

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2020-523444

(P2020-523444A)

(43) 公表日 令和2年8月6日(2020.8.6)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C09K 11/08 (2006.01)	C09K 11/08 G	3K107
C09K 11/70 (2006.01)	C09K 11/70 ZYW	4H001
C09K 11/88 (2006.01)	C09K 11/88	4J002
C08K 3/11 (2018.01)	C08K 3/11	
C08K 3/105 (2018.01)	C08K 3/105	

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 34 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2019-567741 (P2019-567741)
 (86) (22) 出願日 平成30年6月5日 (2018.6.5)
 (85) 翻訳文提出日 令和2年2月5日 (2020.2.5)
 (86) 国際出願番号 PCT/EP2018/064684
 (87) 国際公開番号 W02018/224459
 (87) 国際公開日 平成30年12月13日 (2018.12.13)
 (31) 優先権主張番号 17175028.4
 (32) 優先日 平成29年6月8日 (2017.6.8)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 欧州特許庁 (EP)

(71) 出願人 591032596
 メルク パテント ゲゼルシャフト ミッ
 ト ベシュレンクテル ハフツング
 Merck Patent Gesell
 schaft mit beschrae
 nkter Haftung
 ドイツ連邦共和国 デー-64293 ダ
 ルムシュタット フランクフルター シュ
 トラーセ 250
 Frankfurter Str. 25
 0, D-64293 Darmstadt
 , Federal Republic o
 f Germany
 (74) 代理人 100102842
 弁理士 葛和 清司

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 チオール官能性の表面配位子を有する半導体性発光ナノ粒子を含む組成物

(57) 【要約】

本発明は、ナノ粒子を含む組成物に関する。

【特許請求の範囲】

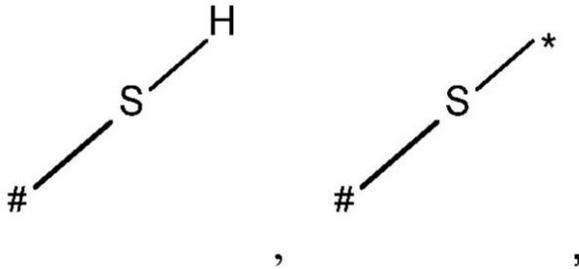
【請求項 1】

第 1 の材料が、以下の化学式 (I) ;



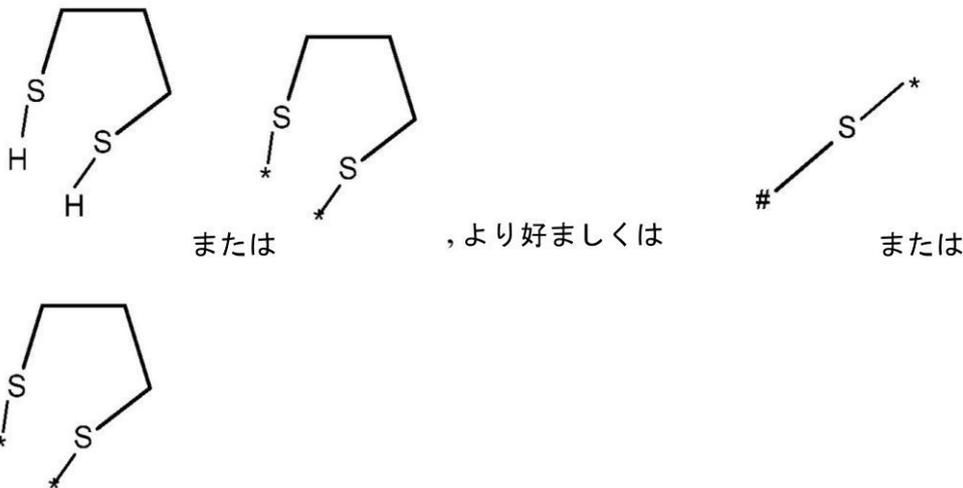
式中、X は、1 つまたは 2 つの S 原子を含む付着基 (attaching group) を表し、好ましくは該付着基は、

【化 1】



10

【化 2】



20

30

であり、ここで「#」は、Y への連結点を表し、および「*」は、半導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

Y は、単結合、1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルキレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルケニレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有する (ポリ) アルコキシレン基であり、好ましくは Y は、1 ~ 15 個の炭素原子を有する (ポリ) アルコキシレン基であり、

Z は、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、H またはメチル基であり、 R^2 は、H またはメチル基であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、x は、整数であり、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲であり、

または

Z は、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

ここで n は、2 または 3 であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、H またはメチル基であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、n は、1 ~ 5、好ましくは 1 ~ 3 であり、より好ましくは n は 2 であり、x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、

で表される、少なくとも 1 つのコア、任意に 1 つ以上のシェル層、第 1 の材料、および第

50

2 の材料を含む、少なくとも 1 つの半電導性発光ナノ粒子を含む組成物。

【請求項 2】

第 2 の材料が、有機発光材料、無機発光材料、電子輸送有機材料などの電荷輸送材料、散乱粒子、ホスト材料、半電導性無機材料、およびマトリックス材料からなる群の 1 つ以上の要素から選択され、好ましくは該マトリックス材料が、ポリ - (メタ) アクリラート、(メタ) アクリラートモノマー、ケイ素ポリマー、エポキシポリマーからなる群の 1 つ以上の要素から選択され、好ましくは該マトリックス第 1 の材料が、アクリラートモノマー、メタアクリラートモノマー、ポリ - アクリラート、ポリ - メタアクリラート、またはその混合物であり、より好ましくはマトリックス材料が、ポリ - アクリラート、ポリ - メタアクリラートまたはその混合物である、請求項 1 に記載の組成物。

10

【請求項 3】

コアが、周期表の 13 族の 1 つの元素、および周期表の 15 族の 1 つの元素、好ましくは 13 族の元素は In であり、および 15 族の元素は P であり、より好ましくは、コアが InP 、 $InPZn$ 、 $InPZnS$ 、および $InGaP$ からなる群から選択される、を含む、請求項 1 または 2 に記載の組成物。

【請求項 4】

シェル層の少なくとも 1 つが、周期表の 12 族の第 1 の元素、好ましくは第 1 の元素は、 Zn または Cd である、および、周期表の 16 族の第 2 の元素、好ましくは第 2 の元素は、 S 、 Se 、または Te である、を含む、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の組成物。

20

【請求項 5】

少なくとも 1 つのシェル層が、以下の式 (I I)

$$Zn_x S_x Se_y Te_z, - (I I)$$

式中、 $0 < x < 1$ 、 $0 < y < 1$ 、 $0 < z < 1$ 、および $x + y + z = 1$ 、好ましくは $0 < x < 1$ 、 $0 < y < 1$ 、 $z = 0$ 、および $x + y = 1$ である、で表される、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の組成物。

【請求項 6】

半電導性発光ナノ粒子の該シェル層がダブルシェル層である、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の組成物。

【請求項 7】

組成物が、少なくとも 1 つの追加の材料、好ましくは追加の材料は、有機発光材料、無機発光材料、電荷輸送材料、散乱粒子、光透過性ポリマー、抗酸化剤、ラジカルクエンチャー、重合開始剤、および追加の配位子からなる群から選択される、をさらに含む、請求項 1 ~ 6 のいずれか一項に記載の組成物。

30

【請求項 8】

組成物が、複数の半電導性発光ナノ粒子を含む、請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の組成物。

【請求項 9】

半電導性発光ナノ粒子の総量が、組成物の総量に基づき、 0.1 wt. \% から 90 wt. \% まで、好ましくは 5 wt. \% から 70 wt. \% まで、より好ましくは 20 wt. \% から 50 wt. \% までの範囲である、請求項 1 ~ 8 のいずれか一項に記載の組成物。

40

【請求項 10】

請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の組成物、

および

少なくとも 1 つの溶媒、好ましくはそれは、エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノプロピルエーテル、およびエチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル；ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジプロピルエーテル、およびジエチレングリコールジブチルエーテルなどのジエチレングリコールジアルキルエーテル；プロピレングリコールモノメチル

50

エーテル（PGME）、プロピレングリコールモノエチルエーテル、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテル；メチルセロソルブアセタートおよびエチルセロソルブアセタートなどのエチレングリコールアルキルエーテルアセタート；プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセタート、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルアセタートなどのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート；メチルエチルケトン、アセトン、メチルアミルケトン、メチルイソブチルケトン、およびシクロヘキサノンなどのケトン；エタノール、プロパノール、ブタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、エチレングリコール、およびグリセリンなどのアルコール；エチル3-エトキシプロピオナート、メチル3-メトキシプロピオナートおよびエチルラクトアートのエステル；およびガンマブチロラクトンなどの環状エステル；クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、およびジクロロベンゼンなどの塩素化炭化水素からなる群の1つ以上の要素から選択され、好ましくは該溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、アルキルアセタート、エチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、およびプロピレングリコールモノアルキルエーテルであり、好ましくは溶媒は、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）などのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、ブチルアセタートなどのアルキルアセタート、エチレングリコールモノブチルエーテル、プロピレングリコールなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル、メトキシプロパノールなどのプロピレングリコールまたはプロピレングリコールモノアルキルエーテルからなる群の1つ以上の要素から選択され、より好ましくは溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタートから選択される、を含む配合物。

10

20

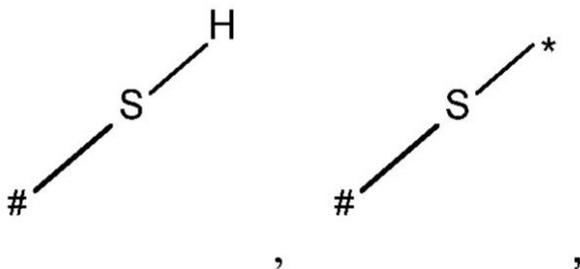
【請求項11】

第1の材料が、以下の化学式（I）、



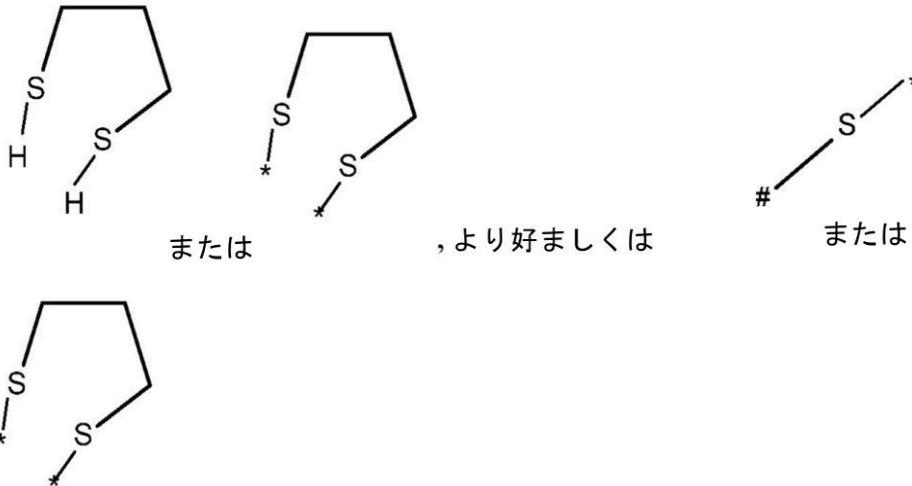
式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基（attaching group）を表し、好ましくは該付着基は、

