(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0017027
(43) 공개일자 2024년02월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09D 11/38 (2014.01) *C09D 4/00* (2006.01)
C09D 5/22 (2006.01) *C09D 7/65* (2018.01)
C09K 11/02 (2006.01) *C09K 11/08* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09D 11/38 (2013.01)
C09D 4/00 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2023-7045516
(22) 출원일자(국제) 2022년05월31일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2023년12월29일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2022/064692
(87) 국제공개번호 WO 2022/253799
국제공개일자 2022년12월08일
(30) 우선권주장
21177021.9 2021년06월01일
유럽특허청(EPO)(EP)

(71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
코소이 엘리자베타
이스라엘 91390 예루살렘 기바트 람 에드몬드 제이 사프라 캠퍼스 하이-테크 파크 큐라이트 나노테크 리미티드 씨/오
사토 히로모토
일본 도쿄도 메구로쿠 시모메구로 1-8-1 아르코 타워 5카이 메르크 일렉트로닉스 가부시키가이샤 나이
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인코리아나

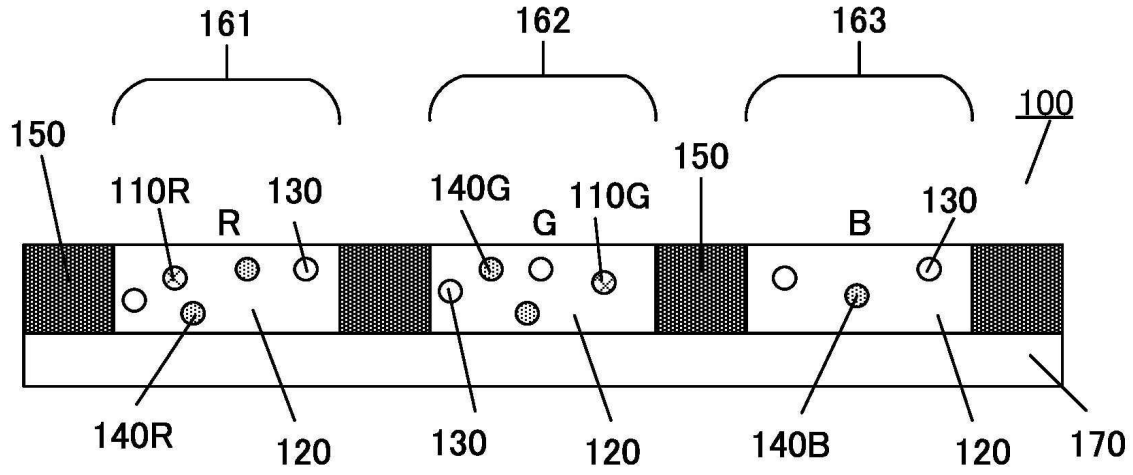
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 **조성물**

(57) 요 약

본 발명은 적어도 하나의 발광 모이어티를 포함하는 조성물에 관한 것이다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
C09D 5/22 (2013.01)
C09D 7/65 (2018.01)
C09K 11/02 (2013.01)
C09K 11/08 (2013.01)
(72) 발명자
기시모토 다다시
일본 도쿄도 메구로쿠 시모메구로 1-8-1 아르코 타워 5카이 메르크 일렉트로닉스 가부시키가이샤 나이
고토 도모히사
일본 도쿄도 메구로쿠 시모메구로 1-8-1 아르코 타워 5카이 메르크 일렉트로닉스 가부시키가이샤 나이
스즈키 데루아키
일본 도쿄도 메구로쿠 시모메구로 1-8-1 아르코 타워 5카이 메르크 일렉트로닉스 가부시키가이샤 나이

명 세 서

청구범위

청구항 1

조성물로서,

적어도;

i) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티;

ii) 적어도 1종의 반응성 모노머 또는 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물; 및

iii) 화합물

을 포함하며,

상기 화합물은,

1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하거나 (상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있음);

또는

1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 치환되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 치환되는, 상기 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하는 (바람직하게는 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않음), 조성물.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 화합물은, 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 3급 아민, 카르복실기, 헤테로 시클릭기, 실란기, 술폰산, 히드록실기, 포스폰산으로 이루어진 그룹의 멤버 중 하나 이상으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 더 포함하는, 조성물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클

로-알킬기로 이루어진 그룹의 하나 이상의 멤머로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 그리고

상기 리간드는, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 상기 비극성 리간드의 상기 그룹의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 또는

상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 리간드로부터 선택된 그룹의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 상기 비극성 리간드의 상기 그룹의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 그리고

상기 리간드는, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있는, 조성물.

청구항 4

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 조성물 중의 상기 화합물의 총량(T)은, 하기 식(I^a) 및 (II^a)에 기초하여 결정되는, 조성물.

$Tch = (Pl - Pm) * Al / (Pm - P)$ - (I^a)

Pl: 상기 발광 모이어티의 상기 리간드의 극성값

Pm: 상기 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물이 상기 조성물에 사용되는 상기 모노머 혼합물의 극성값

Al: 상기 리간드의 총량

P: 상기 화합물의 극성값

Tch: 상기 화합물의 미리 결정된 총량

$T=Tch*Z$ - (II^a)

$0.5 \leq Z \leq 1.5$, 바람직하게는 $0.7 \leq Z \leq 1.3$, 더 바람직하게는 $0.8 \leq Z \leq 1.2$;

T: 상기 화합물의 총량

청구항 5

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

상기 발광 모이어티의 총 중량에 대한 상기 화합물의 총 중량의 비는 0.6:40 내지 1:3 범위이며; 상기 발광 모이어티가 무기 발광 재료인 경우에, 상기 무기 발광 재료의 무기 부분의 중량에 대한 상기 화합물의 중량의 비는 0.003부터 3.2까지 범위인, 조성물.

청구항 6

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서,

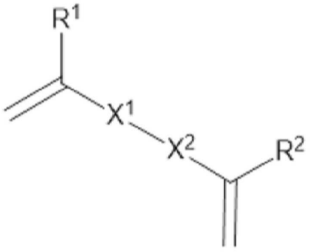
상기 반응성 모노머는, 모노-(메트)아크릴레이트 모노머, 디-(메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 트리-(메트)아크릴레이트 모노머로부터 선택되는 (메트)아크릴레이트 모노머이며,

바람직하게는, 상기 모노머 혼합물의 상기 반응성 모노머는 각각 독립적으로 모노-(메트)아크릴레이트 모노머, 디-(메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 트리-(메트)아크릴레이트 모노머로부터 선택되는, 조성물.

