



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년03월28일
(11) 등록번호 10-2652514
(24) 등록일자 2024년03월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/02 (2006.01) C09K 11/62 (2006.01)
C09K 11/70 (2006.01) H10K 50/00 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/02 (2013.01)
C09K 11/025 (2021.01)
(21) 출원번호 10-2020-7000082
(22) 출원일자(국제) 2018년06월05일
심사청구일자 2021년05월28일
(85) 번역문제출일자 2020년01월02일
(65) 공개번호 10-2020-0016328
(43) 공개일자 2020년02월14일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2018/064684
(87) 국제공개번호 WO 2018/224459
국제공개일자 2018년12월13일
(30) 우선권주장
17175028.4 2017년06월08일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
Ou Chen 외 10인, Nature Materials 12권,
445-451쪽 (2013)*
(뒷면에 계속)

(73) 특허권자
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세
250
(72) 발명자
히라야마 유키
일본 도쿄도 마치다시 오야마가오카 4-6-9-1118
기시모토 다다시
일본 가나가와켄 사가미하라시 미도리쿠 하시모토
5-11-10-105
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 16 항

심사관 : 박함용

(54) 발명의 명칭 **티올 관능 표면 리간드를 갖는 반도체 발광 나노입자를 포함하는 조성물**

(57) 요약

본 발명은 나노입자를 포함하는 조성물에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

C09K 11/62 (2013.01)

C09K 11/70 (2013.01)

H10K 50/115 (2023.02)

(72) 발명자

고토 도모히사

일본 가나가와켄 사가미하라시 미도리쿠 하시모토
다이 1-27-27

스즈키 마사요시

일본 도쿄도 시부야구 모토요요기쵸 36 2-104

스즈키 테루아키

일본 가나가와켄 사가미하라시 미나미쿠 우노모리
1-45-1-에이103

(56) 선행기술조사문헌

US20040007169 A1

JP2002249633 A

CN102879364 A

Mehriban Ulusoy 외 7인, Bioconjugate Chem.
2016, 27권, 414-426쪽

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명세서

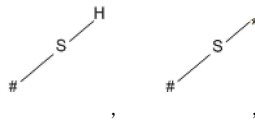
청구범위

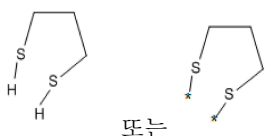
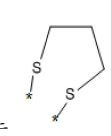
청구항 1

적어도 코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층, 제 1 재료 및 제 2 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 조성물로서,

상기 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;

XYZ - (I)

식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 상기 부착기는  ,

 또는  이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알록실렌기이고;

Z 는 $-[CH(R^1)-CH(R^2)-Q]_x-R^3$ 이고,

여기서 R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^2 는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이거나, 또는 x는 1 내지 300, 또는 2 내지 200, 또는 4 내지 100 범위이거나;

또는

Z 는 $-[(CHR^1)_n-Q]_x-R^3$ 이고,

여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 또는 1 내지 3, 또는 n은 2이고, x는 정수이거나, 또는 x는 1 내지 300, 또는 2 내지 200, 또는 4 내지 100 범위이고,

상기 제 2 재료는 폴리(메트)아크릴레이트, (메트)아크릴레이트 모노머, 실리콘 중합체 및 에폭시 중합체로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 매트릭스 재료인, 조성물.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 매트릭스 재료는 아크릴레이트 모노머, 메타크릴레이트 모노머, 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물인, 조성물.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 코어는 주기율표의 13 족의 하나의 원소와 주기율표의 15 족의 하나의 원소를 포함하거나, 또는 상기 13 족의 원소는 In이고, 상기 15 족의 원소는 P이거나, 또는 상기 코어는 InP, InPZn, InPZnS 및 InGaP로 이루어지는 군으로부터 선택되는, 조성물.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

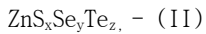
상기 셀 층 중 적어도 하나는 주기율표의 12 족의 제 1 원소를 포함하거나, 또는 상기 제 1 원소는 Zn 또는 Cd 이고, 그리고

주기율표의 16 족의 제 2 원소를 포함하거나, 또는 상기 제 2 원소는 S, Se 또는 Te인, 조성물.

청구항 5

제 1 항에 있어서,

적어도 하나의 셀 층은 하기 화학식 (II)로 표시되고,



식에서 $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $0 \leq z \leq 1$, 및 $x+y+z=1$ 이거나, 또는 $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $z=0$, 및 $x+y=1$ 인, 조성물.

청구항 6

제 1 항에 있어서,

상기 반도체 발광 나노입자의 상기 셀 층은 이중 셀 층인, 조성물.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

상기 조성물은 적어도 하나의 추가 재료를 더 포함하고, 상기 추가 재료는 유기 발광 재료, 무기 발광 재료, 전하 수송 재료, 산란 입자, 광학적으로 투명한 중합체, 산화 방지제, 라디칼 소광제, 중합 개시제 및 추가 리간드로 이루어지는 군으로부터 선택되는, 조성물.

청구항 8

제 1 항에 있어서,

상기 조성물은 복수의 반도체 발광 나노입자를 포함하는, 조성물.

청구항 9

제 1 항에 있어서,

상기 반도체 발광 나노입자의 총량이 상기 조성물의 총량을 기준으로 0.1 wt.% 내지 90 wt.% 범위, 또는 5 wt.% 내지 70 wt.%, 또는 20 wt.% 내지 50 wt.% 범위인, 조성물.

청구항 10

제형으로서,

적어도, 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 기재된 조성물

및

적어도 하나 용매를 포함하고,

상기 적어도 하나의 용매는 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 또는 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알킬 에테르, 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 또는 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 (PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 또는 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 메틸 셀로솔브 아세테이트 또는 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 또는 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤 또는 시클로 헥사논; 알코올, 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글

리콜 또는 글리세린; 에스테르, 에틸 3-에톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 또는 에틸 락테이트; 시클릭 에스터 또는 감마-부티로-락톤; 및 염화 탄화수소, 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠 또는 디클로로벤젠;으로 이루어진 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되거나, 또는

상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르이거나, 또는

상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트 또는 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA); 알킬 아세테이트 또는 부틸 아세테이트; 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르 또는 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 프로필렌 글리콜; 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르 또는 메톡시프로판올;로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되거나, 또는

상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트로부터 선택되는, 조성물.

청구항 11

제형으로서,

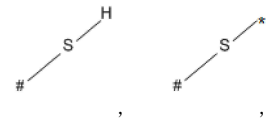
코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층, 제 1 재료 및 제 2 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자,

그리고

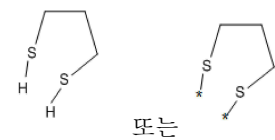
적어도 하나 용매를 포함하고,

상기 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;

XYZ - (I)



식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 상기 부착기는



또는 이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;

Z 는 $-\text{[CH(R}^1\text{)-CH(R}^2\text{)-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,

여기서 R¹은 H 또는 메틸기이고, R²는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, R³은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이거나, 또는 x는 1 내지 300, 또는 2 내지 200, 또는 4 내지 100 범위이거나;

또는

Z 는 $-\text{[(CHR}^1\text{)}_n\text{-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,

여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, R¹은 H 또는 메틸기이고, R³은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 또는 1 내지 3, 또는 n은 2이고, x는 정수이거나, 또는 x는 1 내지 300, 또는 2 내지 200, 또는 4 내지 100 범위이고;

그리고

상기 적어도 하나의 용매는 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 또는 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알

킬 에테르, 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 또는 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 (PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 또는 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 메틸 셀로솔브 아세테이트 또는 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 또는 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤 또는 시클로 헥사논; 알코올, 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글리콜 또는 글리세린; 에스테르, 에틸 3-에톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 또는 에틸 락테이트; 시클릭 에스터 또는 감마-부티로-락톤; 및 염화 탄화수소, 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠 또는 디클로로벤젠;으로 이루어진 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되거나, 또는

상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르이거나; 또는

상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 또는 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA); 알킬 아세테이트 또는 부틸 아세테이트; 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르 또는 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 프로필렌 글리콜; 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르 또는 메톡시프로판올;로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되거나, 또는

상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트로부터 선택되고,

상기 제 2 재료는 폴리(메트)아크릴레이트, (메트)아크릴레이트 모노머, 실리콘 중합체 및 에폭시 중합체로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 매트릭스 재료인, 제형.

