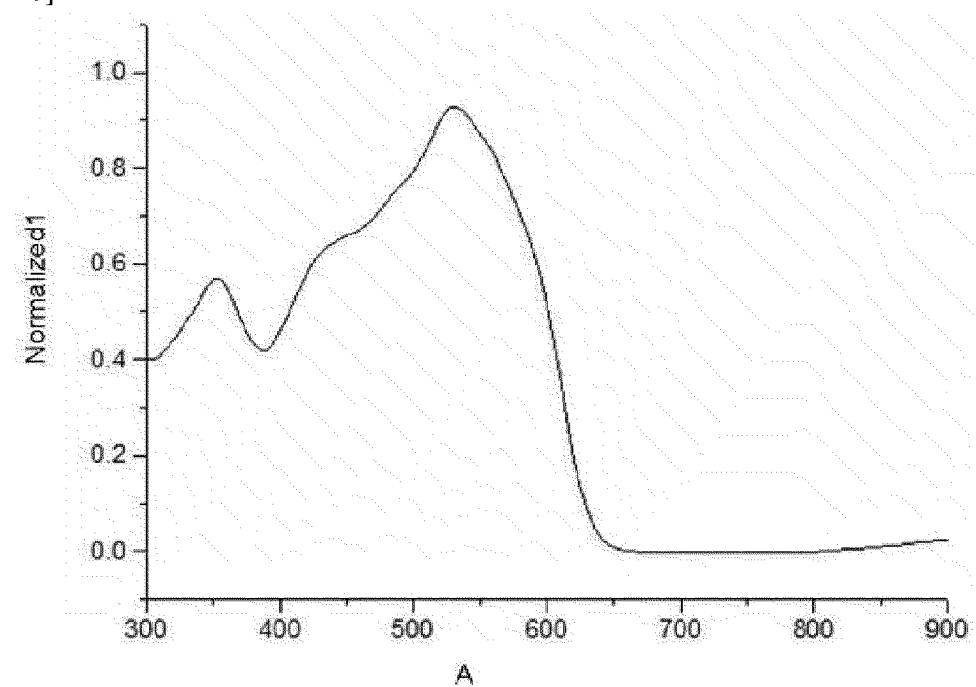
[도6]



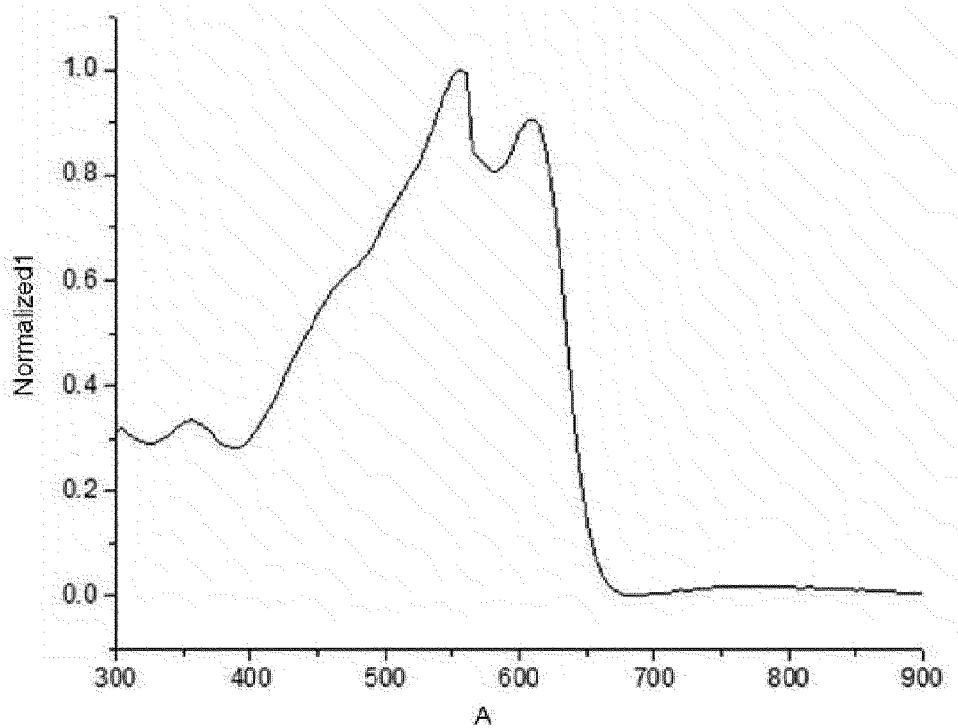
[도7]