청구항 7

제 6 항에 있어서,

상기 디-(메트)아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (I^b)로 표시되고, 상기 모노-아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (II^b)로 표시되고 그리고/또는 상기 트리-(메트)아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (III^b)로 표시되며;



(I^b)

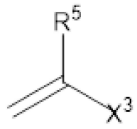
식 중

X^1은 비치환 또는 치환된 알킬기 또는 아릴기이며, 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1는 에스테르기이고;

X^2는비치환 또는 치환된 알킬기 또는 아릴기이며, 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1는 에스테르기이고;

R^1은 수소 원자, Cl, Br, 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기이며, 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1는 에스테르기이며, 바람직하게는 상기 에스테르기는 카르복실산기이고;

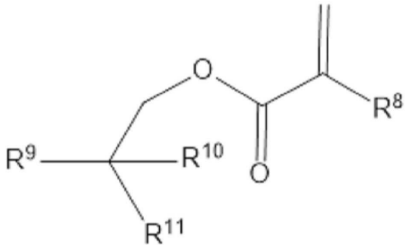
R^2는 수소 원자, Cl, Br, 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기이며, 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1는 에스테르기이며, 바람직하게는 상기 에스테르기는 카르복실산기이고;



(II^b)

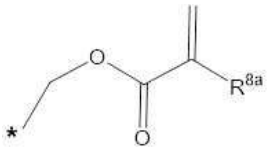
X^3은 비치환된 또는 치환된 알킬기, 아릴기 또는 알콕시기이고;

R^5는 수소 원자, Cl, Br 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 에스테르기 또는 카르복실산기이고;



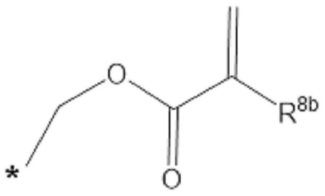
(III^b);

식 중 R^9는 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (IV^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이며



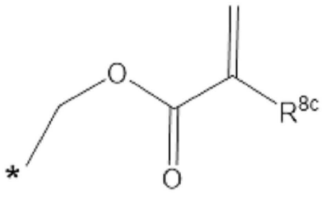
(IV^b);

R^{10}은 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (V^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이고



(V^b);

R^{11}은 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (VI^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이고



(VI^b);

R^8, R^{8a}, R^{8b} 및 R^{8c}는, 각각의 경우에 각각 독립적으로 또는 서로 의존적으로, H 또는 CH_3이며;

R^9, R^{10} 및 R^{11} 중 적어도 하나는 (메트)아크릴기인, 조성물.

청구항 8

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 조성물의 점도는, 1000[1/s]에서의 전단율, 25 ℃에서 레오미터에 의해 측정된 상온에서의 35 (cP) 이하인, 조성물.

청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서,

iii) 제 1 항의 발광 모이어티와 상이한 다른 발광 모이어티;

iv) 다른 (메트)아크릴레이트 모노머;

v) 산란 입자, 및

vi) 광학적으로 투명한 폴리머, 산화방지제, 라디칼 소광제, 광 개시제 및/또는 계면활성제

로 이루어진 그룹의 하나 인상의 멤버로부터 선택되는 다른 재료를 포함하는, 조성물.

청구항 10

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 조성물은 상기 조성물의 총량을 기준으로 10중량% 이하의 용매를 포함하는, 조성물.

청구항 11

조성물을 제조하기 위한 방법으로서,

I) 발광 모이어티의 리간드의 극성값 및/또는 발광 모이어티의 리간드의 화학적 구조를 식별하는 단계;

II) 상기 리간드의 극성값 및/또는 상기 발광 모이어티의 화학적 구조에 기초하여 화합물을 선택하여 상기 조성물 중의 모든 상기 리간드의 극성값과 상기 화합물의 극성값의 합을 수정하는 단계;

III) 적어도 단계 (I)의 발광 모이어티와 반응성 모노머 또는 모노머 혼합물을 혼합하여 상기 조성물을 수득하는 단계;

IV) 1종의 단일 반응성 모노머가 상기 조성물에 사용되는 경우 상기 반응성 모노머의 극성값을 식별하거나, 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물이 상기 조성물에 사용되는 경우 상기 모노머 혼합물의 극성값을 식별하는 단계;

V) 선택적으로, 상기 발광 모이어티의 상기 리간드의 극성값에 기초하여 상기 화합물의 양을 결정하는 단계를 포함하며,

상기 화합물은 단계 III) 이전, 단계 III)에서 또는 단계 III) 이후, 바람직하게는 단계 III)에서 또는 단계 III) 이후에 첨가되는, 조성물을 제조하기 위한 방법.

청구항 12

층을 형성하기 위한 방법으로서,

S1) 바람직하게는 잉크 제팅에 의해, 기판 상에 제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항의 조성물을 제공하는 단계;

S2) 상기 조성물을 경화시키는 단계를 포함하며, 바람직하게 상기 경화는 광 조사, 열 경화 또는 광 경화와 열 경화의 조합에 의해 수행되는, 층을 형성하기 위한 방법.

청구항 13

층으로서,

적어도;

X) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

XI) (메트)아크릴레이트 폴리머; 및

XII) 화합물

을 포함하며,

상기 화합물은,

1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있는, 상기 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알콕실기 또는 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알콕실기; 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알콕실기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 분지쇄 아릴-알콕실기; 및 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 시클로-알콕실기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 포함하거나;

또는

1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있는, 상기 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 2 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알케닐기; 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 분지쇄 알케닐기; 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기; 6 내지 45개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 아릴-알케닐기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 분지쇄 아릴-알케닐기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 시클로-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 포함하며; 바람직하게는 상기 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않는, 층.

청구항 14

색변환 디바이스(100)로서,

적어도, 발광 모이어티(110)를 포함하는 매트릭스 재료(120)를 적어도 포함하는 제 13 항의 층으로 부분적으로 또는 완전히 충전된 제1 픽셀(161), 및 적어도 폴리머 재료를 포함하는 뱅크(150)를 포함하며, 바람직하게는 상기 색변환 디바이스(100)는 지지 매체(170)를 더 포함하는, 색변환 디바이스(100).

청구항 15

광학 디바이스(300)로서,

광을 변조하도록 구성되거나 광을 방출하도록 구성된 적어도 하나의 기능성 매체(320, 420, 520), 및 제 14 항의 색변환 디바이스(100)를 포함하는, 광학 디바이스(300).

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 적어도 하나의 발광 모이어티(moiety)를 포함하는, 바람직하게는 광경화성(photocuable)조성물인, 조성물; 층, 색변환 디바이스, 광학 디바이스, 조성물을 제조하기 위한 방법, 층, 색변환 디바이스, 적어도 하나의 색변환 장치를 포함하는 광학 장치를 제조하기 위한 방법에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] WO 2017/054898 A1은, 적색 방출형 나노결정, 습윤(wetting) 및 분산(dispersing)제, 용매로서의 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트, 산 기(acid group)를 포함하는 아크릴 단위 및 실란 변성(silane modified)

아크릴 단위를 포함하는 아크릴 폴리머 혼합물을 포함하는 조성물을 기술한다.