청구항 12

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 기재된 조성물로서, 상기 조성물은 전자 디바이스, 광학 디바이스, 생의학 디바이스에서 사용되거나 또는 전자 디바이스, 광학 디바이스 또는 생의학 디바이스를 제조하기 위해 사용되는, 조성물.

청구항 13

적어도 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 기재된 상기 조성물, 또는 제 11 항에 기재된 제형을 포함하는, 광학 매체.

청구항 14

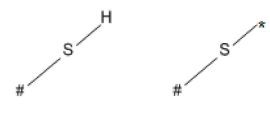
광학 매체로서,

애노드 및 캐소드, 및 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 기재된 조성물, 또는 적어도 코어, 선택적으로 하나 이상의 쉘 층 및 제 1 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 적어도 하나의 유기 층을 포함하고,

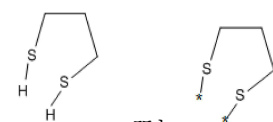
상기 하나의 유기층은 발광층이고, 상기 매체는 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 차단층, 정공 차단층, 전자 차단층 및 전자 주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하고,

상기 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;

XYZ - (I)



식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 상기 부착기는



또는 이고, 여기서 '#'는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 '*'는 상기 반도체 발광 나노

입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;

Z는 $-\text{[CH}(\text{R}^1)\text{-CH}(\text{R}^2)\text{-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,

여기서 R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^2 는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이거나, 또는 x는 1 내지 300, 또는 2 내지 200, 또는 4 내지 100 범위이거나;

또는

Z는 $-\text{[(CHR}^1\text{)}_n\text{-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,

여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 또는 1 내지 3, 또는 n은 2이고, x는 정수이거나, 또는 x는 1 내지 300, 또는 2 내지 200, 또는 4 내지 100 범위인, 광학 매체.

청구항 15

제 14 항에 있어서,

상기 유기 층은 적어도 하나의 발광 나노입자 및 제 14 항의 제 1 재료, 및 호스트 재료를 포함하고, 상기 호스트 재료는 유기 호스트 재료인, 광학 매체.

청구항 16

제 13 항에 기재된 적어도 하나의 광학 매체를 포함하는, 광학 디바이스.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 반도체 발광 나노입자를 포함하는 조성물, 제형, 조성물의 용도, 제형의 용도, 광학 매체 및 광학 디바이스에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 코어 및 적어도 하나의 리간드를 포함하는 반도체 발광 나노입자 및 반도체 발광 나노입자를 포함하는 조성물은 선행 기술 문헌에 공지되어 있다.

[0003] 예를 들어, J. Am. Chem. Soc. 9804, 132, 2010은 비스(DHLA)-PEG-OCH₃으로 캡핑된 CdSe/ZnS 및 CdSe/CdZnS/ZnS QD들을 개시하고 있다.

[0004] J. Am. Chem. Soc. 739, 126, 2004는 키모트립신 (ChT)의 인식을 위한 티오알킬 및 티오알킬화 올리고(에틸렌 글리콜) (OEG) 리간드를 갖는 CdSe 나노입자를 개시하고 있다.

[0005] 그리고 Zn-DDT (1-도데칸티올) 중합체를 갖는 QD 비드는 US 2016/0289552 A1에 공개되어 있다.

선행기술문헌

특허문헌

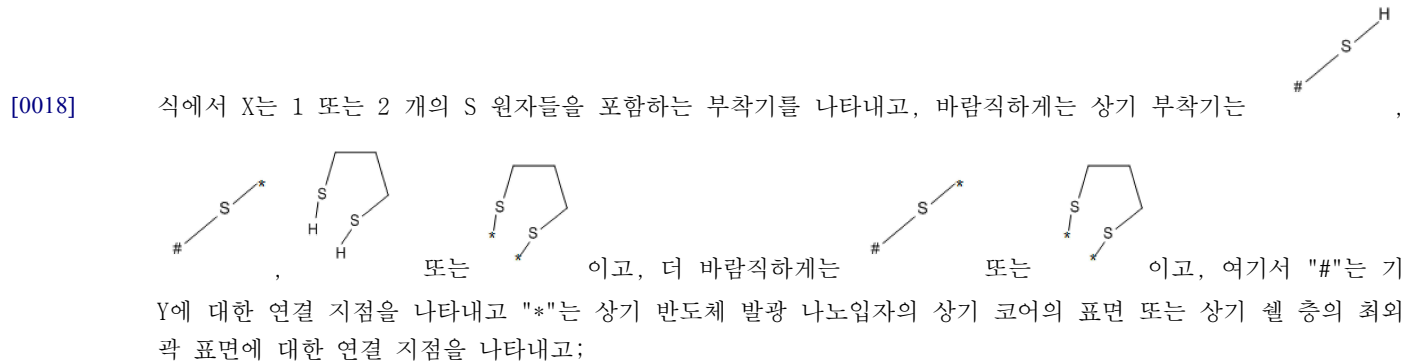
[0006] (특허문헌 0001) US 2016-0289552 A1

비특허문헌

- [0007] (비특허문헌 0001) J. Am. Chem. Soc. 9804, 132, 2010
- (비특허문헌 0002) J. Am. Chem. Soc. 739, 126, 2004

발명의 내용

- [0008] 그러나, 본 발명자들은 아래에 열거된 바와 같이 개선이 요망되는 하나 이상의 상당한 문제점들이 여전히 있음을 새롭게 발견했다.
- [0009] 1. 조성물 또는 제형에서 상기 반도체 발광 나노입자의 개선된 분산성을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형이 요구된다.
- [0010] 2. 조성물 또는 제형에서 상기 반도체 발광 나노입자의 개선된 초기 양자 수율을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형이 요구된다.
- [0011] 3. 조성물 또는 제형에서 상기 반도체 발광 나노입자의 장기 안정성 및 안정된 양자 수율을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형이 요구된다.
- [0012] 4. 여기 과정에서 더 높은 광학 밀도 ("OD") 를 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형이 요구된다.
- [0013] 5. 보다 높은 농도에서 반도체 발광 나노입자의 더 우수한 분산성을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형이 요구된다.
- [0014] 본 발명자는 상기 언급된 문제 1~5 중 하나 이상을 해결하고자 하였다.
- [0015] 그후, 적어도 코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층, 제 1 재료 및 제 2 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자를 포함하거나, 본질적으로 이로 이루어지거나, 또는 이로 이루어진 신규한 조성물이 발견되었으며,
- [0016] 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;
- [0017] XYZ - (I)



- [0019] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;
- [0020] Z는 $-\text{[CH(R}^1\text{)-CH(R}^2\text{)-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,
- [0021] 여기서 R¹은 H 또는 메틸기이고, R²은 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R³은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;
- [0022] 또는

[0023] Z 는 $-\left[(CHR^1)_n-Q\right]_x-R^3$ 이고,

[0024] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R¹은 H 또는 메틸기이고, R³은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2 이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이다.