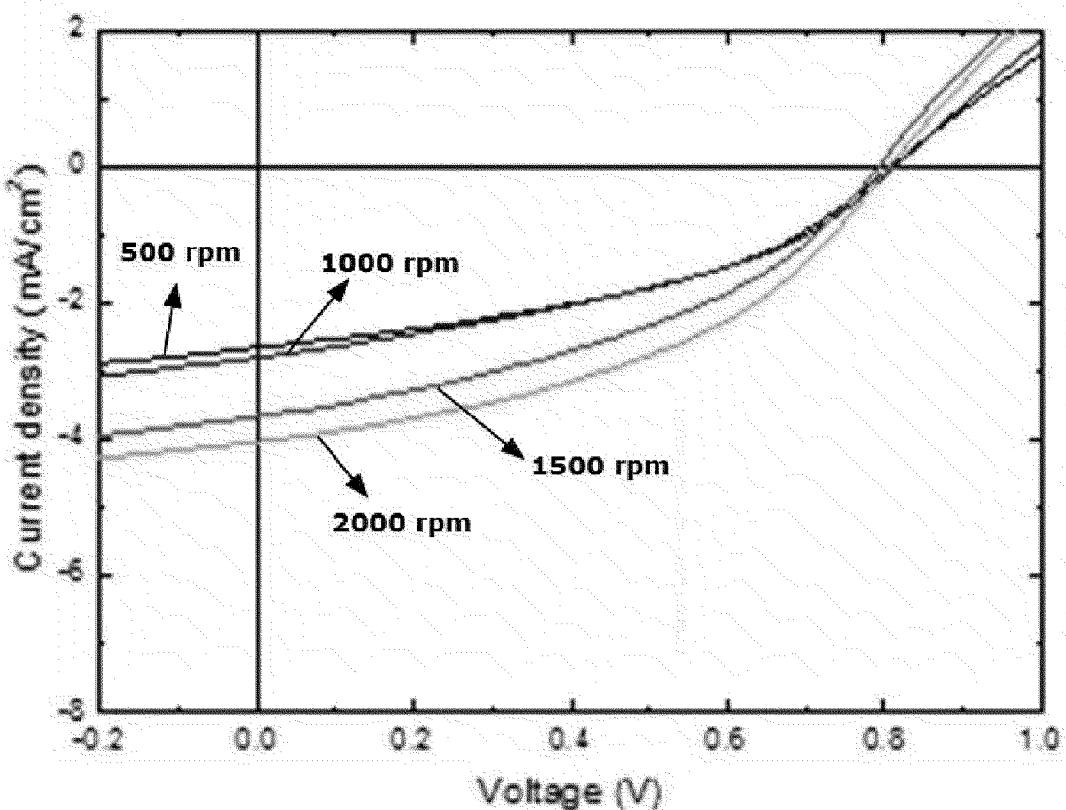
[도8]