[0003] WO 2019/002239 A1은 반도체(semiconducting) 발광 나노입자, 폴리머 및 (메트)아크릴레이트, 예컨대 90 cp 정도의 높은 점도를 갖는 1.4. 시클로헥산디메탄올-모노아크릴레이트를 포함하는 조성물을 개시한다.

선행기술문헌

특허문헌

[0004] (특허문헌 0001) WO 2017/054898 A1

(특허문헌 0002) WO 2019/002239 A1

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 그러나 본 발명자들은, 아래에 열거된 바와 같은, 개선이 요망되는 상당한 문제점들 중 하나 이상이 여전히 존재함을 새롭게 발견했다:

[0006] 반응성 모노머 또는 2 종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물을 포함하는 조성물 중 발광 모이어티의 개선된 균질한 분산, 조성물 중 산란 입자의 개선된 균질한 분산, 바람직하게는 발광 입자 및 산란 입자 둘 모두의 개선된 균질한 분산, 더 바람직하게는 용매 없이 발광 모이어티 및/또는 산란 입자의 개선된 균질한 분산; 잉크젯(inkjet) 프린팅에 적합한 더 낮은 점도를 갖는 조성물, 바람직하게는 발광 모이어티 및/또는 산란 입자의 높은 로딩(loading)으로 혼합되더라도, 보다 더 바람직하게는 용매 없이, 더 낮은 점도를 유지할 수 있는 조성물; 대면적 균일 프린팅을 위해 더 낮은 증기압을 갖는 조성물; 잉크젯 프린팅 동안/후에 잉크젯 프린팅 노즐 주위에 잔류물 없음 또는 감소를 실현하는 새로운 조성물, 조성물 중 발광 모이어티의 개선된 QY 및/또는 EQE, 프린팅 후에 발광 모이어티의 개선된 QY 및/또는 EQE; 개선된 열 안정성; 프린팅 노즐에서의 막힘 없는 용이한 프린팅; 조성물의 용이한 취급, 개선된 프린팅 특성; 간단한 제조 프로세스; 청색광의 개선된 흡광도; 잉크젯 프린팅 후에 조성물로부터 추후 제조된 것의 개선된 견고성.

[0007] 본 발명자들은 상기 언급된 문제점들 중 하나 이상을 해결하는 것을 목적으로 하였다.

과제의 해결 수단

[0008] 이어서 신규한 조성물, 바람직하게는 광경화성 조성물이 발견되었으며, 이는 적어도;

[0009] i) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

[0010] ii) 적어도 1종의 반응성 모노머 또는 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물; 및

[0011] iii) 화합물(chemical compound)을 포함하며,

[0012] 상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하며, 여기서 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 대체될 수 있거나;

[0013] 또는

[0014] 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 치환되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 치

환되는, 상기 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하며; 바람직하게는 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고;

[0015] 상기 화합물의 분자량은 2000 이하, 바람직하게는 1000 이하, 보다 더 바람직하게는 500 이하이고 상기 화합물의 분자량은 100 이상, 바람직하게는 200 이상, 보다 더 바람직하게는 300 이상이다.

[0016] 다른 양태에서, 본 발명은 다음을 포함하는 조성물을 제조하기 위한 방법에 관한 것이다:

[0017] I) 발광 모이어티의 리간드의 극성값 및/또는 발광 모이어티의 리간드의 화학적 구조를 식별하는 단계;

[0018] II) 리간드의 극성값 및/또는 발광 모이어티의 화학적 구조에 기초하여 화합물을 선택하여 조성물 중의 모든 리간드의 극성값과 상기 화합물의 극성값의 합을 수정하는 단계;

[0019] III) 적어도 단계 (I)의 발광 모이어티와 반응성 모노머 또는 모노머 혼합물을 혼합하여 상기 조성물을 수득하는 단계;

[0020] IV) 1종의 단일 반응성 모노머가 상기 조성물에 사용되는 경우 반응성 모노머의 극성값을 식별하거나, 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물이 조성물에 사용되는 경우 상기 모노머 혼합물의 극성값을 식별하는 단계;

[0021] V) 선택적으로, 발광 모이어티의 리간드의 극성값에 기초하여 상기 화합물의 양을 결정하는 단계;

[0022] 여기서 상기 화합물은 단계 III) 이전, 단계 III)에서 또는 단계 III) 이후, 바람직하게는 단계 III)에서 또는 단계 III) 이후에 첨가된다.

[0023] 바람직하게는 상기 리간드는 발광 모이어티 상에 직접 부착되는 복수의 리간드이고, 단계 I)에서의 상기 식별은 상기 복수의 리간드에 적용되고, 바람직하게는, 상기 리간드가 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 상기 비극성 리간드의 상기 기의 CH_2 기는 C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN or NO_2에 의해 대체될 때 상기 화합물은 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 극성 리간드이고, 여기서 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고; 상기 리간드가 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기의 CH_2 기는 C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN or NO_2에 의해 대체될 때 상기 화합물은 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 비극성 리간

드이고, 여기서 비극성 기의 상기 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있다.

[0024] 다른 양태에서, 본 발명은 본 발명의 방법에 의해 수득되거나 또는 수득가능한 조성물에 관한 것이다.

[0025] 다른 양태에서, 본 발명은 다음을 포함하는, 층을 형성하기 위한 방법에 관한 것이다:

[0026] S1) 바람직하게는 잉크-제팅(ink-jetting)에 의해, 본 발명의 조성물을 기판 상에 제공하는 단계;

[0027] S2) 상기 조성물을 경화시키는 단계, 바람직하게 상기 경화는 광 조사(photo irradiation), 열 경화 또는 광 경화와 열 경화의 조합에 의해 수행된다.

[0028] 다른 양태에서, 본 발명은 본 발명의 조성물을 경화시킴으로써 수득되거나 또는 수득가능한 층 또는 본 발명의 방법에 의해 수득되거나 또는 수득가능한 층에 관한 것이다.

[0029] 다른 양태에서, 본 발명은 적어도 다음을 포함하는 층에 관한 것이며;

[0030] i) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

[0031] XI) (메트)아크릴레이트 폴리머; 및

[0032] XII) 화합물,

[0033] 상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 대체될 수 있는, 상기 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알콕실기 또는 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알콕실기; 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알콕실기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 분지쇄 아릴-알콕실기; 및 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 시클로-알콕실기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 포함하거나;

[0034] 또는

[0035] 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 대체될 수 있는, 상기 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 2 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알케닐기; 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 분지쇄 알케닐기; 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기; 6 내지 45개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 아릴-알케닐기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 분지쇄 아릴-알케닐기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 시클로-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 포함하며; 바람직하게는 상기 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고;

[0036] 상기 화합물의 분자량은 2000 이하, 바람직하게는 1000 이하, 보다 더 바람직하게는 500 이하이고 상기 화합물의 분자량은 100 이상, 바람직하게는 200 이상, 보다 더 바람직하게는 300 이상이다.