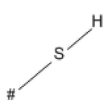
[0025] 다른 양태에서, 본 발명은 또한 본 발명의 조성물, 및 적어도 하나 용매를 적어도 포함하는 신규한 제형에 관한 것으로,

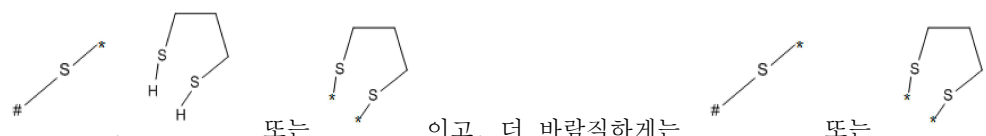
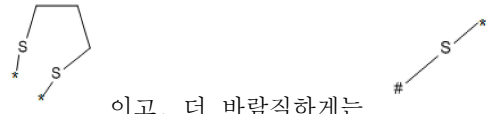
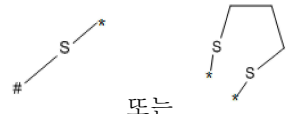
[0026] 바람직하게는 상기 적어도 하나의 용매는 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 및 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알킬 에테르, 예컨대 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 및 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 (PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 메틸 셀로솔브 아세테이트 및 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 예컨대 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤 및 시클로 헥사논; 알코올, 예컨대 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글리콜 및 글리세린; 에스테르, 예컨대 에틸 3-메톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 및 에틸 락테이트; 및 시클릭 애스터, 예컨대 감마-부티로-락톤; 염화 탄화수소, 예컨대 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠 및 디클로로벤젠으로 이루어진 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르이고; 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 알킬 아세테이트, 예컨대 부틸 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 프로필렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 메톡시프로판올로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 보다 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트로부터 선택된다.

[0027] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층, 및 적어도 하나의 제 1 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자, 및 적어도 하나 용매를 적어도 포함하는 신규한 제형에 관한 것으로,

[0028] 바람직하게 제 1 재료는 리간드로서 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면 상에 배치되며, 여기서 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;

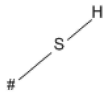
[0029] XYZ - (I)

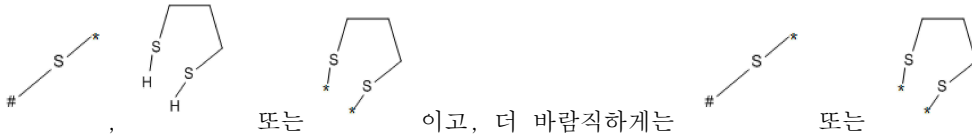
[0030] 식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 바람직하게는 상기 부착기는 ,


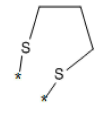
 , 또는  이고, 더 바람직하게는  이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0031] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;

- [0032] Z는 $-\text{[CH(R}^1\text{)-CH(R}^2\text{)-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,
- [0033] 여기서 R¹은 H 또는 메틸기이고, R²는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R³은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;
- [0034] 또는
- [0035] Z는 $-\text{[(CHR}^1\text{)}_n\text{-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,
- [0036] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R¹은 H 또는 메틸기이고, R³은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이고;
- [0037] 그리고
- [0038] 바람직하게는 상기 적어도 하나의 용매는 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 및 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알킬 에테르, 예컨대 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 및 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 (PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 메틸 셀로솔브 아세테이트 및 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 예컨대 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤 및 시클로 헥사논; 알코올, 예컨대 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글리콜 및 글리세린; 에스테르, 예컨대 에틸 3-메톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 및 에틸 락테이트; 및 시클릭 애스터, 예컨대 감마-부티로-락톤; 염화 탄화수소, 예컨대 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠 및 디클로로벤젠으로 이루어진 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르이고; 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 알킬 아세테이트, 예컨대 부틸 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 프로필렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 메톡시프로판올로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 보다 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트로부터 선택된다.
- [0039] 또 다른 양태에서, 본 발명은 전자 디바이스, 광학 디바이스, 생의학 디바이스에서의 또는 전자 디바이스, 광학 디바이스 또는 생의학 디바이스를 제조하기 위한, 조성물, 또는 제형의 용도에 관한 것이다.
- [0040] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 상기 조성물 또는 제형을 포함하는 광학 매체에 관한 것이다.
- [0041] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 애노드 및 캐소드, 및 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 기재된 조성물, 또는 적어도 코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층 및 제 1 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 적어도 하나의 유기 층을 포함하는 광학 매체에 관한 것으로,
- [0042] 바람직하게는 상기 하나의 유기층은 발광층이고, 보다 바람직하게는 상기 매체는 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 차단층, 정공 차단층, 전자 차단층 및 전자 주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하고,
- [0043] 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;
- [0044] XYZ - (I)

[0045] 식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 바람직하게는 상기 부착기는 ,



이고, 더 바람직하게는  또는  이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0046] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알록실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알록실렌기이고;

[0047] Z는 $-[CH(R^1)-CH(R^2)-Q]_x-R^3$ 이고,

[0048] 여기서 R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^2 는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R^3 은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;

[0049] 또는

[0050] Z는 $-[(CHR^1)_n-Q]_x-R^3$ 이고,

[0051] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2 이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이다.

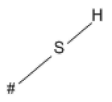
[0052] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 본 발명의 적어도 하나의 광학 매체를 포함하는 광학 디바이스에 관한 것이다.

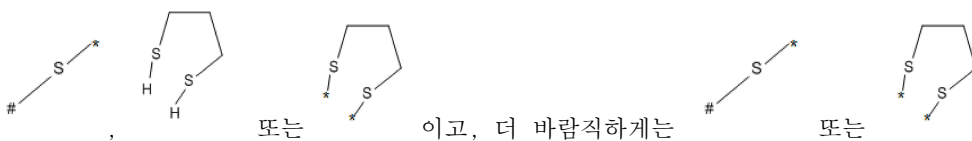
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용


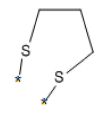
[0053] 본 발명에 따르면, 하나의 실시형태에서, 조성물은 적어도 코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층, 제 1 재료 및 제 2 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자를 포함하거나, 본질적으로 이로 이루어지거나, 또는 이로 이루어지며,

[0054] 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;

[0055] XYZ - (I)

[0056] 식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 바람직하게는 상기 부착기는 ,



이고, 더 바람직하게는  또는  이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0057] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기,

또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;

[0058] Z는 $-[\text{CH}(\text{R}^1)-\text{CH}(\text{R}^2)-\text{Q}]_x-\text{R}^3$ 이고,

[0059] 여기서 R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^2 는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R^3 은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;

[0060] 또는

[0061] Z는 $-[(\text{CHR}^1)_n-\text{Q}]_x-\text{R}^3$ 이고,

[0062] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이다.

[0063] 바람직하게는, 화학식 (I)로 표시되는 상기 제 1 재료는 반도체 발광 나노입자의 리간드로서 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면 상에 배치된다.

[0064] 바람직하게는, 상기 조성물은 복수의 반도체 발광 나노입자들을 포함한다.

[0065] - 제 2 재료

[0066] 본 발명의 일부 실시형태에서, 제 2 재료는 유기 발광 재료, 무기 발광 재료, 전하 수송 재료, 예컨대 전자 수송 유기 재료, 산란 입자, 호스트 재료, 반도체 무기 재료 및 매트릭스 재료로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 매트릭스 재료는 폴리(메트)아크릴레이트, (메트)아크릴레이트 모노머, 실리콘 중합체, 에폭시 중합체로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 매트릭스 제 1 재료는 아크릴레이트 모노머, 메타크릴레이트 모노머, 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이고, 더욱 바람직하게는 매트릭스 재료는 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이다.

[0067] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 상기 제 2 재료는 폴리(메트)아크릴레이트, (메트)아크릴레이트 모노머, 실리콘 중합체, 에폭시 중합체로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택된 매트릭스 재료이고, 바람직하게는 상기 매트릭스 재료는 아크릴레이트 모노머, 메타크릴레이트 모노머, 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이고, 더욱 바람직하게는 매트릭스 재료는 폴리 아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이다.