【化3】



30

【化 4】



10

であり、ここで「#」は、基 Y への連結点を表し、および「*」は、半電導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

Y は、単結合、1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルキレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルケニレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、好ましくは Y は、1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、

20

Z は、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、H またはメチル基であり、 R^2 は、H またはメチル基であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、x は、整数であり、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲であり、

または

Z は、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

ここで n は、2 または 3 であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、H またはメチル基であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、n は、1 ~ 5、好ましくは 1 ~ 3 であり、より好ましくは n は 2 であり、x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、

30

で表される、コア、任意に 1 つ以上のシェル層、少なくとも 1 つの第 1 の材料、

および

少なくとも 1 つの溶媒、好ましくはそれは、エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノプロピルエーテル、およびエチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル；ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジプロピルエーテル、およびジエチレングリコールジブチルエーテルなどのジエチレングリコールジアルキルエーテル；プロピレングリコールモノメチルエーテル（PGME）、プロピレングリコールモノエチルエーテル、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテル；メチルセロソルブアセタートおよびエチルセロソルブアセタートなどのエチレングリコールアルキルエーテルアセタート；プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセタート、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルアセタートなどのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート；メチルエチルケトン、アセトン、メチルアミルケトン、メチルイソブチルケトン、およびシクロヘキサノンなどのケトン；エタノール、プロパノール、ブタノール、ヘキ

40

50

サノール、シクロヘキサノール、エチレングリコール、およびグリセリンなどのアルコール；エチル 3 - エトキシプロピオナート、メチル 3 - メトキシプロピオナートおよびエチルラクタートなどのエステル；およびガンマブチロラクトンなどの環状エステル；クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、およびジクロロベンゼンなどの塩素化炭化水素からなる群の 1 つ以上の要素から選択され、好ましくは該溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、アルキルアセタート、エチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、およびプロピレングリコールモノアルキルエーテルであり、好ましくは溶媒は、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート (P G M E A) などのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、ブチルアセタートなどのアルキルアセタート、エチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、またはメトキシプロパノールなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテルからなる群の 1 つ以上の要素から選択され、より好ましくは溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタートから選択される、を含む配合物。

10

【請求項 1 2】

請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の組成物、または請求項 1 0 または 1 1 に記載の配合物の、電子デバイス、光学デバイスにおける、バイオメディカルデバイスにおける、または、電子デバイス、光学デバイスまたはバイオメディカルデバイスを作製するための使用。

20

【請求項 1 3】

請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の該組成物、または請求項 1 0 または 1 1 に記載の配合物を少なくとも含む光学媒体。

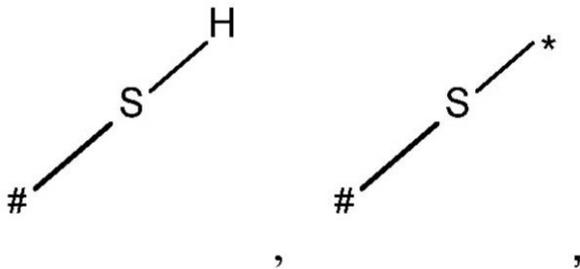
【請求項 1 4】

第 1 の材料が、以下の化学式 (I) ；



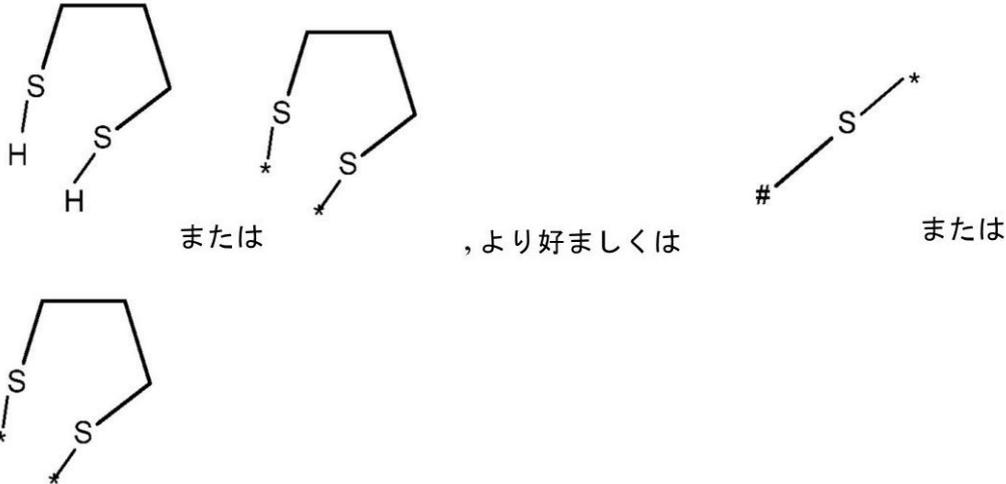
式中、X は、1 つまたは 2 つの S 原子を含む付着基 (attaching group) を表し、好ましくは該付着基は、

【化 5】



30

【化 6】



10

であり、ここで「#」は、基 Y への連結点を表し、および「*」は、半電導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

Y は、単結合、1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルキレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルケニレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、好ましくは Y は、1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、

20

Z は、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、H またはメチル基であり、 R^2 は、H またはメチル基であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、x は、整数であり、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲であり、または

Z は、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

ここで n は、2 または 3 であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、H またはメチル基であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、n は、1 ~ 5、好ましくは 1 ~ 3 であり、より好ましくは n は 2 であり、x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、

30

で表される、アノードおよびカソード、およびコア、任意に 1 つ以上のシェル層、および第 1 の材料を含む少なくとも 1 つの発光ナノ粒子を含む少なくとも 1 つの有機層を少なくとも含む光学媒体、または請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の組成物、好ましくは、該 1 つの有機層は、発光層（light emitting layer）であり、より好ましくは、媒体は、正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロッキング層、正孔ブロッキング層、電子ブロッキング層、および電子注入層からなる群から選択される 1 つ以上の層をさらに含む光学媒体。

40

【請求項 15】

有機層が、少なくとも 1 つの発光ナノ粒子および請求項 14 に記載の第 1 の材料、およびホスト材料、好ましくはホスト材料は有機ホスト材料である、を含む請求項 14 に記載の光学媒体。

【請求項 16】

請求項 13 ~ 15 のいずれか一項に記載の少なくとも 1 つの光学媒体を含む光学デバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

50

技術分野

本発明は、半電導性発光ナノ粒子を含む組成物、配合物、組成物の使用、配合物の使用、光学媒体、および光学デバイスに関する。

【背景技術】

【0002】

背景技術

コアおよび少なくとも1つの配位子を含む半電導性発光ナノ粒子、および半電導性発光ナノ粒子を含む組成物は、先行技術文献において知られている。

例えば、J. Am. Chem. Soc. 9804、132、2010 に、ビス(DHLA) - PEG - OCH₃ でキャップされたCdSe/ZnSおよびCdSe/CdZnS/ZnS QDが開示される。 10

J. Am. Chem. Soc. 739、126、2004に、キモトリプシン(ChT)の認識のための、チオアルキルおよびチオアルキル化されたオリゴ(エチレングリコール)配位子を有するCsSeナノ粒子が開示される。

および、Zn-DDT(1-ドデンカンチオール)ポリマーを有するQDビーズが、US 2016/0289552 A1に公開される。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

1. US 2016-0289552 A1 20

【非特許文献】

【0004】

2. J. Am. Chem. Soc. 9804、132、2010

3. J. Am. Chem. Soc. 739、126、2004

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

本発明の概要

しかしながら、本発明者らは、以下に列挙されるとおり、改善が所望される1つ以上の重大な問題がなおあることを新しく見出した。 30

【0006】

1. 組成物または配合物において半電導性発光ナノ粒子の改善された分散性を表す、1つ以上の半電導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物が所望される。

2. 組成物または配合物において半電導性発光ナノ粒子の改善された初期量子収率を表す、1つ以上の半電導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物が要求される。

【0007】

3. 組成物または配合物において半電導性発光ナノ粒子の長期間安定性および安定な量子収率を表す、1つ以上の半電導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物が要求される。

4. 励起波長でより高い光学密度(「OD」)を表す、1つ以上の半電導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物が所望される。 40

5. より高い濃度で半電導性発光ナノ粒子のよりよい分散性を表す、1つ以上の半電導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物が要求される。

【課題を解決するための手段】

【0008】

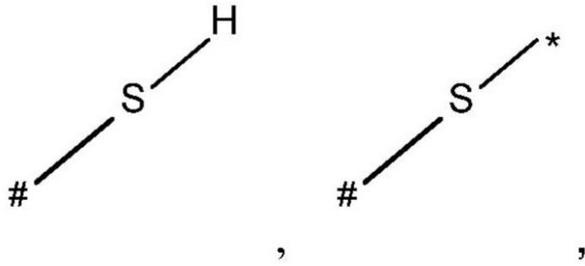
本発明者らは、上述の問題1~5の1つ以上を解決することを目指した。

次いで、第1の材料が、以下の化学式(I)、



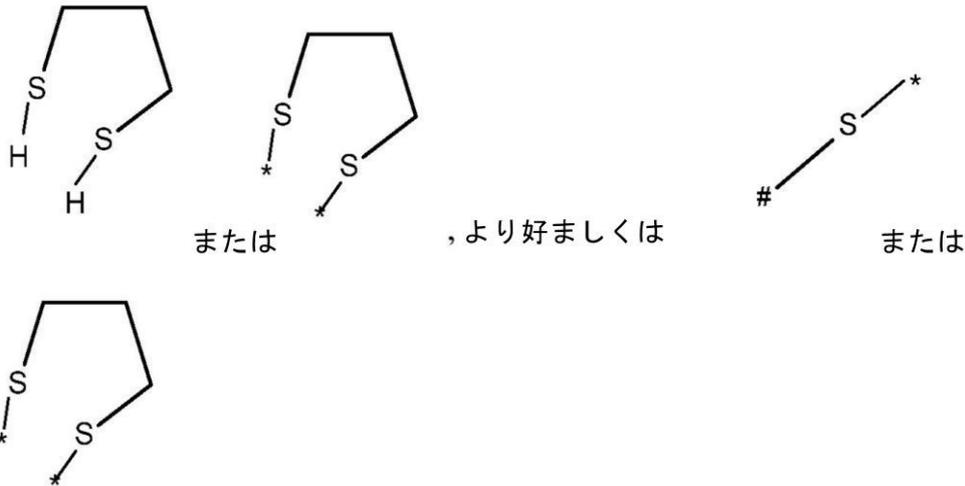
式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基(attaching group)を表し、好ましくは該付着基は、