[0037] 다른 양태에서, 본 발명은 추가로, 발광 모이어티(110)를 포함하는 매트릭스(matrix) 재료(120), 및 적어도 폴리머 재료를 포함하는 뱅크(bank)(150)를 적어도 포함하는 본 발명의 층으로 부분적으로 또는 완전히 충전된 제 1 픽셀(161)을 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어지는 색변환 디바이스(100)에 관한 것이며, 바람직하게 색변환 디바이스(100)는 지지 매체(170)를 더 포함한다.

[0038] 다른 양태에서, 본 발명은 추가로, 본 발명의 층 또는 본 발명의 디바이스(100)를 제조하기 위한 본 발명의 조

성물의 용도에 관한 것이다.

[0039] 다른 양태에서 본 발명은 하기 단계들을, 바람직하게는 이러한 순서로, 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어지는 본 발명의 색변환 디바이스(100)를 제조하기 위한 방법에 관한 것이다;

[0040] Xi) 지지 매체의 표면 상에 뱅크 조성물을 제공하는 단계,

[0041] Xii) 뱅크 조성물을 경화하는 단계,

[0042] Xiii) 경화된 상기 조성물에 포토패터닝을 적용하여 뱅크 및 패터닝된 픽셀 영역을 제조하는 단계,

[0043] Xiv) 바람직하게는 잉크 젯팅(ink-jetting)에 의해, 적어도 하나의 픽셀 영역에 본 발명의 조성물을 제공하는 단계,

[0044] Xv) 조성물을 경화하는 단계로서, 바람직하게는 상기 색변환 디바이스(100)는 지지 매체(170)를 더 포함하는, 상기 조성물을 경화하는 단계.

[0045] 다른 양태에서, 본 발명은 추가로, 본 발명의 방법으로부터 수득가능하거나 수득되는 색변환 디바이스(100)에 관한 것이다.

[0046] 다른 양태에서, 본 발명은 또한, 광을 변조하도록 구성되거나 광을 방출하도록 구성되는 적어도 하나의 기능성 매체(320, 420, 520)를 포함하는 광학 디바이스(300)에서의 본 발명의 색변환 디바이스(100)의 용도에 관한 것이다.

[0047] 다른 양태에서, 본 발명은 추가로, 광을 변조하도록 구성되거나 광을 방출하도록 구성되는 적어도 하나의 기능성 매체(320, 420, 520), 및 본 발명의 색변환 디바이스(100)를 포함하는 광학 디바이스(300)에 관한 것이다.

[0048] 본 발명의 추가 이점들은 하기 상세한 설명으로부터 명백해질 것이다.

도면의 간단한 설명

[0049] 도 1: 색변환 필름 (100) 의 일 실시예의 개략도의 단면도를 도시한다.

도 2: 본 발명의 색변환 필름 (100) 의 다른 실시예의 개략도의 상면도를 도시한다.

도 3: 본 발명의 광학 디바이스(300)의 일 실시예의 개략도의 단면도를 도시한다.

도 4: 본 발명의 광학 디바이스(300)의 다른 실시예의 개략도의 단면도를 도시한다.

도 5: 본 발명의 광학 디바이스(300)의 다른 구현예의 개략도의 단면도를 도시한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0050] 도 1의 참조 부호 목록

[0051] 100. 색변환 디바이스

[0052] 110. 발광 모이어티

[0053] 110R. 발광 모이어티 (적색)

[0054] 110G. 발광 모이어티 (녹색)

[0055] 120. 매트릭스 재료

[0056] 130. 광 산란 입자 (선택적)

[0057] 140. 착색제 (선택적)

[0058] 140R. 착색제 (적색) (선택적)

[0059] 140G. 착색제 (녹색) (선택적)

[0060] 140B. 착색제 (청색) (선택적)

[0061] 150. 뱅크

[0062] 161. 제1 픽셀

[0063] 162. 제2 픽셀

[0064] 163. 제3 픽셀

[0065] 170. 지지 매체 (기판) (선택적)

[0066] 도 2의 참조 부호 목록

[0067] 200. 색변환 필름

[0068] 210R. 픽셀 (적색)

[0069] 210G. 픽셀 (녹색)

[0070] 210B. 픽셀 (청색)

[0071] 220. 뱅크

[0072] 도 3의 참조 부호 목록

[0073] 300. 광학 디바이스

[0074] 100. 색변환 디바이스

[0075] 110. 발광 모이어티

[0076] 110R. 발광 모이어티 (적색)

[0077] 110G. 발광 모이어티 (녹색)

[0078] 120. 매트릭스 재료

[0079] 130. 광 산란 입자 (선택적)

[0080] 140. 착색제 (선택적)

[0081] 140R. 착색제 (적색) (선택적)

[0082] 140G. 착색제 (녹색) (선택적)

[0083] 140B. 착색제 (청색) (선택적)

[0084] 150. 뱅크

[0085] 320. 광 변조기

[0086] 321. 편광기

[0087] 322. 전극

[0088] 323. 액정 층

[0089] 330. 광원

[0090] 331. LED 광원

[0091] 332. 도광 기판 (선택적)

[0092] 333. 광원(330)으로부터의 광 방출

[0093] 도 4의 참조 부호 목록

[0094] 400. 광학 디바이스

[0095] 100. 색변환 디바이스

[0096] 110. 발광 모이어티

[0097] 110R. 발광 모이어티 (적색)

[0098] 110G. 발광 모이어티 (녹색)

[0099] 120. 매트릭스 재료

[0100] 130. 광 산란 입자 (선택적)

[0101] 140. 착색제 (선택적)

[0102] 140R. 착색제 (적색) (선택적)

[0103] 140G. 착색제 (녹색) (선택적)

[0104] 140B. 착색제 (청색) (선택적)

[0105] 150. 뱅크

[0106] 420. 광 변조기

[0107] 421. 편광기

[0108] 422. 전극

[0109] 423. 액정 층

[0110] 430. 광원

[0111] 431. LED 광원

[0112] 432. 도광 기판 (선택적)

[0113] 440. 컬러 필터

[0114] 433. 광원(330)으로부터의 광 방출

[0115] 도 5의 참조 부호 목록

[0116] 500. 광학 디바이스

[0117] 100. 색변환 디바이스

[0118] 110. 발광 모이어티

[0119] 110R. 발광 모이어티 (적색)

[0120] 110G. 발광 모이어티 (녹색)

[0121] 120. 매트릭스 재료

[0122] 130. 광 산란 입자 (선택적)

[0123] 140. 착색제 (선택적)

[0124] 140R. 착색제 (적색) (선택적)

[0125] 140G. 착색제 (녹색) (선택적)

[0126] 140B. 착색제 (청색) (선택적)

[0127] 150. 뱅크

[0128] 520. 발광 디바이스 (예를 들어, OLED)

[0129] 521. TFT

[0130] 522. 전극 (애노드)

[0131] 523. 기판

[0132] 524. 전극 (캐소드)

[0133] 525. 발광 층 (예를 들어, OLED 층(들))

[0134] 526. 발광 디바이스(520)로부터의 광 방출

[0135] 530. 광학 층 (예를 들어, 편광기) (선택적)

[0136] 540. 컬러 필터

[0137] 용어의 정의

[0138] 본 명세서에서, 기호, 단위, 약어, 및 용어는 달리 특정되지 않는 한, 하기의 의미를 갖는다.