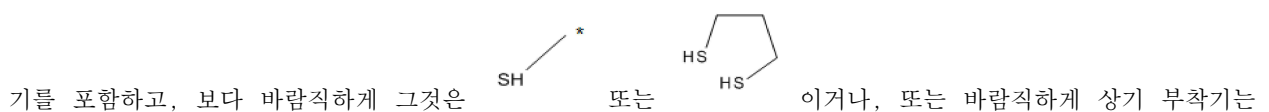
[0068] 따라서, 본 발명의 일부 실시형태에서, 조성물은

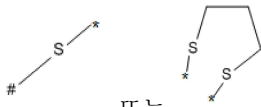
[0069] 코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층, 및 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면 상에 배치된 제 1 재료로서의 적어도 하나의 리간드를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자, 그리고 적어도 하나의 매트릭스 재료를 포함하거나, 본질적으로 이들로 이루어지거나, 또는 이들로 이루어지며,

[0070] 리간드는 하기 화학식 (I)로 표시되고;

[0071] $\text{XYZ}-(\text{I})$

[0072] 식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 바람직하게는 부착기는 1 또는 2 개의 티올





또는 이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 반도체 발광 나노입자의 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0073] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;

[0074] Z는 $-[CH(R^1)-CH(R^2)-Q]_x-R^3$ 이고,

[0075] 여기서 R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^2 는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R^3 은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;

[0076] 또는

[0077] Z는 $-[(CHR^1)_n-Q]_x-R^3$ 이고,

[0078] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2 이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이고;

[0079] 그리고

[0080] 적어도 하나의 매트릭스 재료는 폴리(메트)아크릴레이트, (메트)아크릴레이트 모노머, 실리콘 중합체, 에폭시 중합체로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 매트릭스 재료는 아크릴레이트 모노머, 메타크릴레이트 모노머, 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이고, 더욱 바람직하게는 매트릭스 재료는 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이다.

[0081] - 매트릭스 재료

[0082] 본 발명에 따르면, 일부 실시형태에서, 조성물은 폴리(메트)아크릴레이트, (메트)아크릴레이트 모노머, 실리콘 중합체, 에폭시 중합체로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택된 적어도 하나의 매트릭스 재료를 포함하고, 바람직하게는 상기 매트릭스 재료는 아크릴레이트 모노머, 메타크릴레이트 모노머, 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이고, 더욱 바람직하게는 매트릭스 재료는 폴리아크릴레이트, 폴리메타크릴레이트 또는 이들의 혼합물이다.

[0083] 본 발명의 일부 실시형태에서, 매트릭스 재료는 폴리-(메트)아크릴레이트 및/또는 (메트)아크릴레이트 모노머를 포함한다.

[0084] 본 발명에 따르면, 용어 "폴리-(메트)아크릴레이트"는 아크릴산, 메타크릴산, 아크릴레이트, 메타크릴레이트 및 이들 중 임의의 것의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 모노머의 중합에 의해 수득된 중합체의 총칭을 의미한다.

[0085] 바람직하게는, 폴리-(메트)아크릴레이트는 폴리-아크릴레이트 또는 폴리-메타크릴레이트이다. 그리고 바람직하게는 (메트)아크릴레이트 모노머는 아크릴레이트 모노머 또는 메타크릴레이트 모노머이다.

[0086] 본 발명의 폴리-(메트)아크릴레이트는 상술되지 않은 다른 모노머 단위를 추가로 포함할 수 있으며, 폴리-(메트)아크릴레이트의 범위에서 본 발명의 효과를 나타낼 수 있다.

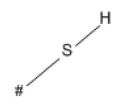
[0087] 본 발명에 따르면, 폴리-(메트)아크릴레이트의 중량 평균 분자량은 특별히 제한되지 않는다.

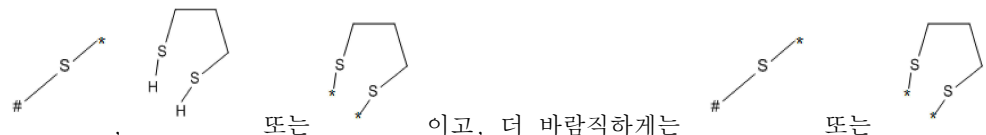
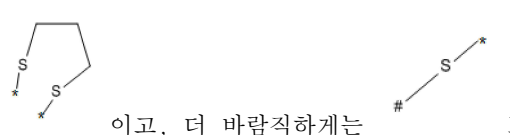
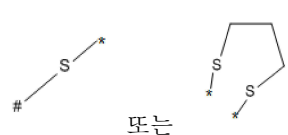
[0088] 바람직하게는 2,000 내지 100,000의 범위에 있고, 더욱 바람직하게는 3,000 내지 30,000의 범위에 있다.

[0089] 폴리-(메트)아크릴레이트로서, 공지된 하나 이상의 폴리-아크릴레이트 또는 폴리-메타크릴레이트가 사용될 수

있다.

- [0090] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 폴리실록산과의 양호한 중합 반응을 실현하기 위해, 산기를 포함하는 반복 단위를 포함하는 실란 변성 폴리-(메트)아크릴레이트, 폴리-(메트)아크릴레이트는 단독으로 또는 혼합물로 사용될 수 있다.
- [0091] 실란 변성 폴리-(메트)아크릴레이트, 실록시기 및/또는 실란올기 치환된 폴리-아크릴레이트 또는 폴리-메타크릴레이트의 예로서, 탄소-탄소 불포화 결합, 실리콘 올리고머 또는 실리콘 오일을 포함하는 실란 커플링제와 반응하는 폴리아크릴레이트 또는 폴리 메타크릴레이트가 바람직하게 사용될 수 있다.
- [0092] 이론에 구속되지 않고, 실란 변성 폴리-(메트)아크릴레이트는 폴리실록산의 용해도를 향상시킬 수 있는 것으로 여겨진다.
- [0093] 보다 바람직하게는, 실란 커플링제 및 폴리-(메트)아크릴레이트로 제조된 공중합체가 사용될 수 있다.
- [0094] 여기서, 실란 커플링제의 예로서 KBM-1003, KME-1003, KBM-1403 또는 KBM-5103 (Shinetsu. Co. 제조), 및 실리콘 오일의 예로서 X-22-174DX, X-22-2426, X-22-2475 또는 X-22-1602 (Shinetsu. Co. 제조) 를 바람직하게 사용할 수 있다.
- [0095] 본 발명에 따르면, 불포화 결합의 수는 특별히 제한되지 않는다. 실록산과의 보다 우수한 반응성 및 상용성을 조정함으로써, (메트)아크릴 중합체에서 이중 결합 당량 (에틸렌성 불포화 결합 당량) 의 값은 바람직하게는 10 내지 500 g/eq 범위이다.
- [0096] 산기를 포함하는 반복 단위를 포함하는 (메트)아크릴 중합체로는, 카르복실기, 설포기 또는 페놀계 수산기로 이루어지는 군에서 선택되는 측쇄를 포함하는 (메트)아크릴 중합체가 있다.
- [0097] 산기를 함유하는 반복 단위를 포함하는 (메트)아크릴 중합체는 감광성 조성물의 경화되지 않은 부분의 현상제에 대한 더 나은 용해도를 초래할 수 있는 것으로 여겨진다.
- [0098] 본 발명에 따르면, 산기의 수는 특별히 제한되지 않는다. 감광성 조성물의 보다 우수한 반응성 및 저장 안정성을 조정함으로써, (메트)아크릴 중합체의 산기는 바람직하게는 (메트)아크릴 중합체 1 g을 기준으로 50 내지 500 mg KOH의 범위이다.
- [0099] - 제 1 재료
- [0100] 본 발명에 따르면, 바람직하게는 반도체 발광 나노입자의 리간드로서 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;
- [0101] XYZ - (I)

[0102] 식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 바람직하게는 상기 부착기는  ,

 , 또는  이고, 더 바람직하게는  이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0103] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;

[0104] Z는 $-[CH(R^1)-CH(R^2)-Q]_x-R^3$ 이고,

[0105] 여기서 R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^2 는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R^3 은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직

하계는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;

[0106] 또는

[0107] Z는 $-[(CHR^1)_n-Q]_x-R^3$ 이고,

[0108] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2 이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이다.

[0109] 본 발명의 일부 실시형태에서, 바람직하게는 상기 제 1 재료는 리간드로서 반도체 발광 나노입자의 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면 상에 배치된다.

[0110] 본 발명의 일부 실시형태에서, 반도체 발광 나노입자의 코어의 표면 또는 하나 이상의 셸 층의 최외곽 표면은 리간드로서 재료에 의해 부분적으로 또는 완전히 코팅될 수 있다.