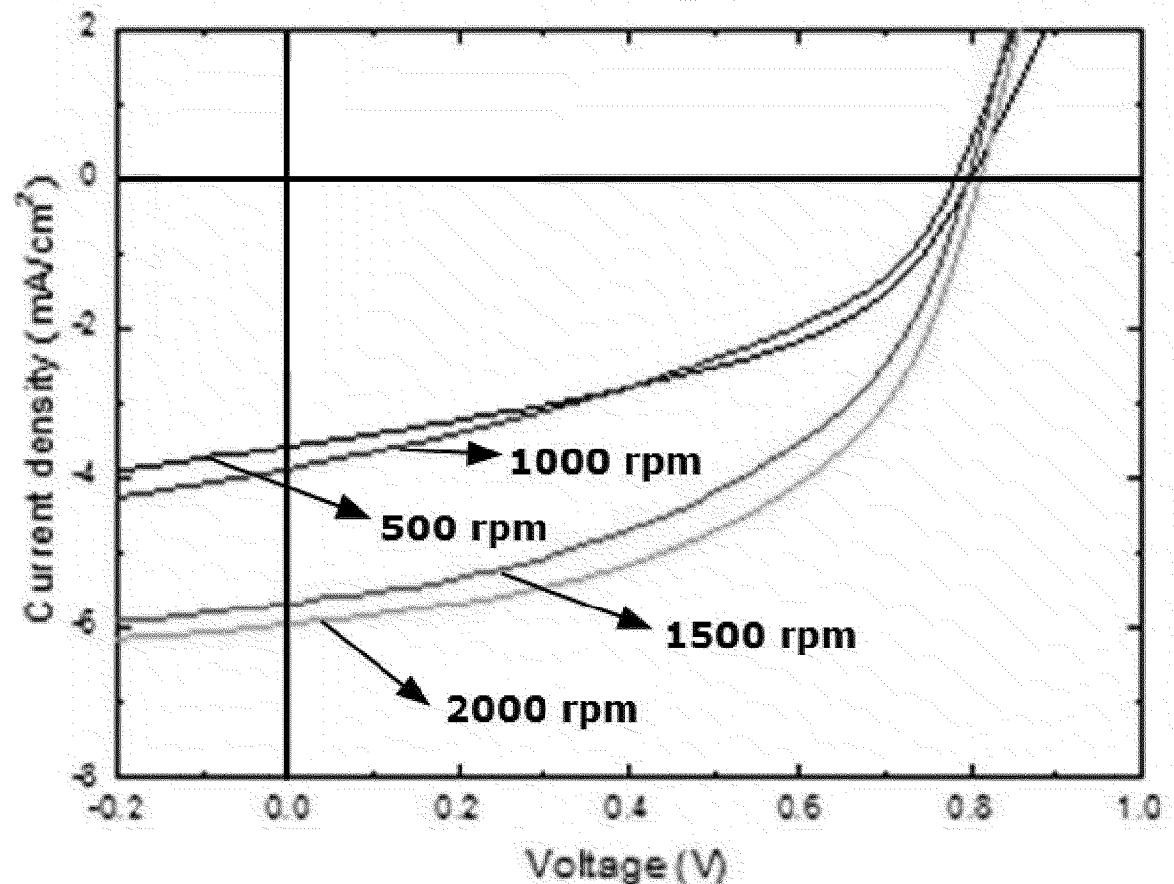
[도9]