[0139] 본 명세서에서, 달리 구체적으로 언급되지 않는 한, 단수형은 복수형을 포함하고 "하나" 또는 "그것"은 "적어도 하나"를 의미한다. 본 명세서에서, 달리 구체적으로 언급되지 않는 한, 개념의 요소는 복수의 종으로 표현될 수 있고, 양(예를 들어, 질량 % 또는 몰 %)이 기술되는 경우 이는 복수의 종의 합을 의미한다. "및/또는"은 모든 요소의 조합을 포함하며, 또한 요소의 단일 용도도 포함한다.

[0140] 본 명세서에서, "내지" 또는 "-"를 사용하여 수치 범위가 표시되는 경우, 이는 양 종점(endpoint)을 포함하며 이의 단위는 공통적이다. 예를 들어, 5 내지 25 몰 %는 5 몰 % 이상 그리고 25 몰 % 이하를 의미한다.

[0141] 본 명세서에서, 탄화수소는 탄소와 수소를 포함하고 선택적으로는 산소 또는 질소를 포함하는 것을 의미한다. 하이드로카빌기는 1가 또는 2가 또는 보다 고가(higer valent)의 탄화수소를 의미한다. 본 명세서에서, 지방족 탄화수소는 선형, 분지형 또는 시클릭 지방족 탄화수소를 의미하고, 지방족 탄화수소기는 1가 또는 2가 또는 보다 고가의 지방족 탄화수소를 의미한다. 방향족 탄화수소란 선택적으로 지방족 탄화수소기를 치환기로서 포함할 수도 있을 뿐만 아니라 지환(alicycle)과 축합될 수도 있는 방향족 고리를 포함하는 탄화수소를 의미한다. 방향족 탄화수소기는 1가 또는 2가 또는 보다 고가의 방향족 탄화수소를 의미한다. 또한, 방향족 고리는 공액(conjugated) 불포화 고리 구조를 포함하는 탄화수소를 의미하고, 지환은 고리 구조를 갖지만 공액 불포화 고리 구조를 포함하지는 않는 탄화수소를 의미한다.

[0142] 본 명세서에서, 알킬은 선형 또는 분지형, 포화 탄화수소로부터 임의의 하나의 수소를 제거함으로써 수득되는 기를 의미하며, 선형 알킬 및 분지형 알킬을 포함하고, 시클로알킬은 시클릭 구조를 포함하는 포화 탄화수소로부터 하나의 수소를 제거함으로써 수득되는 기를 의미하며 시클릭 구조 내에 선형 또는 분지형 알킬을 측쇄로서 선택적으로 포함한다.

[0143] 본 명세서에서, 아릴은 방향족 탄화수소로부터 임의의 하나의 수소를 제거함으로써 수득되는 기를 의미한다. 알킬렌은 선형 또는 분지형, 포화 탄화수소로부터 임의의 2 개의 수소를 제거함으로써 수득되는 기를 의미한다. 아릴렌은 방향족 탄화수소로부터 임의의 2 개의 수소를 제거함으로써 수득되는 탄화수소 기를 의미한다.

[0144] 본 명세서에서, 폴리머가 복수 유형의 반복 단위를 갖는 경우, 이들 반복 단위는 코폴리머화(copolymerize)한다. 이들 코폴리머화는 교대 코폴리머화, 랜덤 코폴리머화, 블록 코폴리머화, 그래프트 코폴리머화, 또는 이들 중 임의의 것의 혼합이다.

[0145] 본 발명에 따르면, 용어 "(메트)아크릴레이트 폴리머"는 메타크릴레이트 폴리머, 아크릴레이트 폴리머 또는 메타크릴레이트 폴리머와 아크릴레이트 폴리머의 조합물을 의미한다.

[0146] 용어 "방출(emission)"은 원자 및 분자에서의 전자 전이에 의한 전자기파의 방출을 의미한다.

[0147] 본 명세서에서, 섭씨가 온도 단위로서 사용된다. 예를 들어, 20 도는 섭씨 20 도를 의미한다.

[0148] 발명의 상세한 설명

[0149] 본 발명에 따르면, 일 양태에서, 조성물은 적어도 다음을 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나, 그로 이루어지며;

[0150] i) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

[0151] ii) 적어도 1종의 반응성 모노머 또는 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물; 및

[0152] iii) 화합물을 포함하며,

[0153] 상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알

킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하며, 여기서 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 대체될 수 있거나;

[0154] 또는

[0155] 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 치환되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 치환되는, 상기 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하며; 바람직하게는 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고;

[0156] 상기 화합물의 분자량은 2000 이하, 바람직하게는 1000 이하, 보다 더 바람직하게는 500 이하이고 상기 화합물의 분자량은 100 이상, 바람직하게는 200 이상, 보다 더 바람직하게는 300 이상이다. 이는 본 발명의 화합물이 폴리머가 아니라는 것을 의미한다. 이는 모노머 또는 올리고머이다.

[0157] -화합물

[0158] 본 발명의 화합물은, 조성물의 극성값을 제어하기 위해, 즉 조성물에 배치함으로써 반응성 모노머의 혼합물의 극성값으로 발광 모이어티(예를 들어, QD들)의 극성값을 조정하기 위해 바람직한 것으로 간주된다. 그 후 이는, 조성물 중에 잘 분산된 발광 모이어티를 실현할 수 있다. 더 바람직하게는, 이는 조성물의 점도의 증가를 방지하고 그리고/또는 장기간 저장시 조성물 중의 발광 모이어티의 양호한 분산을 유지할 수 있다. 화합물의 바람직한 배치는 발광 모이어티의 QY 드롭(drop)을 회피하기 위해 조성물에 첨가하는 것이다.