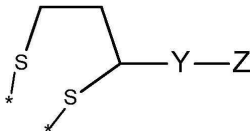
[0111] 본 발명의 일부 실시형태에서, 화학식 (I)로 표시되는 리간드로서의 적어도 2 개의 재료가 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면에 부착되고, 바람직하게는 복수의 상기 리간드가 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면 상에 부착된다.

[0112] 본 발명에 따르면, 일부 실시형태에서, 바람직하게는 리간드로서, 상기 제 1 재료의 함량은 반도체 발광 나노입자의 총 중량과 관련하여 1 중량% 내지 80 중량%, 보다 바람직하게는 20 중량% 내지 70 중량%, 보다 더 바람직하게는 40 중량% 내지 65 중량% 범위이다.

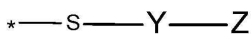
[0113] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 바람직하게는 리간드로서 제 1 재료의 중량 평균 분자량 (Mw) 는 200 g/몰 내지 30,000 g/몰, 바람직하게는 250 g/몰 내지 2,000 g/몰, 보다 바람직하게는 400 g/몰 내지 1,000 g/몰 범위이다.

[0114] 분자량 (M_w)는 내부 폴리스티렌 표준에 대한 GPC (= 겔 투과 크로마토그래피) 에 의해 결정된다.

[0115] 바람직한 실시형태에서, 바람직하게는 리간드로서의 재료는 하기 화학식 (Ia) 또는 (Ib) 로 표시된다.



(Ia)



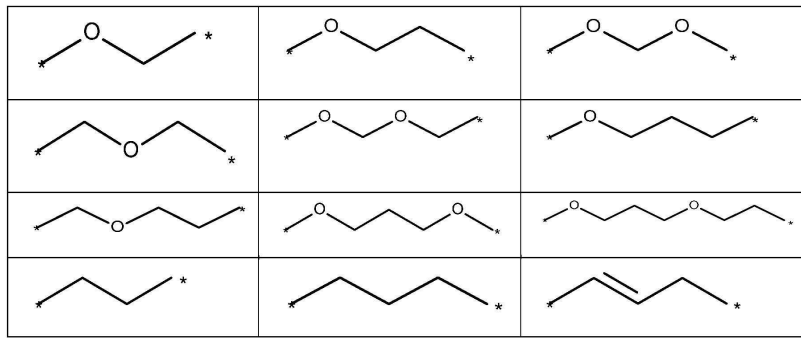
(Ib)

[0116]

[0117] 보다 바람직하게는 Z 는 $-[(CHR^1)_n-Q]_x-R^3$ 이고, 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 700, 보다 바람직하게는 2 내지 350, 더욱 더 바람직하게는 4에서 200 범위이다.

[0118] 바람직하게는, Y는 하기 표 1의 군으로부터 선택된다.

표 1



[0119]

[0120] 여기서 "*"는 그룹 X 및 Z에 대한 연결 지점을 나타낸다.

[0121] 공개적으로 이용 가능한 폴리에틸렌 글리콜 (PEG) 티올, 폴리프로필렌 글리콜 티올 및 이들의 유도체 (예를 들어 시그마-알드리치 (Sigma-Aldrich) 제조) 가 상기 지시된 리간드로서 바람직하게 사용될 수 있다.

[0122] - 반도체 발광 나노입자

[0123] 본 발명에 따르면, "반도체"라는 용어는 실온에서 도체 (예컨대 구리) 와 절연체 (예컨대 유리) 사이의 정도로 전기 전도성을 갖는 재료를 의미한다. 바람직하게, 반도체는 온도에 따라 전기 전도도가 증가하는 재료이다.

[0124] 용어 "나노사이즈"는 0.1 nm 내지 999 nm, 바람직하게는 1nm 내지 150nm, 보다 바람직하게는 3nm 내지 50nm의 사이즈를 의미한다.

[0125] 따라서, 본 발명에 따르면, "반도체 발광 나노입자"는 사이즈가 0.1 nm 내지 999 nm, 바람직하게는 1 nm 내지 150 nm, 더욱 바람직하게는 3 nm 내지 50 nm이고, 전기 전도성이 실온에서 도체 (예컨대 구리) 와 절연체 (예컨대 유리) 사이의 정도인 발광 재료를 의미하는 것으로 여겨지며, 바람직하게는 반도체는 온도에 따라 전기 전도도가 증가하는 재료이며, 사이즈는 0.1 nm 내지 999 nm, 바람직하게는 0.5 nm 내지 150 nm, 더욱 바람직하게는 1 nm 내지 50 nm이다.

[0126] 본 발명에 따르면, 용어 "사이즈"는 반도체 나노사이즈의 발광 입자의 가장 긴 축의 평균 직경을 의미한다.

[0127] 반도체 나노사이즈의 발광 입자의 평균 직경은 Tecnai G2 Spirit Twin T-12 투과 전자 현미경으로 만든 TEM 이미지에서 100 반도체 발광 나노입자를 기준으로 계산된다.

[0128] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 본 발명의 반도체 발광 나노입자는 양자 사이즈의 재료이다.

[0129] 본 발명에 따르면, 용어 "양자 사이즈"는, 예를 들어 ISBN:978-3-662-44822-9에 기재된 바와 같이, 양자 한정 효과를 나타낼 수 있는, 리간드 또는 또 다른 표면 개질이 없는 반도체 재료 자체의 사이즈를 의미한다.

[0130] 예를 들어, CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnSeS, ZnTe, ZnO, GaAs, GaP, GaSb, HgS, HgSe, HgTe, InAs, 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 합금 및 이들 중 어느 것의 조합이 사용될 수 있다.

[0131] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 코어는 주기율표의 13 족의 하나의 원소와 주기율표의 15 족의 하나의 원소를 포함하고, 바람직하게는 13 족의 원소는 In이고, 15 족의 원소는 P이고, 더욱 바람직하게는 코어는 InP, InPZn, InPZnS 및 InGaP로 이루어지는 군으로부터 선택된다.

[0132] 본 발명에 따르면, 반도체 발광 나노입자의 코어의 형상의 타입, 및 합성될 반도체 발광 나노입자의 형상의 타입은 특별히 제한되지 않는다.

[0133] 예를 들어, 구형, 세장형, 별형, 다면체형, 피라미드형, 테트라포드형, 사면체형, 혈소관형, 원뿔형 및 불규칙형 코어 및 - 또는 반도체 발광 나노입자가 합성될 수 있다.

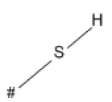
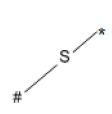
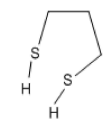
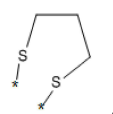