【化1】



10

【化2】



20

であり、ここで「#」は、基 Y への連結点を表し、および「*」は、半電導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

【0009】

Y は、単結合、1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルキレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルケニレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、好ましくは Y は、1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、

30

【0010】

Z は、 $- [CH(R^1) - CH(R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、H またはメチル基であり、 R^2 は、H またはメチル基であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、x は、整数であり、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲であり、

40

【0011】

Z は、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

ここで n は、2 または 3 であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、H またはメチル基であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、n は、1 ~ 5、好ましくは 1 ~ 3 であり、より好ましくは n は 2 であり、x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、

で表される、少なくとも 1 つのコア、任意に 1 つ以上のシェル層、第 1 の材料、および第 2 の材料を含む、少なくとも 1 つの半電導性発光ナノ粒子を含む、本質的にからなる、またはからなる新規の組成物が、見いだされた。

50

【 0 0 1 2 】

別の側面において、本発明はまた、本発明の組成物、および

少なくとも1つの溶媒、好ましくはそれは、エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノプロピルエーテル、およびエチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル；ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジプロピルエーテル、およびジエチレングリコールジブチルエーテルなどのジエチレングリコールジアルキルエーテル；プロピレングリコールモノメチルエーテル（PGME）、プロピレングリコールモノエチルエーテル、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテル；メチルセロソルブアセタートおよびエチルセロソルブアセタートなどのエチレングリコールアルキルエーテルアセタート；プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセタート、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルアセタートなどのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート；メチルエチルケトン、アセトン、メチルアミルケトン、メチルイソブチルケトン、およびシクロヘキサノンなどのケトン；エタノール、プロパノール、ブタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、エチレングリコール、およびグリセリンなどのアルコール；エチル3-エトキシプロピオナート、メチル3-メトキシプロピオナートおよびエチルラクタートなどのエステル；およびガンマブチロラクトンなどの環状エステル；クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、およびジクロロベンゼンなどの塩素化炭化水素からなる群の1つ以上の要素から選択され、好ましくは該溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、アルキルアセタート、エチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、およびプロピレングリコールモノアルキルエーテルであり、好ましくは溶媒は、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）などのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、ブチルアセタートなどのアルキルアセタート、エチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、またはメトキシプロパノールなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテルからなる群の1つ以上の要素から選択され、より好ましくは溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタートから選択される、を少なくとも含む新規の配合物に関する。

10

20

30

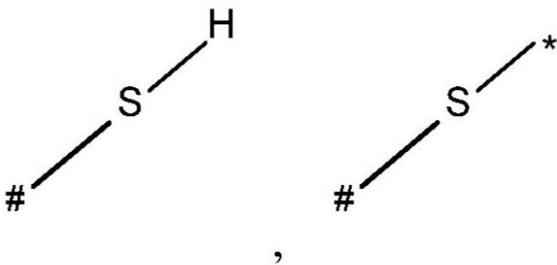
【 0 0 1 3 】

別の側面において、本発明はまた、第1の材料が、以下の化学式（I）、
 $X Y Z \quad - \quad (I)$

式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基（attaching group）を表し、好ましくは該付着基は、

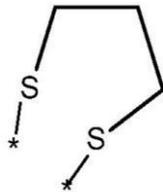
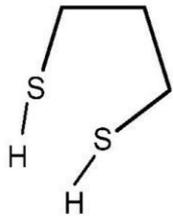
【 0 0 1 4 】

【化3】



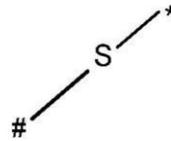
40

【化4】

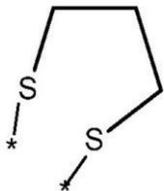


または

,より好ましくは



または



10

【0015】

であり、ここで「#」は、基Yへの連結点を表し、および「*」は、半導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

Yは、単結合、1～15個の炭素原子を有するアルキレン基、または1～15個の炭素原子を有するアルケニレン基、または1～15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり、好ましくはYは、1～15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり、

20

【0016】

Zは、 $-[CH(R^1) - CH(R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、Hまたはメチル基であり、 R^2 は、Hまたはメチル基であり、Qは、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、 R^3 は、Hまたはメチル基であり、xは、整数であり、好ましくはxは、1から300までの、より好ましくは2から200までの、なおより好ましくは4から100までの範囲であり、

30

【0017】

Zは、 $-[(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

ここでnは、2または3であり、Qは、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、 R^1 は、Hまたはメチル基であり、 R^3 は、Hまたはメチル基であり、nは、1～5、好ましくは1～3であり、より好ましくはnは2であり、xは、整数、好ましくはxは、1から300までの、より好ましくは2から200までの、なおより好ましくは4から100までの範囲である、で表される、コア、任意に1つ以上のシェル層、少なくとも1つの第1の材料、好ましくは第1の材料は、配位子として、コアの表面またはシェル層の最も外の表面に置かれる、

40

および

【0018】

少なくとも1つの溶媒、好ましくはそれは、エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノプロピルエーテル、およびエチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル；ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジプロピルエーテル、およびジエチレングリコールジブチルエーテルなどのジエチレングリコールジアルキルエーテル；プロピレングリコールモノメチルエーテル(PGME)、プロピレングリコールモノエチルエーテル、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテル；

【0019】

50

メチルセロソルブアセタートおよびエチルセロソルブアセタートなどのエチレングリコールアルキルエーテルアセタート；プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセタート、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルアセタートなどのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート；メチルエチルケトン、アセトン、メチルアミルケトン、メチルイソブチルケトン、およびシクロヘキサノンなどのケトン；エタノール、プロパノール、ブタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、エチレングリコール、およびグリセリンなどのアルコール；エチル3-エトキシプロピオナート、メチル3-メトキシプロピオナートおよびエチルラクタートなどのエステル；およびガンマブチロラクトンなどの環状エステル；クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、およびジクロロベンゼンなどの塩素化炭化水素からなる群の1つ以上の要素から選択され、

10

【0020】

好ましくは該溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、アルキルアセタート、エチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、およびプロピレングリコールモノアルキルエーテルであり、好ましくは溶媒は、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）などのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、ブチルアセタートなどのアルキルアセタート、エチレングリコールモノブチルエーテル、エチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、またはメトキシプロパノールなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテルからなる群の1つ以上の要素から選択され、より好ましくは溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタートから選択される、を含む、少なくとも1つの半導性発光ナノ粒子を含む新規の配合物にも関する。

20

【0021】

別の側面において、本発明は、組成物または配合物の、電子デバイス、光学デバイスにおける、バイオメディカルデバイスにおける、または、電子デバイス、光学デバイスまたはバイオメディカルデバイスを作製するための使用に関する。

【0022】

別の側面において、本発明はさらには、該組成物または配合物を含む光学媒体に関する。

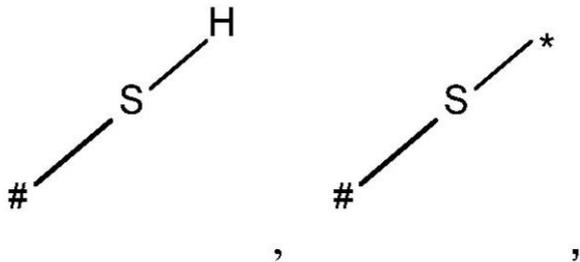
【0023】

別の側面において、本発明はまた、第1の材料が、以下の化学式（I）、

X Y Z - (I)

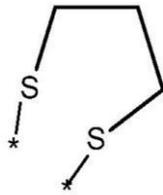
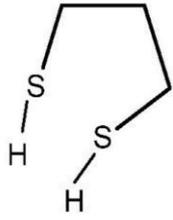
式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基（attaching group）を表し、好ましくは該付着基は、

【化5】



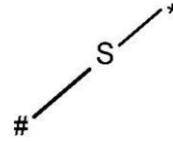
40

【化 6】

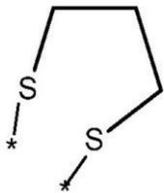


または

,より好ましくは



または



10

【0024】

であり、ここで「#」は、基 Y への連結点を表し、および「*」は、半導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

【0025】

20

Y は、単結合、1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルキレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルケニレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有する (ポリ) アルコキシレン基であり、好ましくは Y は、1 ~ 15 個の炭素原子を有する (ポリ) アルコキシレン基であり、

【0026】

Z は、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、H またはメチル基であり、 R^2 は、H またはメチル基であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲であり、

30

または

【0027】

Z は、 $- [(CHR_1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

ここで n は、2 または 3 であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、H またはメチル基であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、n は、1 ~ 5、好ましくは 1 ~ 3 であり、より好ましくは n は 2 であり、x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、

で表される、アノードおよびカソード、およびコア、任意に 1 つ以上のシェル層、および第 1 の材料を含む少なくとも 1 つの発光ナノ粒子を含む少なくとも 1 つの有機層を少なくとも含む光学媒体、または請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の組成物にも関し、好ましくは、該 1 つの有機層は、発光層 (light emitting layer) であり、より好ましくは、媒体は、正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロッキング層、正孔ブロッキング層、電子ブロッキング層、および電子注入層からなる群から選択される 1 つ以上の層をさらに含む。

40

【0028】

別の側面において、本発明はさらにまたは、本発明の少なくとも 1 つの光学媒体を含む光学デバイスにも関する。

【0029】

発明の詳細な説明

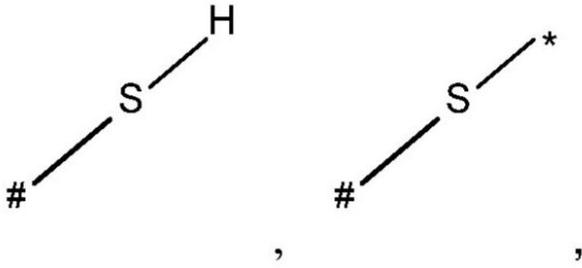
本発明に従って、一態様において、組成物は、第 1 の材料が、以下の化学式 (I)、

50

X Y Z - (I)

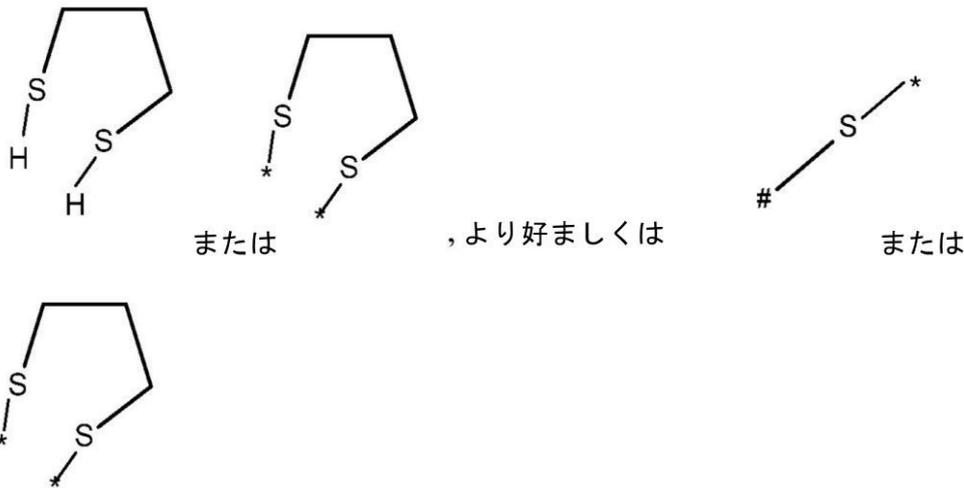
式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基 (attaching group) を表し、好ましくは該付着基は、