[0159] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 상기 화합물은 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 3급 아민, 카르복실기, 헤테로 시클릭기, 실란기, 술폰산, 히드록실기, 포스폰산으로 이루어진 그룹의 멤버들 중 하나 이상으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 더 포함하며, 바람직하게 상기 기는 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 카르복실기 또는 이들의 임의의 것의 조합물이고, 더 바람직하게는 티올기이다.

[0160] 포스포네이트기, 티올기, 카르복실기 또는 이들 중 임의의 것의 조합물은, (양자(quantum) 재료의 무기(inorganic) 부분의 표면과 같은) 발광 모이어티의 무기 부분의 최외부 표면에 대한 더 나은 부착 능력을 갖기 때문에 더 바람직한 것으로 간주된다.

[0161] 또한, 위에서 언급된 기는 조성물 내 발광 모이어티(예를 들어, 양자점)의 분산성을 증가시키기 위해 바람직한 것으로 여겨진다.

[0162] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹의 하나 이상의 멤머로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 그리고

[0163] 상기 리간드는, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 상기 비극성 리간드의 상기 그룹의 하나 이상

의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 또는

[0164] 상기 화학 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 리간드로부터 선택된 그룹의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 상기 비극성 리간드의 상기 그룹의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 그리고

[0165] 상기 리간드는, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있는, 조성물.

[0166] 발광 모이어티 상에 직접적으로 부착된 리간드가 비극성 리간드일 때 화합물로서 극성 리간드를 선택하는 것, 및 발광 모이어티의 리간드가 극성 타입 리간드일 때 화합물로서 비극성 리간드를 선택하는 것은, 발광 모이어티와 조성물의 반응성 모노머/2종 이상의 반응성 모노머들의 모노머 혼합물 사이의 극성 차이를 감소시켜, 발광 모이어티의 우수한 분산성, 조성물 및 조성물로부터 수득된 층의 개선된 외부 양자 효율(EQE) 값 및/또는 개선된 잉크 분사 특성을 초래하는 것으로 여겨진다.

[0167] 본 발명에 따르면, 극성 리간드, 비극성 리간드의 상기 정의 범위 내에 있는 공지된/이용가능한 화합물을 사용할 수 있다.

[0168] 본 발명에 따르면, 바람직하게 조성물 내 상기 화합물의 총량(T)은 하기 화학식 (I^a) 및 (II^a)에 기초하여 결정된다.

[0169] $Tch = (Pl - Pm) * Al / (Pm - P)$ - (I^a)

[0170] Pl: 발광 모이어티의 리간드의 극성값

[0171] Pm: 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물이 조성물에 사용되는 모노머 혼합물의 극성값

[0172] Al: 리간드의 총량

[0173] P: 화합물의 극성값

[0174] Tch: 화합물의 미리 결정된 총량

[0175] $T=Tch*Z$ - (II^a)

[0176] $0.5 \leq Z \leq 1.5$, 바람직하게는 $0.7 \leq Z \leq 1.3$, 더 바람직하게는 $0.8 \leq Z \leq 1.2$;

[0177] T: 화합물의 총량

[0178] 이러한 결정을 이용함으로써, 본 발명의 기술적 효과, 특히 발광 모이어티의 우수한 분산성, 조성물 및 조성물로부터 수득된 층의 개선된 외부 양자 효율(EQE) 값 및/또는 개선된 잉크 제팅 특성이 더욱 최적화/개선될 수 있다.

[0179] 보다 바람직하게는, 상기 극성 리간드로서, 상기 화합물은 하기 화학식 (X^A)으로 표시된다.

[0180] $Z^A (-X^A)u-Y^A$ - (X^A)

[0181] 식 중

[0182] Z^A는 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 3급 아민, 카르복실기, 헤테로시클릭기, 실란기, 술폰산, 하이드록실기, 포스폰산으로 이루어진 그룹의 하나 이상의 멤버로 선택된 기이고, 바람직하게는 상기 기는 포스포네이트기, 티올기, 카르복실기 또는 이들 중 임의의 것의 조합이고, 더 바람직하게는 티올기이고, 더 바람직하게는 -SH이고;

[0183] X^A는 단일 결합, 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있는, 상기 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알콕시기이고, 여기서 (-X)u는 폴리 알콕실렌기가 아니고;

[0184] u는 0 또는 1이고, 바람직하게는 u는 0이고;

[0185] Y^A는 1 내지 80개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기, 또는 3 내지 80, 바람직하게는 8 내지 70, 더 바람직하게는 12 내지 60 개의 탄소 원자를 갖는 포화 또는 불포화 분지쇄 알킬기이며, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있으며, 바람직하게는 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소원자에 의해 대체되고, 더욱 더 바람직하게는 Y는 하기 화학식으로 표시된다,

[0186] $$*-[CH(R^{A1})-CH(R^{A2})-Q]_x-R^{A3},$$

[0187] 식 중, R^{A1}은 H 또는 1 내지 5개의 탄소 원자를 갖는 알킬기이며, 바람직하게는 상기 알킬기는 메틸기이고; R^{A2}는 H 또는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기이며, 바람직하게는 상기 알킬기는 메틸기이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이며, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고; R^{A3}는 H 또는 메틸기이고, x는 정수이며, 바람직하게 x는 1부터 300까지, 더 바람직하게는 2부터 200까지, 보다 더 바람직하게는 4부터 100까지의 범위이고, 여기서 “*”는 u가 1일때 상기 화학식의 기호 X^A에 대한 연결 지점을 나타내고 “*”는 u가 0일때 상기 화학식의 기호 Z^A에 대한 연결 지점을 나타냄;

[0188] 또는

[0189] $$*-[(CHR^{A1})_n-Q)]_x-R^{A3}$$

[0190] 식 중 n은 2 또는 3이고, Q는 산소 원자, 질소 원자 또는 황 원자이며, 바람직하게는 Q는 산소 원자이고, R^1은 H 또는 메틸기이고, R^3은 H 또는 메틸기이고, n은 1 내지 5, 바람직하게는 1 내지 3, 더 바람직하게는 2이고, x는 정수이며, 바람직하게 x는 1부터 300까지, 더 바람직하게는 2부터 200까지, 보다 더 바람직하게는 4부터 100까지의 범위이고, 여기서 “*”는 u가 1일때 상기 화학식의 기호 X^A에 대한 연결 지점을 나타내고 “*”는 u가 0일때 상기 화학식의 기호 Z^A에 대한 연결 지점을 나타냄.

[0191] 상기 중량 비의 화합물은 조성물의 점도/용해도를 이에 따라 제어하는데 매우 바람직한 것으로 간주된다. 그리고 이는, 조성물의 점도 증가를 방지하고/하거나 조성물 중 장기간 저장시 광 발광 모이어티의 양호한 용해도를 유지하기 위해 매우 바람직하다.