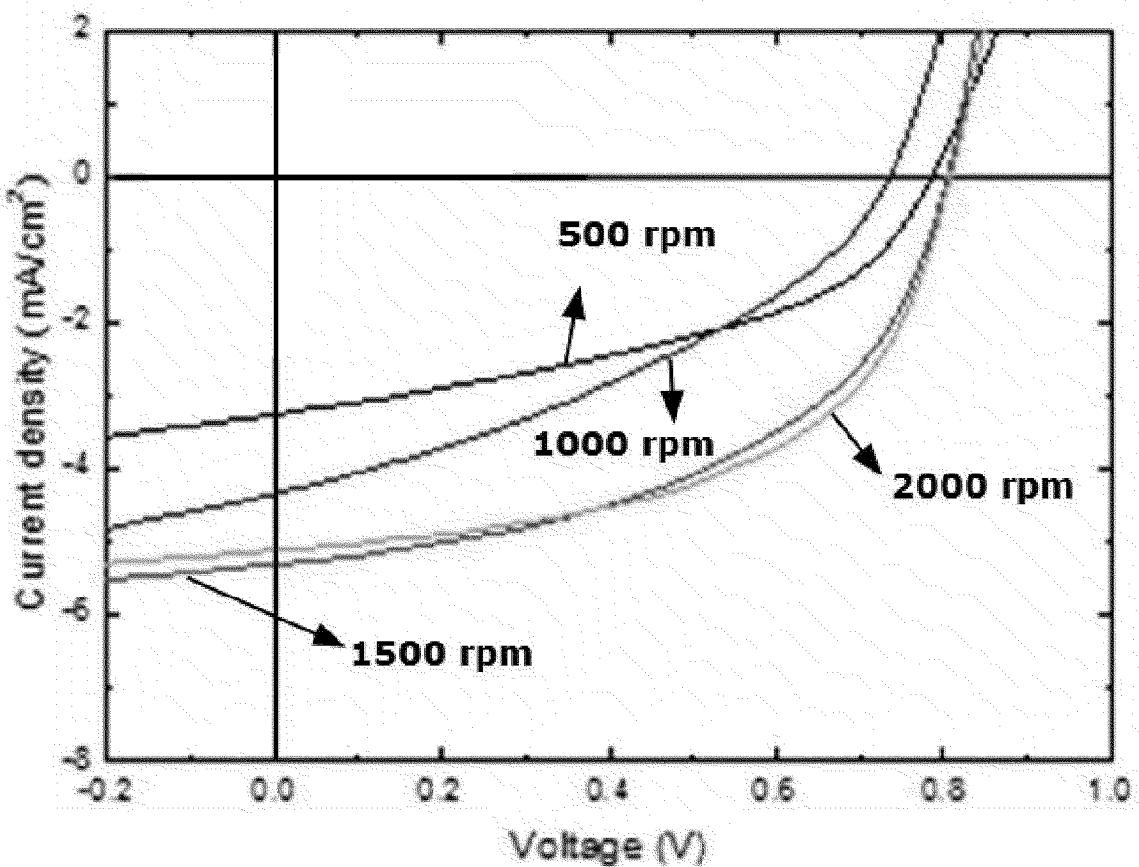
[도10]



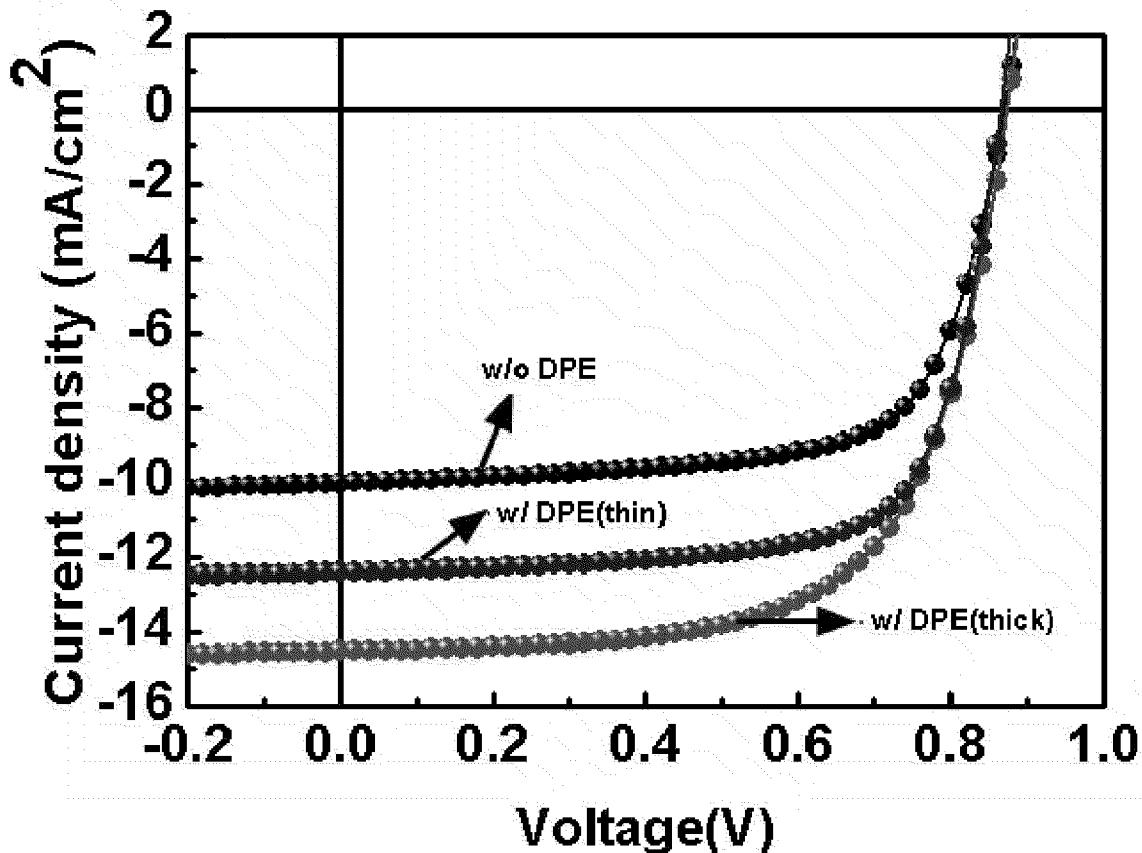
[도11]