【化7】



10

【化8】



20

であり、ここで「#」は、基Yへの連結点を表し、「*」は、半導性発光ナノ粒子の、

30

【0030】

Yは、単結合、1~15個の炭素原子を有するアルキレン基、または1~15個の炭素原子を有するアルケニレン基、または1~15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり、好ましくはYは、1~15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり；

【0031】

Zは、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、Hまたはメチル基であり、 R^2 は、Hまたはメチル基であり、Qは、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、 R^3 は、Hまたはメチル基であり、xは、整数であり、好ましくはxは、1から300までの、より好ましくは2から200までの、なおより好ましくは4から100までの範囲であり；

40

または

【0032】

Zは、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

ここでnは、2または3であり、Qは、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、 R^1 は、Hまたはメチル基であり、 R^3 は、Hまたはメチル基であり、nは、1~5、好ましくは1~3であり、より好ましくはnは2であり、xは、整数であり、好ましくはxは、1から300までの、より好ましくは2から200までの、なおより好ましくは4から100までの範囲である、

50

で表される、コア、任意に1つ以上のシェル層、第1の材料、および第2の材料を少なくとも含む、少なくとも1つの半導性発光ナノ粒子を含む、本質的にからなる、またはからなる。

【0033】

好ましくは、化学式(I)で表される該第1の材料は、半導性発光ナノ粒子の配位子として、コアの表面またはシェル層の最も外の表面に置かれる。

好ましくは、該組成物は、複数の半導性発光ナノ粒子を含む。

【0034】

- 第2の材料

本発明のいくつかの態様において、第2の材料は、有機発光材料、無機発光材料、電子輸送有機材料などの電荷輸送材料、散乱粒子、ホスト材料、半導性無機材料、およびマトリックス材料からなる群の1つ以上の要素から選択され、好ましくは該マトリックス材料は、ポリ-(メタ)アクリレート、(メタ)アクリレートモノマー、ケイ素ポリマー、エポキシポリマーからなる群の1つ以上の要素から選択され、好ましくは該マトリックス第1の材料は、アクリレートモノマー、メタアクリレートモノマー、ポリ-アクリレート、ポリ-メタアクリレート、またはその混合物であり、より好ましくはマトリックス材料が、ポリ-アクリレート、ポリ-メタアクリレートまたはその混合物である。

10

【0035】

本発明の好ましい態様において、該第2の材料は、ポリ-(メタ)アクリレート、(メタ)アクリレートモノマー、ケイ素ポリマー、エポキシポリマーからなる群の1つ以上の要素から選択されるマトリックス材料であり、好ましくは該マトリックス材料は、アクリレートモノマー、メタアクリレートモノマー、ポリ-アクリレート、ポリ-メタアクリレート、またはその混合物であり、より好ましくはマトリックス材料は、ポリ-アクリレート、ポリ-メタアクリレートまたはその混合物である。

20

【0036】

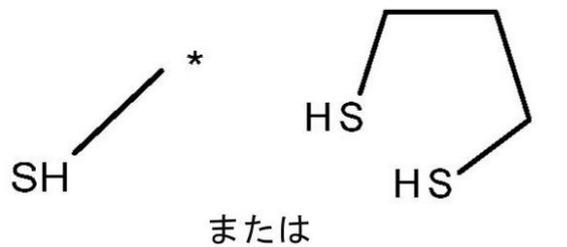
したがって、本発明のいくつかの態様において、組成物は、配位子が、以下の化学式(I)、



式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基(attaching group)を表し、好ましくは付着基は、1つまたは2つのチオール基を含み、より好ましくは、それは、

30

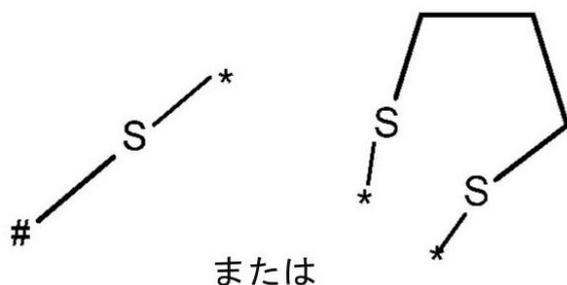
【化9】



である、または好ましくは該付着基は、

40

【化10】



50

であり、ここで「#」は、基 Y への連結点を表し、および「*」は、半導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

【0037】

Y は、単結合、1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルキレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルケニレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、好ましくは Y は、1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、

【0038】

Z は、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、

ここで R^1 は、H またはメチル基であり、 R^2 は、H またはメチル基であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、x は、整数であり、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲であり、

または

【0039】

Z は、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

式中 n は、2 または 3 であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、H またはメチル基であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、n は、1 ~ 5、好ましくは 1 ~ 3 であり、より好ましくは n は 2 であり、x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、

で表される、コア、任意に 1 つ以上のシェル層、およびコアの表面またはシェル層の最も外の表面に置かれる第 1 の材料として少なくとも 1 つの配位子を少なくとも含む半導性発光ナノ粒子、

および

【0040】

ポリ - (メタ) アクリレート、(メタ) アクリレートモノマー、ケイ素ポリマー、エポキシポリマーからなる群の 1 つ以上の要素から選択される少なくとも 1 つのマトリックス材料、好ましくは該マトリックス材料は、アクリレートモノマー、メタアクリレートモノマー、ポリ - アクリレート、ポリ - メタアクリレート、またはその混合物であり、より好ましくはマトリックス材料は、ポリ - アクリレート、ポリ - メタアクリレートまたはその混合物である、を含む、本質的にからなる、またはからなる。

【0041】

- マトリックス材料

本発明に従って、いくつかの態様において、組成物は、ポリ - (メタ) アクリレート、(メタ) アクリレートモノマー、ケイ素ポリマー、エポキシポリマーからなる群の 1 つ以上の要素から選択される少なくとも 1 つのマトリックス材料を含み、好ましくは該マトリックス材料は、アクリレートモノマー、メタアクリレートモノマー、ポリ - アクリレート、ポリ - メタアクリレート、またはその混合物であり、より好ましくはマトリックス材料は、ポリ - アクリレート、ポリ - メタアクリレートまたはその混合物である。

【0042】

本発明のいくつかの態様において、マトリックス材料は、ポリ - (メタ) アクリレートおよび/または (メタ) アクリレートモノマーを含む。

本発明に従って、用語「ポリ - (メタ) アクリレート」は、アクリル酸、メタクリル酸、アクリレート、メタアクリレート、およびこれらの任意の組み合わせからなる群から選択されるモノマーの重合により得られたポリマーの一般的な用語を意味する。

【0043】

好ましくは、ポリ - (メタ) アクリレートは、ポリ - アクリレート、またはポリ - メタアクリレートである。および好ましくは、(メタ) アクリレートモノマーは、アクリレートモノマーまたはメタアクリレートモノマーである。

本発明のポリ - (メタ) アクリラートは、上に記載されない別のモノマー単位を、本発明の効果をポリ - (メタ) アクリラートが表す範囲で、さらに含んでもよい。

【0044】

本発明に従って、ポリ - (メタ) アクリラートの重量平均分子量は、具体的には限定されない。

好ましくはそれは、2,000 - 100,000の範囲であり、より好ましくはそれは、3,000 - 30,000の範囲である。

ポリ - (メタ) アクリラートとして、公知の1つ以上のポリ - アクリラートまたはポリ - メタアクリラートが使用されてもよい。

【0045】

本発明の好ましい態様において、ポリシロキサンと良好な重合反応を実現するために、酸性基を含有する繰返し単位を包含する、シラン修飾されたポリ - (メタ) アクリラート、ポリ - (メタ) アクリラートが、単一でまたは混合物において使用されてもよい。

シラン修飾されたポリ - (メタ) アクリラートの例として、シロキシ基および/またはシラノール基置換されたポリ - アクリラートまたはポリ - メタアクリラート、炭素 - 炭素不飽和結合、シリコンオリゴマー、またはシリコンオイルを包含するシランカップリング剤と反応したポリアクリラートまたはポリ - メタアクリラートが好ましくは使用されてもよい。

【0046】

理論によって拘束されることは望まないが、シラン修飾されたポリ - (メタ) アクリラートは、ポリシロキサンの改善された溶解性につながり得ることが信じられている。

より好ましくは、シランカップリング剤およびポリ - (メタ) アクリラートから作られるコポリマーが使用され得る。

【0047】

本明細書において、シランカップリング剤の例として、KBM - 1003、KME - 1003、KBM - 1403またはKBM - 5103 (Shinetsu Co. から)、およびシリコンオイルの例として、X - 22 - 174DX、X - 22 - 2426、X - 22 - 2475、またはX - 22 - 1602 (Shinetsu Co. から) が好ましくは使用され得る。

【0048】

本発明に従って、不飽和結合の数は、具体的には限定されない。よりよい反応性とシロキサンとの相溶性との調和から、(メタ) アクリルポリマーにおける二重結合当量 (エチレン性不飽和結合当量) 値は、好ましくは10から500 g / eqの範囲である。

【0049】

酸性基を含有する繰返し単位を包含する(メタ) アクリルポリマーとして、カルボキシル基、スルホ基、またはフェノールタイプのヒドロキシル基からなる群から選択される側鎖を包含する(メタ) アクリルポリマー。

酸性基を含有する繰返し単位を包含する(メタ) アクリルポリマーは、感光性組成物の非硬化部分の、展開剤 (developer) へのよりよい溶解性につながり得ると信じられている。

【0050】

本発明に従って、酸性基の数は、具体的には限定されない。よりよい反応性と感光性組成物の貯蔵安定性との調和から、(メタ) アクリルポリマーの酸価は、好ましくは、1gの(メタ) アクリルポリマーに基づき、KOH 50 ~ 500 mgの範囲である。