[0192] 상기 극성 타입 화합물로서, 머캅토 프로피온산, 머캅토운데칸산, 에루크산, 옥타데칸티올, 폴리에틸렌이민(PEI), 단관능 PEG 티올(mPEG-thiol), US1102651B2(화학식 I) 또는 US1102651B2의 화학식(II)로 표시되는 티올화된 물질, 예컨대 카르복실산 폴리에틸렌옥사이드/프로필렌옥사이드(M1000-SH: 실시예 1) 및 유도체를 사용할 수 있다.

[0193] 상기 비극성 화학화합물로는 트리옥틸포스핀옥사이드(TOPO), 트리옥틸포스핀(TOP), 트리부틸포스핀(TBP); 도데

실포스폰산(DDPA), 트리데실포스폰산(TDPA), 옥타데실포스폰산(ODPA), 헥실포스폰산(HPA); 올레일아민, 데실아민(DDA), 테트라데실아민(TDA), 헥사데실아민(HDA), 옥타데실아민(ODA), 올레일아민(OLA), 1-옥타데센(ODE), 도데칸티올(DDT), 헥사데칸티올 및 헥산티올; 올레산, 스테아르산, 미리스트산, 도데칸산 및 이와 유사한 유도체를 사용하는 것이 바람직하다.

[0194] 이러한 화학적 화합물의 예는 예를 들어 공개 국제 특허 출원 WO 2012/059931A, US1102651 B2에 기재되어 있다.

[0195] - 반응성 모노머

[0196] 잉크젯 프린팅에 적합한 저점도 조성물을 제조하기 위해서는 보다 낮은 점도가 중요하다고 여겨진다. 따라서, 상기 언급한 파라미터 범위 내의 점도 값을 갖는 (메트)아크릴레이트 모노머가 잉크젯 프린팅용 조성물을 제조하는 데 특히 적합하다. 이러한 (메트)아크릴레이트 모노머를 조성물에 사용함으로써, 높은 로딩으로 반도체 발광 나노입자와 같은 다른 재료와 혼합되는 경우, 조성물은 잉크젯 프린팅에 적합한 범위 내에서 보다 낮은 점도를 여전히 유지할 수 있다.

[0197] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 대면적 균일 잉크젯 프린팅을 위해, 상기 반응성 모노머의 비점(B.P.)은 250℃ 이상이며, 바람직하게는 250℃부터 350℃까지, 보다 더 바람직하게는 280℃부터 350℃까지, 더욱 더 바람직하게는 300℃부터 348℃까지 범위이다.

[0198] 상기 높은 비점은 또한 조성물이 대면적 균일 프린팅을 위해 바람직하게는 0.001mmHg 미만의 낮은 증기압을 갖게 하는 데 중요하며, 이는 반응성 모노머, 바람직하게는 (메트)아크릴레이트 모노머, 더 바람직하게는 25℃에서 25 cP 이하의 점도값 및 적어도 250℃ 이상, 바람직하게 250℃부터 350℃까지, 더 바람직하게는 300℃부터 348℃까지의 범위의 비점을 갖는 식 (I), (II) 및/또는 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머를 사용하여, 반도체 발광 나노 입자의 높은 로딩과 같이 다른 재료의 높은 로딩으로 혼합되어도 대면적 균일 잉크젯 프린팅에 적합한 조성물을 제조하기 위해 바람직한 것으로 간주된다.

[0199] 여기서, 용어 "(메트)아크릴레이트"는 아크릴레이트 및 메타크릴레이트에 대한 총칭이다. 따라서, 본 발명에 따르면, 용어 "(메트)아크릴레이트 모노머"는 메타크릴레이트 모노머 및/또는 아크릴레이트 모노머를 의미한다.

[0200] 본 발명에 따르면, 상기 B.P는 Science of Petroleum, Vol.II. p.1281 (1398)에 기술된 것과 같은 공지된 방법에 의해 추정될 수 있다.

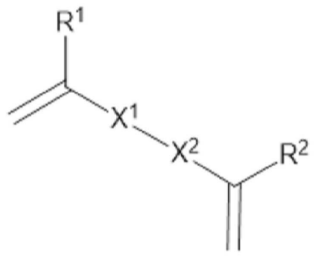
[0201] 본 발명에 따르면, 화학식 (I) 또는 (II)로 표시되는 임의의 유형의 공개적으로 이용가능한 아크릴레이트 및/또는 메타크릴레이트가 바람직하게 사용될 수 있다.

[0202] 특히 제1 양태에 대해, 화학식 (I), (II) 및/또는 (III)으로 표시된 25℃에서 25 cP 이하의 점도 값을 갖는 임의의 유형의 공개적으로 이용가능한 아크릴레이트 및/또는 메타크릴레이트가 사용될 수 있다.

[0203] 따라서, 본 발명에 따르면, 조성물의 반응성 모노머는 바람직하게는, 모노-(메트)아크릴레이트 모노머, 디-(메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 트리-(메트)아크릴레이트 모노머로부터 선택된 (메트)아크릴레이트 모노머이다.

[0204] 바람직하게는, 모노머 혼합물의 상기 반응성 모노머는 각각 독립적으로 모노-(메트)아크릴레이트 모노머, 디-(메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 트리-(메트)아크릴레이트 모노머로부터 선택된다.

[0205] 바람직하게는, 상기 디-(메트)아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (I^b)로 표시되고, 상기 모노-아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (II^b)로 표시되고, 그리고/또는 상기 트리-(메트)아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (III^b)로 표시된다.



[0206] (I^b)

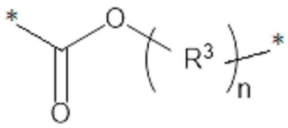
[0207] 식 중

[0208] X^1은 비치환 또는 치환된 알킬기 또는 아릴기이고, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자,C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X는 에스테르기이고, 바림직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고;

[0209] X^2는 비치환 또는 치환된 알킬기 또는 아릴기이고, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자,C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X는 에스테르기이고, 바림직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고;

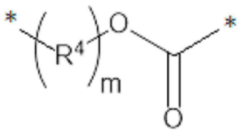
[0210] R^1은 수소 원자, Cl, Br, 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기이며, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1은 에스테르기이고; 상기 에스테르기는 카르복실산기이며, 바람직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소원자를 갖고;

[0211] R^2는 수소 원자, Cl, Br, 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기이며, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1은 에스테르기이고; 상기 에스테르기는 카르복실산기이며, 바람직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소원자를 갖고;

[0212] 바람직하게 기호 X^1은  이며,

[0213] 여기서 식의 좌측의 "*"는 식 (I)의 말단기 $C=CR^1$의 탄소 원자와의 연결 지점을 나타내고, 우측의 "*"는 식 (I)의 기호 X^2와의 연결 지점을 나타내고;

[0214] n은 0 또는 1이고;