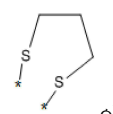
- [0134] 본 발명의 일부 실시형태에서, 코어의 평균 직경은 1.5 nm 내지 3.5 nm 범위이다.
- [0135] 코어의 평균 직경은 Tecnai G2 Spirit Twin T-12 투과 전자 현미경으로 만든 TEM 이미지에서 100 개의 반도체 발광 나노입자를 기준으로 계산된다.
- [0136] 본 발명의 일부 실시형태에서, 셸 층은 주기율표의 12 족의 1st 원소 및 주기율표의 16 족의 2nd 원소를 포함하거나 이로 구성되며, 바람직하게 1st 원소는 Zn 이고, 2nd 원소는 S, Se 또는 Te이다.
- [0137] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 셸 층은 하기 화학식 (II)로 표시되고,
- [0138] $ZnS_xSe_yTe_z$, - (II)
- [0139] 식에서 화학식 (II), $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $0 \leq z \leq 1$ 및 $x+y+z=1$ 이며, 바람직하게는 셸 층은 ZnSe, ZnS_xSe_y , $ZnSe_yTe_z$ 또는 ZnS_xTe_z 이다.
- [0140] 본 발명의 일부 실시형태에서, 상기 셸 층은 합금 셸 층 또는 등급이 매겨진 셸 층이고, 바람직하게는 상기 등급이 매겨진 셸 층은 ZnS_xSe_y , $ZnSe_yTe_z$, 또는 ZnS_xTe_z 이고, 보다 바람직하게는 ZnS_xSe_y 이다.
- [0141] 본 발명의 일부 실시형태에서, 반도체 발광 나노입자는 상기 셸 층 상의 2nd 셸 층을 더 포함하고, 바람직하게는 2nd 셸 층은 주기율표의 12 족의 3rd 원소 및 주기율표의 16 족의 4th 원소를 포함하거나 또는 이들로 이루어지며, 보다 바람직하게는 3rd 원소 및 4th 원소가 동일하지 않다면 3rd 원소는 Zn 이고, 4th 원소는 S, Se 또는 Te이다.
- [0142] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 2nd 셸 층은 하기 화학식 (II')로 표시되고,
- [0143] $ZnS_xSe_yTe_z$, - (II')
- [0144] 여기서 식 (II'), $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $0 \leq z \leq 1$ 및 $x+y+z=1$ 이며, 바람직하게는 층 및 2nd 셸 층이 동일하지 않다면 셸 층은 ZnSe, ZnS_xSe_y , $ZnSe_yTe_z$, 또는 ZnS_xTe_z 이다.
- [0145] 본 발명의 일부 실시형태에서, 상기 2nd 셸 층은 합금 셸 층일 수 있다.
- [0146] 본 발명의 일부 실시형태에서, 반도체 발광 나노입자는 멀티셸로서 2nd 셸 층 상에 하나 이상의 추가 셸 층을 더 포함할 수 있다.
- [0147] 본 발명에 따르면, 용어 "멀티셸"은 3 개 이상의 셸층으로 이루어진 적층된 셸층을 나타낸다.
- [0148] 예를 들어, CdSe/CdS, CdSeS/CdZnS, CdSeS/CdS/ZnS, ZnSe/CdS, CdSe/ZnS, InP/ZnS, InP/ZnSe, InP/ZnSe/ZnS, InZnP/ZnS, InZnP/ZnSe, InZnP/ZnSe/ZnS, InGaP/ZnS, InGaP/ZnSe, InGaP/ZnSe/ZnS, InZnPS/ZnS, InZnPS ZnSe, InZnPS/ZnSe/ZnS, ZnSe/CdS, ZnSe/ZnS 또는 이들의 임의의 조합이 바람직하게 사용될 수 있다. 바람직하게는, InP/ZnS, InP/ZnSe, InP/ZnSe/ZnS, InZnP/ZnS, InZnP/ZnSe, InZnP/ZnSe/ZnS, InGaP/ZnS, InGaP/ZnSe, InGaP/ZnSe/ZnS 이다.
- [0149] 본 발명의 일부 실시형태에서, 조성물은 2 개 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함한다.
- [0150] 본 발명의 일부 실시형태에서, 조성물은 복수의 반도체 발광 나노입자를 포함한다.
- [0151] 본 발명의 일부 실시 형태에서, 반도체 발광 나노입자의 총량은 조성물의 총량을 기준으로 0.1 wt.% 내지 90 wt.%, 바람직하게는 5 wt.% 내지 70 wt.%, 더 바람직하게는 20 wt.% 내지 50 wt.% 범위이다.
- [0152] - 추가 리간드
- [0153] 본 발명의 일부 실시형태에서, 임의로, 반도체 발광 나노입자는 화학식 (I)로 표시되는 재료에 더하여 상이한 타입의 리간드를 포함할 수 있다.
- [0154] 따라서, 본 발명의 일부 실시형태에서, 반도체 발광 나노입자의 코어 또는 셸 층의 최외곽 표면은 원한다면 화학식 (I)로 표시되는 리간드와 함께 하나 이상의 다른 리간드로 오버 코팅될 수 있다.
- [0155] 반도체 발광 나노입자의 셸 층(들)의 코어 또는 최외곽 표면 상에 상기 다른 리간드 중 하나 이상이 부착된 경

우, 화학식 (I)로 표시되는 리간드의 양은 셸 층(들)의 최외곽 표면에 부착된 총 리간드의 30 wt.% 내지 99.9 wt.%의 범위이고, 바람직하게는 50 wt.% 내지 95 wt.%의 범위이고, 보다 바람직하게는 60 wt.% 내지 90 wt.%의 범위이다.

- [0156] 본 발명의 일부 실시형태에서, 조성물은 하나 이상의 첨가제를 더 포함할 수 있다.
- [0157] 바람직하게는, 상기 첨가제는 상기 다른 리간드로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0158] 이론에 구애됨이 없이, 그러한 표면 리간드는 용매에 나노사이즈의 형광 재료를 보다 쉽게 분산시키는 것에 이를 수 있다고 믿어진다.
- [0159] 일반적으로 사용되는 표면 리간드는 포스포핀 및 포스포핀 옥사이드, 예컨대 트리옥틸포스포핀 옥사이드 (TOPO), 트리옥틸포스포핀 (TOP) 및 트리부틸포스포핀 (TBP); 포스포산, 예컨대 도데실포스포산 (DDPA), 트리데실포스포산 (TDPA), 옥타데실포스포산 (ODPA) 및 헥실포스포산 (HPA); 아민, 예컨대 올레일아민, 데데실 아민 (DDA), 테트라데실 아민 (TDA), 헥사데실 아민 (HDA) 및 옥타데실 아민 (ODA), 올레일아민 (OLA), 1-옥타데센 (ODE), 티올, 예컨대 헥사데칸 티올 및 헥산 티올; 메르캅토 카르복실산, 예컨대 메르캅토 프로피온산 및 메르캅토운데카노산; 카르복실산, 예컨대 올레산, 스테아르산, 미리스틴산; 아세트산 및 이들 중 임의의 것의 조합을 포함한다. 그리고 또한, 폴리에틸렌아민 (PEI) 도 바람직하게 사용될 수 있다.
- [0160] 표면 리간드의 예는, 예를 들어, 국제 특허 출원 공개 No. WO 2012/059931A 에 기재되어 있다.
- [0161] - 추가 재료
- [0162] 본 발명의 일부 실시형태에서, 상기 조성물은 적어도 하나의 추가 재료를 더 포함할 수 있고, 바람직하게는 추가 재료는 유기 발광 재료, 무기 발광 재료, 전하 수송 재료, 산란 입자, 광학적으로 투명한 중합체, 산화 방지제, 라디칼 소광제, 중합 개시제 및 추가 리간드로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0163] 예를 들어, 상기 액티베이터는 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+} 및 이들 중 임의의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있고, 상기 무기 형광 재료는 황화물, 티오갈레이트, 질화물, 산질화물, 규산염, 알루미늄네이트, 인회석, 붕산염, 산화물, 포스페이트, 할로포스페이트, 셀레이트, 텅스테네이트, 탄탈레이트, 바나데이트, 몰리브데이트, 니오베이트, 티타네이트, 게르미네이트, 할라이드계 포스포, 및 이들 중 임의의 조합으로 이루어지는 군으로부터 선택될 수 있다.
- [0164] 이러한 상술한 적합한 무기 형광 재료는 포스포 핸드북, 제 2 편집본 (CRC Press, 2006), pp. 155 - pp. 338 (W.M.Yen, S.Shionoya 및 H.Yamamoto), WO2011/147517A, WO2012/034625A, 및 WO2010/095140A 에 언급된 바와 같은 나노사이즈 포스포, 양자 사이즈 재료를 포함하는 주지된 포스포일 수 있다.
- [0165] 본 발명에 따르면, 상기 유기 발광 재료로서, 전하 수송 재료로서, 임의의 유형의 공지된 재료가 바람직하게 사용될 수 있다. 예를 들어, 주지된 유기 형광 재료, 유기 호스트 재료, 유기 염료, 유기 전자 수송 재료, 유기 금속 착물, 및 유기 정공 수송 재료를 들 수 있다.
- [0166] 산란 입자의 예로, SiO_2 , SnO_2 , CuO , CoO , Al_2O_3 , TiO_2 , Fe_2O_3 , Y_2O_3 , ZnO , MgO 와 같은 무기 산화물의 작은 입자; 중합된 폴리스티렌, 중합된 PMMA와 같은 유기 입자; 중공 실리카와 같은 무기 중공 산화물 또는 이들 중 임의의 조합이 바람직하게 사용될 수 있다.
- [0167] - 투명한 폴리머
- [0168] 본 발명에 따르면, 광학 디바이스에 적합한 광범위한 공지된 투명 매트릭스 폴리머가 바람직하게 사용될 수 있다.
- [0169] 본 발명에 따르면, 용어 "투명"은 광학 매체의 작동 중에 사용되는 파장 또는 파장 범위에서 그리고 광학 매체에 사용되는 두께에서 적어도 약 60 %의 입사광 투과를 의미한다. 바람직하게, 이는 70 % 를 넘고, 더욱 바람직하게는 75 % 를 넘고, 가장 바람직하게는 이는 80 % 를 넘는다.
- [0170] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 예를 들어 WO 2016/134820A에 기재된 임의의 유형의 공지된 투명 폴리머가 사용될 수 있다.
- [0171] 본 발명에 따르면, 용어 "폴리머"는 반복 단위를 갖고 중량 평균 분자량 (Mw) 이 1000 g/mol 이상인 재료를 의

미한다.