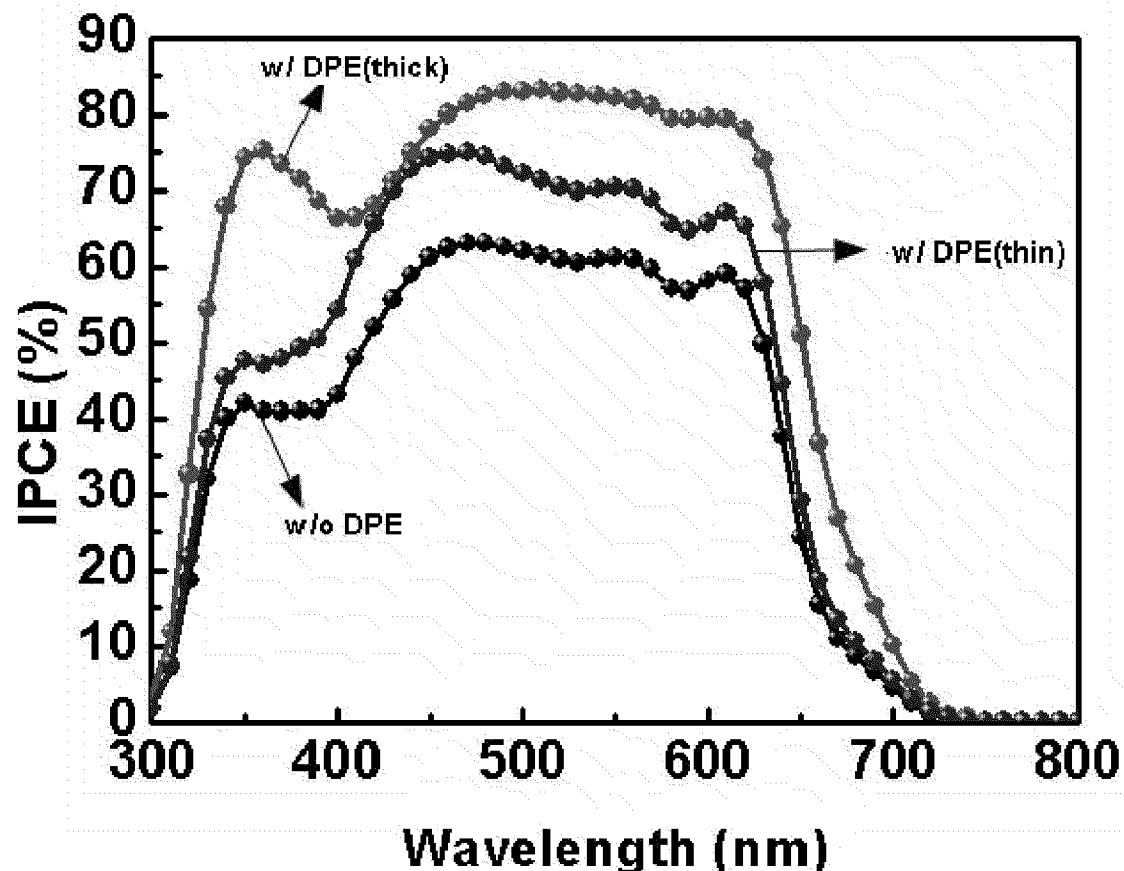
[도12]



[도13]



[도14]



[도15]