【0051】

- 第1の材料

本発明に従って、第1の材料、好ましくは半電導性発光ナノ粒子の配位子としては、以下の化学式 (I)、



式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基 (attaching group) を表し、好ま

10

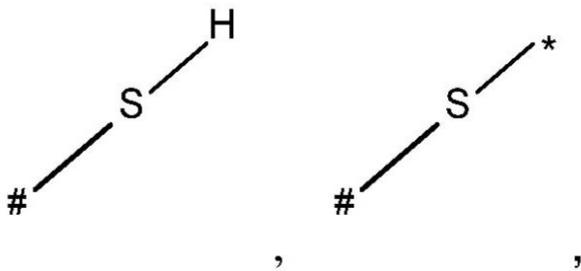
20

30

40

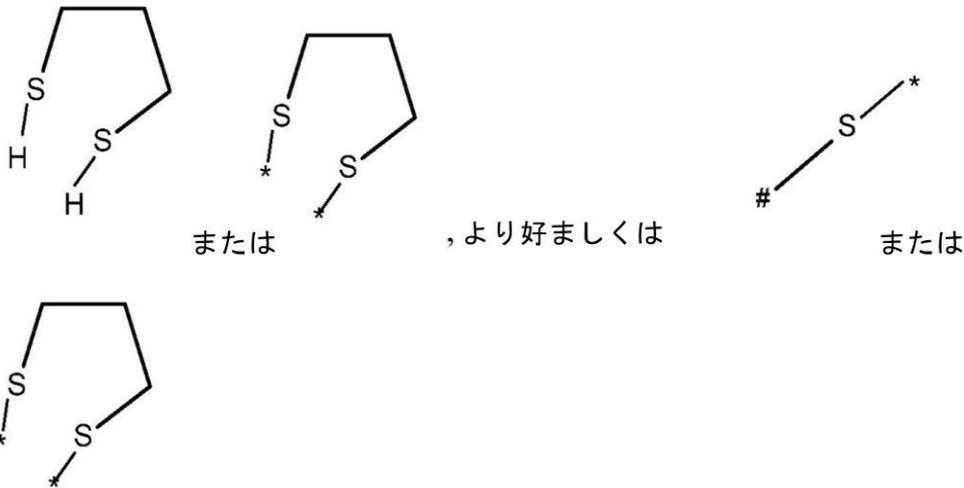
50

しくは該付着基は、
【化 1 1】



10

【化 1 2】



20

であり、ここで「#」は、基 Y への連結点を表し、および「*」は、半電導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

30

【0052】

Y は、単結合、1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルキレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有するアルケニレン基、または 1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、好ましくは Y は、1 ~ 15 個の炭素原子を有する（ポリ）アルコキシレン基であり、

【0053】

Z は、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、ここで R^1 は、H またはメチル基であり、 R^2 は、H またはメチル基であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、x は、整数であり、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲であり、

40

【0054】

Z は、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、ここで n は、2 または 3 であり、Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、H またはメチル基であり、 R^3 は、H またはメチル基であり、n は、1 ~ 5 であり、好ましくは 1 ~ 3、より好ましくは n は 2 であり、x は、整数であり、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、
で表される。

【0055】

50

本発明のいくつかの態様において、好ましくは該第1の材料は、半導性発光ナノ粒子のコアの表面またはシェル層の最も外の表面に配位子として置かれる。

本発明のいくつかの態様において、コアの表面、または半導性発光ナノ粒子の最も外の表面の1つ以上のシェル層の最も外の表面は、配位子として材料によって部分的にまたは完全に被覆されてもよい。

【0056】

本発明のいくつかの態様において、配位子として化学式(I)で表される少なくとも2つの材料は、コアの表面またはシェル層の最も外の表面に付着され、好ましくは、複数の該配位子は、コアの表面またはシェル層の最も外の表面に付着される。

本発明に従って、いくつかの態様において、該第1の材料の、好ましくは配位子としての含有率は、半導性発光ナノ粒子の全重量に関して、1%から80重量%までの範囲、より好ましくは20%から70重量%までの範囲、なおより好ましくは、40%から65重量%までの範囲である。

【0057】

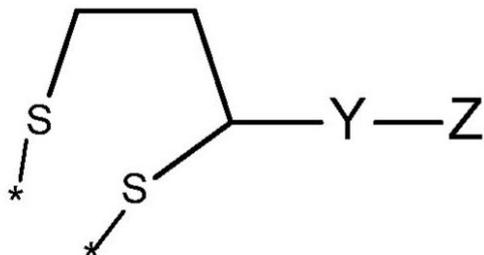
本発明の好ましい態様において、第1の材料の、好ましくは配位子としての重量平均分子量(Mw)は、200g/molから30,000g/molまでの範囲、好ましくは250g/molから2,000g/molまでの範囲、より好ましくは400g/molから1,000g/molまでの範囲である。

【0058】

分子量Mwは、ポリスチレン内部標準に対して、GPC(=ゲル浸透クロマトグラフィー)の手段で決定される。

好ましい態様において、好ましくは配位子として、材料は、以下の式(Ia)または(Ib)

【化13】



(Ia)



(Ib)

で表される。

【0059】

より好ましくはZは、 $-[(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ 、ここでnは、2または3であり、Qは、酸素原子、窒素原子またはチオール原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、 R^1 は、Hまたはメチル基であり、 R^3 は、Hまたはメチル基であり、nは、1~5、好ましくは1~3であり、より好ましくはnは、2であり、xは、整数であり、好ましくはxは、1から700までの、より好ましくは2から350までの、なおより好ましくは4から200までの範囲である、である。

【0060】

10

20

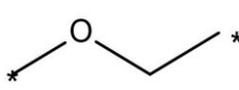
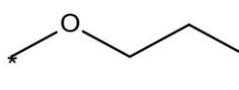
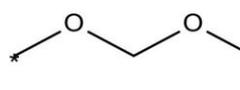
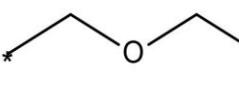
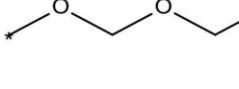
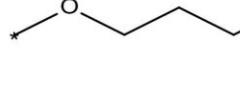
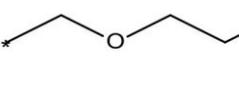
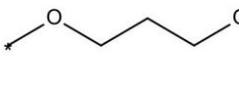
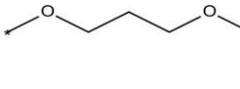
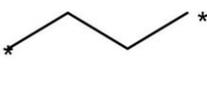
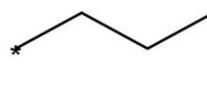
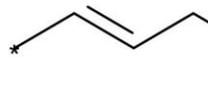
30

40

50

好ましくは Y は、以下の表 1 の群から選択される。

【表 1】

10

ここで、「*」は基 X および Z への連結点を表す。

【0061】

公に入手可能なポリエチレングリコール (PEG) チオール、ポリプロピレングリコールチオール、およびその誘導体 (例えば Sigma-Aldrich から) が、上に記される配位子として好ましくは使用されてもよい。

20

- 半電導性発光ナノ粒子

本発明に従って、用語「半導体」は、室温にて、伝導体 (銅など) のそれと絶縁体 (ガラスなど) のそれとの間の程度で電気伝導度を有する材料を意味する。好ましくは半導体は、温度に伴い電気伝導度が上昇する材料である。

用語「ナノサイズ」は、0.1 nm と 999 nm との間、好ましくは 1 nm ~ 150 nm、より好ましくは 3 nm ~ 50 nm におけるサイズを意味する。

【0062】

かくして、本発明に従って、「半電導性発光ナノ粒子」は、サイズが 0.1 nm と 999 nm との間、好ましくは 1 nm ~ 150 nm、より好ましくは 3 nm ~ 50 nm である、室温にて、伝導体 (銅など) のそれと絶縁体 (ガラスなど) のそれとの間の程度で電気伝導度を有する発光材料、好ましくは半導体は、温度に伴い電気伝導度は上昇し、およびサイズは 0.1 nm と 999 nm との間、好ましくは 0.5 nm ~ 150 nm、より好ましくは 1 nm ~ 50 nm である材料を意味すると考えられる。

30

【0063】

本発明に従って、用語「サイズ」は、半電導性ナノサイズ発光粒子の最長軸の平均直径を意味する。

半電導性ナノサイズ発光粒子の平均直径は、Tecnai G2 Spirit Twin T-12 Transmission Electron Microscope により創られる TEM 画像において、100 個の半電導性発光ナノ粒子に基づき計算される。

40

【0064】

本発明の好ましい態様において、本発明の半電導性発光ナノ粒子は、量子サイズ材料である。

本発明に従って、用語「量子サイズ」は、配位子も別の表面修飾もなしの半電導性材料それ自体のサイズを意味し、例えば ISBN : 978 - 3 - 662 - 44822 - 9 に記載されるなどの、量子閉じ込め効果を表してもよい。

【0065】

例えば、CdS、CdSe、CdTe、ZnS、ZnSe、ZnSeS、ZnTe、ZnO、GaAs、GaP、GaSb、HgS、HgSe、HgTe、InAs

50

、InP、InPS、InPZnS、InPZn、InPZnSe、InCdP、InPCdS、InPCdSe、InGaP、InGaPZn、InSb、AlAs、AlP、AlSb、Cu₂S、Cu₂Se、CuInS₂、CuInSe₂、Cu₂(ZnSn)S₄、Cu₂(InGa)S₄、TiO₂合金およびこれらの任意の組み合わせが使用されてもよい。

【0066】

本発明の好ましい態様において、コアは、周期表の13族の1つの元素、および周期表の15族の1つの元素、好ましくは13族の元素はInであり、および15族の元素はPであり、より好ましくは、コアがInP、InPZn、InPZnS、およびInGaPからなる群から選択される、を含む。

10

【0067】

本発明に従って、半導性発光ナノ粒子のコアの形状および合成される半導性発光ナノ粒子の形状のタイプは、具体的には限定されない。

例えば、球状の形状、細長い形状、星形状、多面体形状、角錐形状、四脚形状、四面体形状、血小板形状、円錐形状、および不規則な形状のコアおよび/または半導性発光ナノ粒子が合成されてもよい。

【0068】

本発明のいくつかの態様において、コアの平均直径は、1.5nmから3.5nmまでの範囲である。

コアの平均直径は、Tecnai G2 Spirit Twin T-12 Transmission Electron Microscopeにより創られるTEM画像において、100個の半導性発光ナノ粒子に基づき計算される。

20

【0069】

本発明のいくつかの態様において、シェル層は、周期表の12族の第1の元素および周期表の16族の第2の元素、好ましくは第1の元素はZnまたはCdでありおよび第2の元素はS、Se、またはTeである、を含むまたはからなる。

【0070】

本発明の好ましい態様において、シェル層は、以下の式(II)



式(II)中、0 < x < 1、0 < y < 1、0 < z < 1、およびx + y + z = 1、好ましくはシェル層は、ZnSe、ZnS_xSe_y、ZnSe_yTe_zまたはZnS_xTe_zである、で表される。

30

本発明のいくつかの態様において、該シェル層は、合金シェル層(alloyed shell layer)または傾斜シェル層(graded shell layer)であり、好ましくは該傾斜シェル層は、ZnS_xSe_y、ZnSe_yTe_z、またはZnS_xTe_zであり、より好ましくはそれは、ZnS_xSe_yである。