- [0172] 분자량 (M_w) 는 내부 폴리스티렌 표준에 대한 GPC (= 겔 투과 크로마토그래피) 에 의해 결정된다.
- [0173] 본 발명의 일부 실시형태에서, 투명 폴리머의 유리 전이 온도 (T_g) 는 70°C 이상 250°C 이하이다.
- [0174] T_g 는 <http://pslc.ws/macrog/dsc.htm>; Rickey J Seyler, 유리 전이 지정, ASTM 간행물 코드 번호 (PCN) 04-012490-50에 기술된 바와 같이 시차 주사 색도계에서 관찰된 열 용량의 변화에 기초하여 측정된다.
- [0175] 예를 들어, 투명 매트릭스 재료용 투명 폴리머로서, 폴리(메트)아크릴레이트, 에폭시, 폴리우레탄, 폴리실록산 이 바람직하게 사용될 수 있다.
- [0176] 본 발명의 바람직한 실시형태에서, 투명 매트릭스 재료로서 폴리머의 중량 평균 분자량 (M_w) 은 1,000 내지 300,000 g/mol 범위, 보다 바람직하게 10,000 내지 250,000 g/mol 범위이다.
- [0177] - 제형
- [0178] 다른 양태에서, 본 발명은 적어도 조성물 및 적어도 하나의 용매를 포함하거나, 본질적으로 이들로 이루어지거나, 또는 이들로 이루어지는 제형에 관한 것으로,
- [0179] 적어도 하나의 용매는 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 및 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알킬 에테르, 예컨대 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 및 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 (PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 메틸 셀로솔브 아세테이트 및 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 예컨대 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤 및 시클로 헥사논; 알코올, 예컨대 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글리콜 및 글리세린; 에스테르, 예컨대 에틸 3-메톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 및 에틸 락테이트; 및 시클릭 에스터, 예컨대 감마-부티로-락톤; 염화 탄화수소, 예컨대 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠 및 디클로로벤젠으로 이루어진 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르이고; 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 알킬 아세테이트, 예컨대 부틸 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 프로필렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 메톡시프로판올로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 보다 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트로부터 선택된다.
- [0180] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 코어, 선택적으로 하나 이상의 셸 층, 및 적어도 하나의 제 1 재료를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자, 그리고 적어도 하나의 용매를 포함하고, 본질적으로 이들로 이루어지거나, 또는 이들로 이루어지는 제형에 관한 것으로,
- [0181] 바람직하게 상기 제 1 재료는 코어의 표면 또는 셸 층의 최외곽 표면 상에 배치되고, 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;
- [0182] XYZ - (I)

- [0183] 식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 바람직하게는 상기 부착기는  ,  ,  또는  이고, 더 바람직하게는  또는  이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셸 층의 최외" data-bbox="10 808 902 916"/>

곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

- [0184] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;
- [0185] Z는 $-\text{[CH(R}^1\text{)-CH(R}^2\text{)-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,
- [0186] 여기서 R¹은 H 또는 메틸기이고, R²는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R³은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;
- [0187] 또는
- [0188] Z 는 $-\text{[(CHR}^1\text{)}_n\text{-Q]}_x\text{-R}^3$ 이고,
- [0189] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R¹은 H 또는 메틸기이고, R³은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2 이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이고;
- [0190] 그리고
- [0191] 적어도 하나의 용매는 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 및 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알킬 에테르, 예컨대 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 및 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 (PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 메틸 셀로솔브 아세테이트 및 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 예컨대 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤 및 시클로 헥사논; 알코올, 예컨대 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글리콜 및 글리세린; 에스테르, 예컨대 에틸 3-에톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 및 에틸 락테이트; 및 시클릭 에스터, 예컨대 감마-부티로-락톤; 염화 탄화수소, 예컨대 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠 및 디클로로벤젠으로 이루어진 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르이고; 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 예컨대 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트 (PGMEA), 알킬 아세테이트, 예컨대 부틸 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르, 프로필렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 예컨대 메톡시프로판올로 이루어지는 군의 하나 이상의 멤버로부터 선택되고, 보다 바람직하게는 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트로부터 선택된다.
- [0192] 반도체 발광 나노입자 및 바람직하게는 리간드로서의 제 1 재료의 세부 사항은 "반도체 발광 나노입자" 및 "제 1 재료"의 섹션에 기재되어 있다.
- [0193] 일부 실시형태들에서, 제형은 추가 재료를 더 포함할 수 있다. 추가 재료의 세부 사항은 "추가 재료"의 섹션에 기재되어 있다.
- [0194] - 용도
- [0195] 또 다른 양태에서, 본 발명은 전자 디바이스, 광학 디바이스, 생의학 디바이스에서의 또는 전자 디바이스, 광학 디바이스 또는 생의학 디바이스를 제조하기 위한, 조성물, 또는 제형의 용도에 관한 것이다.
- [0196] - 광학 매체
- [0197] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 적어도 조성물 또는 제형을 포함하는 광학 매체에 관한 것으로, 바람직하게

는 광학 매체는 적어도 조성물을 포함한다.

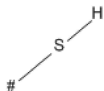
[0198] 본 발명의 일부 실시형태에서, 광학 매체는 광학 시트, 예를 들어 컬러 필터, 색 변환 필름, 원격 포스포 테이프 또는 다른 필름 또는 필터일 수 있다.

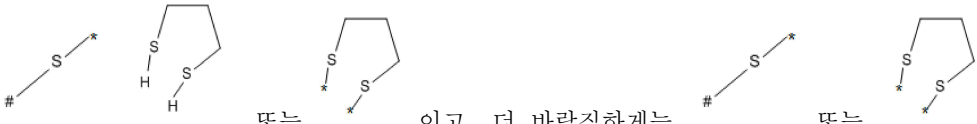
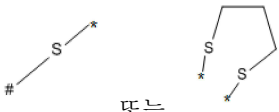
[0199] 본 발명에 따르면, 용어 "시트"는 필름 및/또는 층상 구조 매체를 포함한다.

[0200] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 애노드 및 캐소드, 및 적어도 코어, 선택적으로 하나 이상의 셀 층 및 제 1 재료를 포함하는 적어도 하나의 발광 나노입자를 포함하는 적어도 하나의 유기 층, 또는 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 기재된 조성물을 포함하는 광학 매체에 관한 것으로, 바람직하게는 상기 하나의 유기층은 발광 층이고, 보다 바람직하게는 상기 매체는 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 차단층, 정공 차단층, 전자 차단층 및 전자 주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하고,

[0201] 제 1 재료는 하기 화학식 (I)로 표시되고;

[0202] XYZ - (I)

[0203] 식에서 X는 1 또는 2 개의 S 원자들을 포함하는 부착기를 나타내고, 바람직하게는 상기 부착기는 ,

 이고, 더 바람직하게는  이고, 여기서 "#"는 기 Y에 대한 연결 지점을 나타내고 "*"는 상기 반도체 발광 나노입자의 상기 코어의 표면 또는 상기 셀 층의 최외곽 표면에 대한 연결 지점을 나타내고;

[0204] Y는 단일 결합, 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알킬렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 또는 1 내지 15개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고, 바람직하게는 Y는 1 내지 15 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)알콕실렌기이고;

[0205] Z는 $-[CH(R^1)-CH(R^2)-Q]_x-R^3$ 이고,

[0206] 여기서 R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^2 는 H 또는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이며, R^3 은 H 또는 메틸기이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 보다 더 바람직하게는 4 내지 100 범위이거나;

[0207] 또는

[0208] Z 는 $-[(CHR^1)_n-Q]_x-R^3$ 이고,

[0209] 여기서 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이고, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R^1 은 H 또는 메틸기이고, R^3 은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더욱 바람직하게는 n은 2 이고, x는 정수이고, 바람직하게는 x는 1 내지 300, 보다 바람직하게는 2 내지 200, 더욱 더 바람직하게는 4에서 100 범위이다.

[0210] 본 발명의 일부 실시형태에서, 유기층은 적어도 하나의 발광 나노입자, 제 1 재료 및 호스트 재료를 포함하고, 바람직하게는 호스트 재료는 유기 호스트 재료이다.

[0211] 바람직한 실시형태에서, 유기층은 복수의 발광 나노입자 및 제 1 재료를 포함한다.

[0212] - 광학 디바이스

[0213] 또 다른 양태에서, 본 발명은 또한 본 발명의 적어도 하나의 광학 매체를 포함하는 광학 디바이스에 관한 것이다.

[0214] 본 발명의 일부 실시형태에서, 광학 디바이스는 액정 디스플레이 디바이스 (LCD), 유기 발광 다이오드 (OLED),

광학 디스플레이용 백라이트 유닛, 발광 다이오드 (LED), 마이크로 전기 기계 시스템 (여기서는 이하 "MEMS"라 함), 전기 습윤 디스플레이, 또는 전기 영동 디스플레이, 조명 디바이스, 및/또는 태양 전지일 수 있다.

[0215] 용어 "방출 (emission)"은 원자 및 분자에서의 전자 전이에 의한 전자기파의 방출을 의미한다.

[0216] 본 발명의 기술적 효과

[0217] 1. 본 발명은 조성물 또는 제형에서 상기 반도체 발광 나노입자의 개선된 분산성을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형을 제공한다.

[0218] 2. 본 발명은 조성물 또는 제형에서 상기 반도체 발광 나노입자의 개선된 초기 양자 수율을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형을 제공한다.

[0219] 3. 본 발명은 조성물 또는 제형에서 상기 반도체 발광 나노입자의 개선된 초기 양자 수율을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형을 제공한다.

[0220] 4. 본 발명은 여기 파장에서 더 높은 광학 밀도 ("OD") 를 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형을 제공한다.

[0221] 5. 본 발명은 보다 높은 농도에서 반도체 발광 나노입자의 더 우수한 분산성을 나타내는 하나 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함하는 신규한 조성물 또는 제형을 제공한다.

[0222] 하기 작업예 1 내지 2 는 본 발명의 설명 및 이들의 제작에 대한 상세한 설명을 제공한다.

[0223] **작업예**

[0224] **작업예 1: 반도체 발광 나노입자를 포함하는 조성물의 제조**

[0225] 툴루엔 중의 적색 InP 기반 양자 재료 (이하 "QM") 는 US 7,588,828 B에 기술된 바와 같이 제조된다.

[0226] - 리간드 교환

[0227] 8.3 mL 툴루엔 용액 중 0.5 g의 적색 InP 기반 양자 재료를 플라스크에 넣고 툴루엔을 감압하에서 증발시킨다.

[0228] 그후, QM을 17 mL의 무수 테트라하이드로푸란 (이하 "THF") 에 분산시킨다. 그리고 수득된 분산액을 반응 용기에서 17mL THF에 용해된 1g의 메톡시-PEG 티올 (Sigma Aldrich 제조) 과 혼합한다. 그후, 수득한 혼합물을 N₂분위기에서 85°C에서 19 시간 동안 환류시킨다. 19 시간 교반한 후, THF를 감압하에 증발시킨다.

[0229] 그후, 5 mL의 PGMEA를 생성된 혼합물에 첨가하고, 수득한 용액을 N₂분위기에서 150 °C에서 4.5 시간 동안 환류시킨다.

[0230] - 용액으로부터 메톡시-PEG 티올에 의한 QM의 단리

[0231] 리간드 교환 공정에서 수득된 QM은 4.5 mL의 옥탄을 첨가함으로써 침전시킨다. 원심 분리 후, 생성된 침전물은 5 mL의 PGMEA에 분산된다. 그후, 6 mL의 옥탄을 첨가하여 수득된 QM을 침전시키고 원심 분리한다. 생성된 침전물을 5mL의 PGMEA에 다시 분산시킨 다음, 7mL의 옥탄을 첨가하고 원심 분리한다.

[0232] 원심 분리후, 생성된 침전물을 감압 하에서 건조시킨다. 최종적으로, 메톡시-PEG 티올 리간드를 갖는 QM 인진한 적색 재료 0.61g이 수득된다.

[0233] - 메톡시-PEG 티올 리간드를 갖는 QM을 포함하는 조성물의 제조

[0234] 메톡시-PEG 티올 리간드로 안정화된 수득된 QM은 조성물의 총량을 기준으로 30 wt.%의 농도로 PGMEA에 분산되고 QY 측정을 위해 5°C의 N₂ 분위기하에서 저장된다. 그후 QY 측정을 위해 샘플 1을 취한다. 메톡시-PEG 티올 리간드로 안정화된 QM은 PGMEA에 균질하게 분산된다.

[0235] **비교예 1: 반도체 발광 나노입자를 포함하는 조성물의 제조**

[0236] 툴루엔 중의 적색 InP 기반 양자 재료 (이하 "QM") 는 US 7,588,828 B에 기술된 것과 동일한 방식으로 제조된다.

[0237] - 리간드 교환

[0238] 1.7 mL 툴루엔 용액 중 0.1 g의 적색 InP 기반 양자 재료를 플라스크에 넣고 툴루엔을 감압하에서 증발시킨다.

- [0239] 그후, QM을 2.5 mL의 클로로포름에 분산시키고 5mL의 클로로포름에 용해된 0.27 g의 Disperbyk-170[®] (BYK Japan KK 제조) 과 혼합한다.
- [0240] 수득한 혼합물을 N₂ 분위기에서 80℃에서 2 시간 동안 교반한다.
- [0241] 그후 실온으로 냉각시킨다.
- [0242] - QM을 포함하는 조성물의 제조
- [0243] 실온으로 냉각시킨 후, 0.4g의 PGMEA를 첨가하고 클로로포름을 진공하에서 증발시킨다.
- [0244] PGMEA 용액 중의 Disperbyk-170[®] 로 안정화된 수득된 QM의 농도는 조성물의 총량을 기준으로 30 wt.%이고 QY 측정을 위해 5℃의 N₂ 분위기하에서 저장된다.
- [0245] 그후 QY 측정을 위해 샘플 2 및 3을 취한다.
- [0246] **작업예 2:**
- [0247] **양자 수율 계산**
- [0248] 작업예 1 및 비교예 1에서 수득된 샘플의 절대 양자 수율은 상대 기술을 통해 하마마츠 (Hamamatsu) 기기에 의해 측정된다.
- [0249] 샘플 1 내지 3의 양자 수율은 절대 PL 양자 수율 측정 시스템 C9920-02 (하마마츠) 로 평가되고, 하기 식이 사용된다.
- [0250] 양자 수율 (QY) = 샘플에서의 방출된 광자 수/샘플의 흡수된 광자 수
- [0251] 표 2 및 표 3은 QY 측정 결과들을 보여준다.

표 2

분	샘플 1	샘플 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

[0252]

표 3

일	샘플 1	샘플 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

[0253]