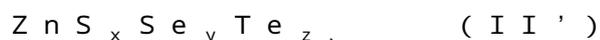
【0071】

本発明のいくつかの態様において、半導性発光ナノ粒子は、第2のシェル層を該シェル層にさらに含み、好ましくは第2のシェル層は、周期表の12族の第3の元素および周期表の16族の第4の元素を含むまたはからなり、より好ましくは、第3の元素はZnでありおよび第4の元素はS、Se、またはTeであり、ただし第4の元素と第2の元素とは同じではない。

40

【0072】

本発明の好ましい態様において、第2のシェル層は、以下の式(II')



式(II')中、0 < x < 1、0 < y < 1、0 < z < 1、およびx + y + z = 1であり、好ましくはシェル層はZnSe、ZnS_xSe_y、ZnSe_yTe_z、またはZnS_xTe_zであり、ただしシェル層と第2のシェル層とは同じではない。

【0073】

本発明のいくつかの態様において、該第2のシェル層は、合金シェル層(alloyed shell

50

1 layer)でもよい。

本発明のいくつかの態様において、半導性発光ナノ粒子は、マルチシェルとして、第2のシェル層に、1つ以上の追加のシェル層をさらに含んでもよい。

本発明に従って、用語「マルチシェル」は、3以上のシェル層からなる積み上げられたシェル層を表す。

【0074】

例えば、CdSe/CdS、CdSeS/CdZnS、CdSeS/CdS/ZnS、ZnSe/CdS、CdSe/ZnS、InP/ZnS、InP/ZnSe、InP/ZnS/ZnS、InZnP/ZnS、InZnP/ZnSe、InZnP/ZnSe/ZnS、InGaP/ZnS、InGaP/ZnSe、InGaP/ZnSe/ZnS、InZnP/ZnS、InZnP/ZnSe、InZnP/ZnSe/ZnS、ZnSe/CdS、ZnSe/ZnSまたはこれらの任意の組み合わせが使用されてもよい。好ましくは、InP/ZnS、InP/ZnSe、InP/ZnSe/ZnS、InZnP/ZnS、InZnP/ZnSe、InZnP/ZnSe/ZnS、InGaP/ZnS、InGaP/ZnSe、InGaP/ZnSe/ZnS。

10

【0075】

本発明のいくつかの態様において、組成物は、2以上の半導性発光ナノ粒子を含む。

本発明のいくつかの態様において、組成物は、複数の半導性発光ナノ粒子を含む。

【0076】

本発明のいくつかの態様において、半導性発光ナノ粒子の総量は、組成物の総量に基づき、0.1wt.%から90wt.%までの、好ましくは5wt.%から70wt.%までの、より好ましくは20wt.%から50wt.%までの範囲である。

20

【0077】

- 追加の配位子

本発明のいくつかの態様において、任意に、半導性発光ナノ粒子は、式(I)で表される材料に加えて、異なるタイプの配位子を含み得る。

【0078】

かくして、本発明のいくつかの態様において、半導性発光ナノ粒子のコアまたはシェル層の最も外の表面は、所望される場合、式(I)で表される配位子とともに、1つ以上の別の配位子で被覆されてもよい。

30

【0079】

1つ以上の該別の配位子が、半導性発光ナノ粒子のコアまたはシェル層(単数または複数)の最も外の表面に付着される場合、式(I)で表される配位子の量は、シェル層(単数または複数)の最も外の表面に付着される全配位子の、30wt.%から99.9wt.%までの範囲、好ましくは50wt.%から95wt.%までの範囲であり、より好ましくはそれは、60wt.%から90wt.%までの範囲である。

【0080】

本発明のいくつかの態様において、組成物は、1つ以上の添加剤をさらに含んでもよい。

好ましくは、該添加剤は、該別の配位子からなる群から選択される。

40

【0081】

理論によって拘束されることは望まないが、かかる表面配位子は、ナノサイズ蛍光材料を溶媒に、より容易に分散させることにつながると信じられている。

【0082】

一般的な使用における表面配位子は、トリオクチルホスフィンオキシド(TOPO)、トリオクチルホスフィン(TOP)、およびトリブチルホスフィン(TBP)などのホスフィンおよびホスフィンオキシド;ドデシルホスホン酸(DDPA)、トリデシルホスホン酸(TDPA)、オクタデシルホスホン酸(ODPA)、およびヘキシルホスホン酸(HPA)などのホスホン酸;オレイルアミン、デデシルアミン(DDA)、テトラデシルアミン(TDA)、ヘキサデシルアミン(HDA)、およびオクタデシルアミン(ODA

50

)、オレイルアミン(OLA)などのアミン、1-オクタデセン(ODE)、ヘキサデカンチオールおよびヘキサチオールなどのチオール;メルカプトプロピオン酸およびメルカプトウンデカン酸などのメルカプトカルボン酸;オレイン酸、ステアリン酸、ミリスチン酸;酢酸などのカルボン酸、およびまた、これらの任意の組み合わせを包含する。ポリエチレンイミン(PEI)もまた、好ましくは使用されてもよい。

【0083】

表面配位子の例は、例えば、国際特許出願公報No. WO 2012/059931Aに記載される。

【0084】

- 追加の材料

本発明のいくつかの態様において、該組成物は、少なくとも1つの追加の材料、好ましくは追加の材料は、有機発光材料、無機発光材料、電荷輸送材料、散乱粒子、光透過性ポリマー、抗酸化剤、ラジカルクエンチャー、重合開始剤、および追加の配位子からなる群から選択される、をさらに含んでもよい。

10

【0085】

例えば、該アクチベーターは、 Sc^{3+} 、 Y^{3+} 、 La^{3+} 、 Ce^{3+} 、 Pr^{3+} 、 Nd^{3+} 、 Pm^{3+} 、 Sm^{3+} 、 Eu^{3+} 、 Gd^{3+} 、 Tb^{3+} 、 Dy^{3+} 、 Ho^{3+} 、 Er^{3+} 、 Tm^{3+} 、 Yb^{3+} 、 Lu^{3+} 、 Bi^{3+} 、 Pb^{2+} 、 Mn^{2+} 、 Yb^{2+} 、 Sm^{2+} 、 Eu^{2+} 、 Dy^{2+} 、 Ho^{2+} およびこれらの任意の組み合わせからなる群から選択されてもよく、および、該無機蛍光材料は、スルフィド、チオガレート、ニトリド、オキシニトリド、シリケート、アルミネート、アパタイト、ボレート、酸化物、ホスフェート、ハロホスフェート、スルフェート、タングステネート、タングステート、バナデート、モリブデート、ニオベート、チタネート、ゲルマネート、ハロゲン化物に基づく蛍光体、およびこれらの任意の組み合わせからなる群から選択されてもよい。

20

【0086】

かかる好適な、上に記載の無機蛍光材料は、ナノサイズ蛍光体、蛍光体ハンドブック第2版(CRC Press、2006)、pp. 155 - pp. 338(W. M. Yen、S. ShionoyaおよびH. Yamamoto)、WO2011/147517A、WO2012/034625A、およびWO2010/095140Aなどに記述の量子サイズ材料を包含する周知の蛍光体でもよい。

【0087】

本発明に従って、該有機発光材料、電荷輸送材料として、任意の公知のタイプの材料が好ましくは使用されてもよい。例えば、周知の有機蛍光材料、有機ホスト材料、有機染料、有機電子輸送材料、有機金属錯体、および有機ホール輸送材料。

30

【0088】

散乱粒子の例として、 SiO_2 、 SnO_2 、 CuO 、 CoO 、 Al_2O_3 、 TiO_2 、 Fe_2O_3 、 Y_2O_3 、 ZnO 、 MgO などの無機酸化物の小粒子;重合されたポリスチレン、重合されたPMMMAなどの有機粒子;中空シリカなどの無機中空酸化物、またはこれらの任意の組み合わせが好ましくは使用されてもよい。

- 透明なポリマー

本発明に従って、幅広い様々な公知の、光学デバイスに好適な透明なポリマーが好ましくは使用されてもよい。

40

本発明に従って、用語「透明な」は、少なくともほぼ60%の入射光が、光学媒体において使用される厚さで、および光学媒体の操作の間に使用される波長または波長範囲で透過することを意味する。好ましくはそれは、70%より大きく、より好ましくは75%より大きく、最も好ましくはそれは、80%より大きい。

【0089】

本発明の好ましい態様において、例えばWO 2016/134820Aに記載される公知の透明なポリマーの任意のタイプが使用されてもよい。

本発明に従って、用語「ポリマー」は、繰り返し単位を有する、および重量平均分子量(Mw)1000g/mol以上を有する材料を意味する。

50

【0090】

分子量 M_w は、ポリスチレン内部標準に対して、GPC (=ゲル浸透クロマトグラフィ) の手段で決定される。

本発明のいくつかの態様において、透明なポリマーのガラス転移温度 (T_g) は、70 以上および 250 以下である。

【0091】

T_g は、<http://pslc.ws/macrog/dsc.htm>; Rickey J Seyler, Assignment of the Glass Transition, ASTM 刊行物コードナンバー (PCN) 04 - 012490 - 50 に記載されるなどの、示差走査熱量測定において観測される熱容量の変化に基づき測定される。

10

例えば、透明なマトリックス材料のための透明なポリマーとして、ポリ(メタ)アクリレート、エポキシ、ポリウレタン、ポリシロキサンが好ましくは使用されてもよい。

【0092】

本発明の好ましい態様において、透明なマトリックス材料としてのポリマーの重量平均分子量 (M_w) は、1,000 から 300,000 g/mol までの範囲、より好ましくはそれは 10,000 から 250,000 g/mol までである。

【0093】

- 配合物

別の側面において、本発明は、少なくとも組成物、および

20

少なくとも1つの溶媒、エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノプロピルエーテル、およびエチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル；ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジプロピルエーテル、およびジエチレングリコールジブチルエーテルなどのジエチレングリコールジアルキルエーテル；プロピレングリコールモノメチルエーテル (PGME)、プロピレングリコールモノエチルエーテル、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテル；メチルセロソルブアセタートおよびエチルセロソルブアセタートなどのエチレングリコールアルキルエーテルアセタート；プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート (PGMEA)、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセタート、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルアセタートなどのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート；メチルエチルケトン、アセトン、メチルアミルケトン、メチルイソブチルケトン、およびシクロヘキサノンなどのケトン；エタノール、プロパノール、ブタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、エチレングリコール、およびグリセリンなどのアルコール；エチル3-エトキシプロピオナート、メチル3-メトキシプロピオナートおよびエチルラクタートなどのエステル；およびガンマブチロラクトンなどの環状エステル；クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、およびジクロロベンゼンなどの塩素化炭化水素からなる群の1つ以上の要素から選択される少なくとも1つの溶媒、好ましくは該溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、アルキルアセタート、エチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、およびプロピレングリコールモノアルキルエーテルであり、好ましくは溶媒は、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート (PGMEA) などのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、ブチルアセタートなどのアルキルアセタート、エチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、またはメトキシプロパノールなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテルからなる群の1つ以上の要素から選択され、より好ましくは溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタートから選択される、を含む、本質的にからなる、またはからなる配合物に関する。

30

40

【0094】

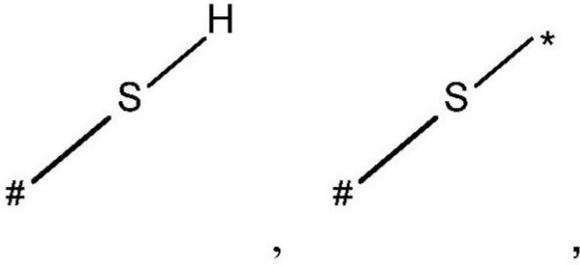
別の側面において、本発明はまた、第1の材料が、以下の化学式 (I) ；

50

X Y Z (I)

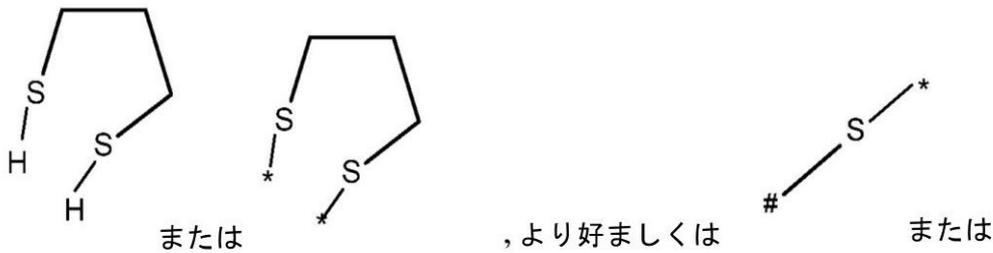
式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基 (attaching group) を表し、好ましくは該付着基は、

【化14】



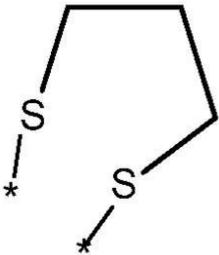
10

【化15】



20

【化16】



30

であり、ここで「#」は、基Yへの連結点を表し、および「*」は、半電導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

【0095】

Yは、単結合、1~15個の炭素原子を有するアルキレン基、または1~15個の炭素原子を有するアルケニレン基、または1~15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり、好ましくはYは、1~15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり、

40

【0096】

Zは、 $- [CH (R^1) - CH (R^2) - Q]_x - R^3$ であり、ここでR¹は、Hまたはメチル基であり、R²は、Hまたはメチル基であり、Qは、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、R³は、Hまたはメチル基であり、xは、整数であり、好ましくはxは、1から300までの、より好ましくは2から200までの、なおより好ましくは4から100までの範囲であり、

【0097】

Zは、 $- [(CHR^1)_n - Q]_x - R^3$ であり、

50

ここで n は、2 または 3 であり、 Q は、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくは Q は、酸素原子であり、 R^1 は、 H またはメチル基であり、 R^3 は、 H またはメチル基であり、 n は、1 ~ 5、好ましくは 1 ~ 3 であり、より好ましくは n は 2 であり、 x は、整数、好ましくは x は、1 から 300 までの、より好ましくは 2 から 200 までの、なおより好ましくは 4 から 100 までの範囲である、

で表される、コア、任意に 1 つ以上のシェル層、少なくとも 1 つの第 1 の材料を含む、少なくとも 1 つの半導性発光ナノ粒子、好ましくは第 1 の材料は、配位子として、コアの表面またはシェル層の最も外の表面に置かれる、

【0098】

および

少なくとも 1 つの溶媒、好ましくはそれは、エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノプロピルエーテル、およびエチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル；ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジプロピルエーテル、およびジエチレングリコールジブチルエーテルなどのジエチレングリコールジアルキルエーテル；プロピレングリコールモノメチルエーテル（PGME）、プロピレングリコールモノエチルエーテル、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテル；メチルセロソルブアセタートおよびエチルセロソルブアセタートなどのエチレングリコールアルキルエーテルアセタート；プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセタート、およびプロピレングリコールモノプロピルエーテルアセタートなどのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート；メチルエチルケトン、アセトン、メチルアミルケトン、メチルイソブチルケトン、およびシクロヘキサノンなどのケトン；エタノール、プロパノール、ブタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、エチレングリコール、およびグリセリンなどのアルコール；エチル 3 - エトキシプロピオナート、メチル 3 - メトキシプロピオナートおよびエチルラクタートなどのエステル；およびガンマブチロラクトンなどの環状エステル；クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、およびジクロロベンゼンなどの塩素化炭化水素からなる群の 1 つ以上の要素から選択され、好ましくは該溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、アルキルアセタート、エチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、およびプロピレングリコールモノアルキルエーテルであり、好ましくは溶媒は、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセタート（PGMEA）などのプロピレングリコールアルキルエーテルアセタート、ブチルアセタートなどのアルキルアセタート、エチレングリコールモノブチルエーテルなどのエチレングリコールモノアルキルエーテル、プロピレングリコール、またはメトキシプロパノールなどのプロピレングリコールモノアルキルエーテルからなる群の 1 つ以上の要素から選択され、より好ましくは溶媒は、プロピレングリコールアルキルエーテルアセタートから選択される、を含む、本質的にからなる、またはからなる配合物にも関する。

【0099】

半導性発光ナノ粒子、および好ましくは配位子としての、第 1 の材料の詳細は、「半導性発光ナノ粒子」および「第 1 の材料」のセクションに記載される。

【0100】

いくつかの態様において、配合物は、追加の材料をさらに含んでもよい。追加の材料の詳細は、「追加の材料」のセクションに記載される。

【0101】

- 使用

別の側面において、本発明は、組成物または配合物の、電子デバイス、光学デバイスにおける、バイオメディカルデバイスにおける、または、電子デバイス、光学デバイスまたはバイオメディカルデバイスを作製するための使用に関する。

【0102】

10

20

30

40

50

- 光学媒体

別の側面において、本発明はさらに、少なくとも1つの組成物または配合物を含む光学媒体に関し、好ましくは、光学媒体は少なくとも1つの組成物を含む。

【0103】

本発明のいくつかの態様において、光学媒体は、光学シート、例えば、カラーフィルター、カラー変換フィルム、リモート蛍光テープ、または別のフィルムまたはフィルターであってもよい。

本発明に従って、用語「シート」は、構造化された媒体などの、フィルムおよび/または層を包含する。

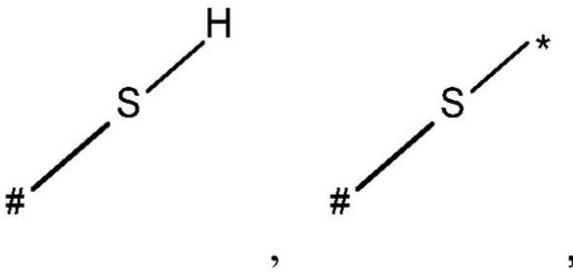
【0104】

別の側面において、本発明はまた、第1の材料が、以下の化学式(I)；

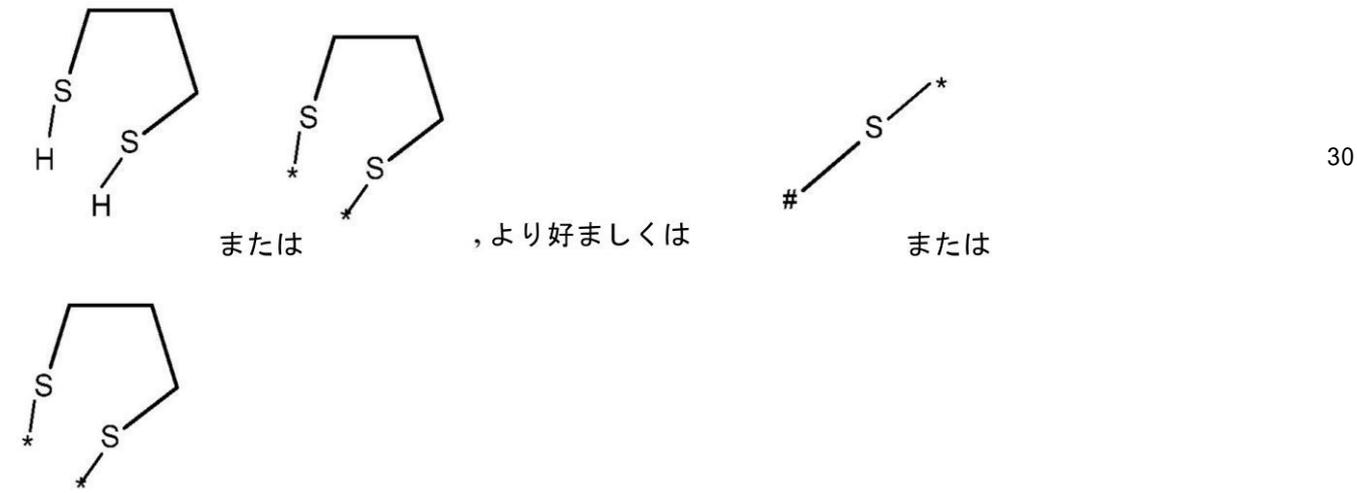


式中、Xは、1つまたは2つのS原子を含む付着基(attaching group)を表し、好ましくは該付着基は、

【化17】



【化18】



【0105】

であり、ここで「#」は、基Yへの連結点を表し、および「*」は、半導性発光ナノ粒子の、コアの表面またはシェル層の最も外の表面への連結点を表し、

【0106】

Yは、単結合、1~15個の炭素原子を有するアルキレン基、または1~15個の炭素原子を有するアルケニレン基、または1~15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり、好ましくはYは、1~15個の炭素原子を有する(ポリ)アルコキシレン基であり、

【0107】

Zは、-[CH(R¹)-CH(R²)-Q]_x-R³であり、ここでR¹は、Hまたはメチル基であり、R²は、Hまたはメチル基であり、Qは、酸素

10

20

30

40

50

原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、R³は、Hまたはメチル基であり、xは、整数、好ましくはxは、1から300までの、より好ましくは2から200までの、なおより好ましくは4から100までの範囲であり、
または

【0108】

Zは、 $-(CHR^1)_n - Q$]_x - R³ であり、

ここでnは、2または3であり、Qは、酸素原子、窒素原子または硫黄原子であり、好ましくはQは、酸素原子であり、R¹は、Hまたはメチル基であり、R³は、Hまたはメチル基であり、nは、1～5、好ましくは1～3であり、より好ましくはnは2であり、xは、整数、好ましくはxは、1から300までの、より好ましくは2から200までの、
なおより好ましくは4から100までの範囲である、

で表される、アノードおよびカソード、および少なくとも1つのコア、任意に1つ以上のシェル層、および第1の材料を含む少なくとも1つの半導性発光ナノ粒子を含む少なくとも1つの有機層を含む光学媒体、または請求項1～9に記載の組成物にも関し、好ましくは、該1つの有機層は、発光層(light emitting layer)であり、より好ましくは、媒体は、正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロッキング層、正孔ブロッキング層、電子ブロッキング層、および電子注入層からなる群から選択される1つ以上の層をさらに含む。

【0109】

本発明のいくつかの態様において、有機層は、少なくとも1つの発光ナノ粒子、第1の材料、およびホスト材料を含み、好ましくはホスト材料は、有機ホスト材料である。

好ましい態様において、有機層は、複数の発光ナノ粒子および第1の材料を含む。

【0110】

- 光学デバイス

別の側面において、本発明はさらに、少なくとも1つの本発明の光学媒体を含む光学デバイスに関する。

本発明のいくつかの態様において、光学デバイスは、液晶ディスプレイデバイス(LCD)、有機発光ダイオード(OLED)、光学ディスプレイのためのバックライトユニット、発光ダイオードデバイス(LED)、微小電気機械システム(以下「MEMS」)、エレクトロウェットティングディスプレイ、または電気泳動ディスプレイ、発光デバイス、および/または太陽電池であってもよい。

用語「放射」は、原子および分子の電子遷移による電磁波の放射を意味する。

【0111】

本発明の技術効果

1. 本発明は、組成物または配合物において半導性発光ナノ粒子の改善された分散性を表す、1つ以上の半導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物を提供する。

2. 本発明は、組成物または配合物において半導性発光ナノ粒子の改善された初期量子収率を表す、1つ以上の半導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物を提供する。

【0112】

3. 本発明は、組成物または配合物において半導性発光ナノ粒子の長期間安定性および安定な量子収率を表す、1つ以上の半導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物を提供する。

4. 本発明は、励起波長でより高い光学密度(「OD」)を表す、1つ以上の半導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物を提供する。

5. 本発明は、より高い濃度で半導性発光ナノ粒子のよりよい分散性を表す、1つ以上の半導性発光ナノ粒子を含む、新規の組成物または配合物を提供する。

【0113】

以下の実施例1-2は、本発明の記載ならびにその作製の詳細な記載を提供する。

【0114】

実施例

実施例 1：半導性発光ナノ粒子を含む組成物の作製

トルエン中、赤い InP に基づく量子材料（以下「QM」）を、U.S. 7,588,828 B に記載されるとおり調製する。

【0115】**- 配位子交換**

0.5 g の赤い InP に基づく量子材料の 8.3 mL トルエン溶液をフラスコに入れ、およびトルエンを減圧下蒸発させる。

次いで、QM を 17 mL の無水テトラヒドロフラン（以下「THF」）に分散させる。および得られた分散体を、反応槽中の 17 mL の THF に溶解させた 1 g のメトキシ - PEG チオール（Sigma Aldrich から）と混合する。次いで、得られた混合物を、N₂ 雰囲気において 85 °C で 19 時間還流させる。19 時間の攪拌後、THF を減圧下蒸発させる。次いで、5 mL の PGMEA を、生じる混合物に添加し、および得られた溶液を N₂ 雰囲気において 150 °C で 4.5 時間還流させる。

10

【0116】**- QM とメトキシ - PEG チオールの溶液からの単離**

配位子交換プロセスにおいて得られた QM を、4.5 mL のオクタンを添加することにより沈殿させる。遠心分離の後、生じる堆積物を、5 mL の PGMEA に分散させる。

次いで、得られた QM を、6 mL のオクタンを添加することにより沈殿させ、および遠心させる。生じる堆積物を 5 mL の PGMEA に再度分散させ、次いで 7 mL のオクタンを添加し、およびそれを遠心させる。

20

【0117】

遠心分離の後、生じる堆積物を減圧下乾燥させる。最後に、0.61 g の暗赤色材料、それはメトキシ - PEG チオール配位子を有する QM である、を得る。

【0118】**- メトキシ - PEG チオール配位子を有する QM を含む組成物の調製**

得られたメトキシ - PEG チオール配位子で安定化された QM を、組成物の総量に基づき 30 wt. % の濃度で PGMEA に分散させ、およびそれを QY 測定のため、5 °C で N₂ 雰囲気下、貯蔵する。次いで試料 1 を QY 測定する。メトキシ - PEG チオール配位子で安定化された QM は、PGMEA に均一に分散する。

30

【0119】**比較例 1：半導性発光ナノ粒子を含む組成物の作製**

トルエン中、赤い InP に基づく量子材料（以下「QM」）を U.S. 7,588,828 B に記載される同じやり方で調製する。

【0120】**- 配位子交換**

0.1 g の赤い InP に基づく量子材料の 1.7 mL トルエン溶液を、フラスコに入れ、およびトルエンを減圧下蒸発させる。

次いで、QM を 2.5 mL のクロロホルムに分散させ、およびそれを 5 mL のクロロホルムに溶解させた 0.27 g の Disperbyk - 170（登録商標）（BYK Japan KK から）と混合させる。

40

得られた混合物を N₂ 雰囲気において 80 °C で 2 時間攪拌させた。

次いでそれを室温まで冷却させる。

【0121】**- QM を含む組成物の調製**

室温まで冷却後、0.4 g の PGMEA を添加し、およびクロロホルムを真空下蒸発させる。

得られた Disperbyk - 170（登録商標）で安定化された QM の PGMEA 溶液中の濃度は、組成物の総量に基づき 30 wt. % であり、およびそれを QY 測定のため、5 °C で N₂ 雰囲気下、貯蔵する。次いで試料 2 および 3 を QY 測定する。

50

【0122】

実施例 2

量子収率計算

実施例 1 および比較例 1 において得られた試料の絶対量子収率は、相対的な技法を経て Hamamatsu 機器により測定される。

【0123】

試料 1 ~ 3 の量子収率を、絶対 PL 量子収率測定システム C9920 - 02 (Hamamatsu) で評価し、および以下の式を使用する。

量子収率 (QY) = 試料から放出された光子の数 / 吸収された試料の光子の数

表 2 および表 3 は、QY 測定の結果を表す。

【0124】

10

【表 2】

表 2

分	試料 1	試料 2
0	0, 826	0, 698
3	0, 829	0, 667
10	0, 829	—
20	0, 835	0, 639
60	0, 833	0, 639
1440	0, 836	0, 605

20

表 3

日	試料 1	試料 3
0	0, 834	0, 759
1	—	0, 736
2	—	0, 714
3	0, 823	—
7	0, 85	0, 702
14	0, 83	0, 725
21	—	0, 722

30

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2018/064684

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. C09K11/02 C09K11/08 C09K11/56 C09K11/70 ADD.		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C09K		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal, WPI Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	OU CHEN ET AL: "Compact high-quality CdSe-CdS core-shell nanocrystals with narrow emission linewidths and suppressed blinking", NATURE MATERIALS, vol. 12, no. 5, 3 February 2013 (2013-02-03), pages 445-451, XP055500543, GB	1-4, 8-11, 13-15
Y	ISSN: 1476-1122, DOI: 10.1038/nmat3539 page 449, column 2 ----- -/--	12,16
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents :		
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family
Date of the actual completion of the international search 31 August 2018		Date of mailing of the international search report 12/09/2018
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Authorized officer Poole, Robert

2

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/EP2018/064684

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	MEHRIBAN ULUSOY ET AL: "Aqueous Synthesis of PEGylated Quantum Dots with Increased Colloidal Stability and Reduced Cytotoxicity", BIOCONJUGATE CHEMISTRY, vol. 27, no. 2, 20 November 2015 (2015-11-20), pages 414-426, XP055500545, US ISSN: 1043-1802, DOI: 10.1021/acs.bioconjchem.5b00491	1-11, 13-15
Y	page 416	12,16
X	BING C MEI ET AL: "Polyethylene glycol-based bidentate ligands to enhance quantum dot and gold nanoparticle stability in biological media", NATURE PROTOCOLS, vol. 4, no. 3, 1 March 2009 (2009-03-01), pages 412-423, XP055502201, GB ISSN: 1754-2189, DOI: 10.1038/nprot.2008.243	1-5, 8-11, 13-15
Y	page 413 - page 414; figure 1	12,16
Y	WO 2009/106810 A1 (NANOCO TECHNOLOGIES LTD [GB]; PICKETT NIGEL [GB]; MCCAIRN MARK CHRISTO) 3 September 2009 (2009-09-03)	12,16
A	claims 15-22	1-11, 13-15
A	WO 2014/181245 A1 (UNIV BOLOGNA ALMA MATER [IT]; UNIV BASEL [CH]) 13 November 2014 (2014-11-13) claim 1	1-16

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2018/064684

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2009106810	A1	03-09-2009	
		AU 2009219983 A1	03-09-2009
		CA 2716552 A1	03-09-2009
		CN 101959933 A	26-01-2011
		CN 103554477 A	05-02-2014
		EP 2250212 A1	17-11-2010
		IL 207721 A	31-10-2013
		JP 5749495 B2	15-07-2015
		JP 2011513508 A	28-04-2011
		KR 20100138925 A	31-12-2010
		KR 20160023925 A	03-03-2016
		TW 200944552 A	01-11-2009
		US 2009212258 A1	27-08-2009
		WO 2009106810 A1	03-09-2009

WO 2014181245	A1	13-11-2014	NONE

フロントページの続き

(51) Int.Cl.		F I		テーマコード(参考)
C 0 8 L 71/00 (2006.01)		C 0 8 L 71/00		Z
C 0 8 L 33/08 (2006.01)		C 0 8 L 33/08		
C 0 8 L 33/10 (2006.01)		C 0 8 L 33/10		
C 0 1 B 25/08 (2006.01)		C 0 1 B 25/08		A
H 0 5 B 33/14 (2006.01)		H 0 5 B 33/14		Z
H 0 5 B 33/02 (2006.01)		H 0 5 B 33/02		
H 0 1 L 51/50 (2006.01)		H 0 5 B 33/14		A
B 8 2 Y 20/00 (2011.01)		B 8 2 Y 20/00		
B 8 2 Y 30/00 (2011.01)		B 8 2 Y 30/00		

(81) 指定国・地域 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), EP(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), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG), 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, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, 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

(72) 発明者 平山裕樹

東京都町田市小山ヶ丘4-6-9-1118

(72) 発明者 岸本匡史

神奈川県相模原市緑区橋本5-11-10-105

(72) 発明者 後藤智久

神奈川県相模原市緑区橋本台1-27-27

(72) 発明者 鈴木成嘉

東京都渋谷区元代々木町36-2-104

(72) 発明者 鈴木照晃

神奈川県相模原市南区鶴野森1-45-1-A103

Fターム(参考) 3K107 AA01 AA05 CC02 CC04 CC21 CC45 DD53 DD54 DD55 DD57
 DD58 DD60 DD68 EE28 FF14
 4H001 CC07 CC09 CC13 XA15 XA16 XA30 XA34 XA48 XA49 XA52
 4J002 BG04W BG05W CH02X DB006 FD206 GT00