[0215] 바람직하게 기호 X^2는  이며,

[0216] 여기서 식의 좌측의 "*"는 식 (I)의 기호 X1과의 연결 지점을 나타내고, 우측의 "*"는 식 (I)의 말단기 $C=CR^2$와의 연결 지점을 나타내고;

[0217] m은 0 또는 1이며;

[0218] 바람직하게는 적어도 m 또는 n은 1이고;

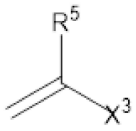
[0219] R^3은 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬, 3 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 시클로알칸 또는 3 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기이며, 바람직하게는 R^3은 1 내지 15 개의 탄소 원자, 보다 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며,

[0220] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0221] R^4는 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬, 3 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 시클로알칸 또는 3 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기이며, 바람직하게는 R^4는 1 내지 15 개의 탄소 원자, 보다 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며,

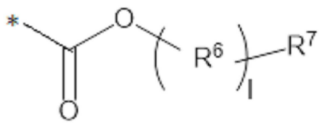
[0222] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0223] R^a는 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 시클릭 알킬 또는 알콕시기, 5 내지 60 개의 탄소 고리 원자를 갖는 방향족 고리계, 또는 5 내지 60 개의 탄소 원자를 갖는 헤테로 방향족 고리계이며, 여기서 H 원자는 D, F, Cl, Br, I에 의해 대체될 수도 있고; 여기에서 2 개 이상의 인접한 치환기 R^a는 또한, 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수도 있고;

[0224] 

(II^b)

[0225] X^3은 비치환된 또는 치환된 알킬기, 아릴기 또는 알콕시기이고;

[0226] 바람직하게 기호 X^3은 

이며,

[0227] 여기서 식의 좌측의 "*"는 식 (I)의 말단기 $C=CR^5$와의 연결 지점을 나타내고;

[0228] l는 0 또는 1이고;

[0229] R^5는 수소 원자, Cl, Br 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 에스테르기 또는 카르복실산기이고;

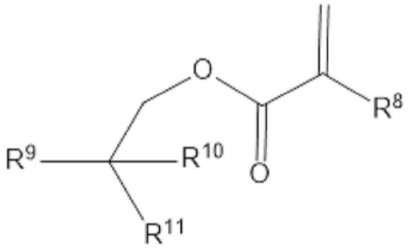
[0230] R^6은 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며, 바람직하게는 R^6은 1 내지 15 개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며,

[0231] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0232] R^7은 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며, 바람직하게는 R^7은 1 내지 15 개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며,

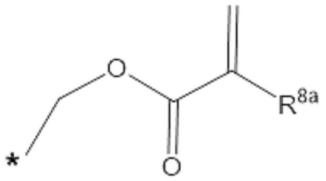
[0233] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0234] R^a는 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 시클릭 알킬 또는 알콕시기, 5 내지 60 개의 탄소 고리 원자를 갖는 방향족 고리계, 또는 5 내지 60 개의 탄소 원자를 갖는 헤테로 방향족 고리계이며, 여기서 H 원자는 D, F, Cl, Br, I에 의해 대체될 수도 있고; 여기에서 2 개 이상의 인접한 치환기 R^a는 또한, 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수도 있는, 조성물.



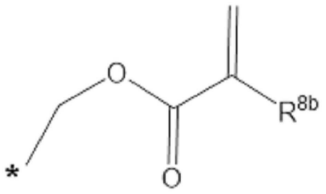
[0235] (III^b);

[0236] 식 중 R^9는 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (IV^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이며



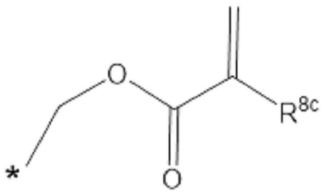
[0237] (IV^b);

[0238] R^{10}은 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (V^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이고



[0239] (V^b);

[0240] R^{11}은 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (VI^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이고



[0241] (VI^b);

[0242] R^8, R^{8a}, R^{8b} 및 R^{8c}는, 각각의 경우에 각각 독립적으로 또는 서로 의존적으로, H 또는 CH_3이며;

[0243] 식 중 R^9, R^{10} 및 R^{11} 중 적어도 하나는 (메트)아크릴기이며, 바람직하게 R^9, R^{10} 및 R^{11} 중 2 개는 (메트)아크릴기이고 나머지 하나는 수소 원자 또는 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기이고, 바람직하게 식

(III)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 전기 전도도(S/cm)는 $1.0*10^{-10}$ 이하, 바람직하게는 $5.0*10^{-11}$ 이하, 더 바람직하게는 $5.0*10^{-11}$부터 $1.0*10^{-15}$까지의 범위, 보다 더 바람직하게는 $5.0*10^{-12}$부터 $1.0*10^{-15}$까지의 범위이다.

[0244] 보다 바람직하게는, 상기 반응성 모노머는 화학식 (II)로 표시된다.

[0245] 바람직한 실시예에서, 조성물의 모노머 혼합물은 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머, 및 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 화학식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머로부터 선택된 다른 (메트)아크릴레이트 모노머를 포함한다.

[0246] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머가 조성물에 있고, 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머 대 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 혼합 비는 1:99부터 99:1까지(식 (I) : 식 (II)), 바람직하게는 5:95부터 50:50까지, 더 바람직하게는 10:90부터 40:60까지, 보다 더 바람직하게는 15:85부터 35:65까지 범위이고, 바람직하게는 적어도 화학식 (I), (II)로 표시되는 정제된(purified) (메트)아크릴레이트 모노머가 조성물에 사용되며, 더 바람직하게는 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머 및 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머 둘 모두는 정제 방법에 의해 수득되거나 수득가능하다.

[0247] 바람직한 실시예에서, 화학식 (I) 및/또는 화학식 (II)의 상기 (메트)아크릴레이트 모노머의 비점(B.P.)은 250℃ 이상이며, 바람직하게 화학식 (I) 및 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머는 둘 모두 250℃ 이상이고, 더 바람직하게는 250℃부터 350℃까지, 보다 더 바람직하게는 280℃부터 350℃까지, 더욱 더 바람직하게는 300℃부터 348℃까지의 범위이다.

[0248] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 조성물의 점도는 실온에서 35 cP 이하, 바람직하게는 1부터 35 cP까지, 더 바람직하게는 2부터 30 cP까지, 보다 더 바람직하게는 2부터 25 cP까지의 범위이다.

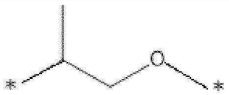
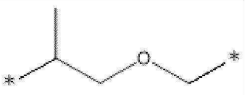
[0249] 본 발명에 따르면, 상기 점도는 실온에서 진동 유형 점도계 VM-10A(SEKONIC)에 의해 측정될 수 있다.

[0250] https://www.sekonic.co.jp/english/product/viscometer/vm/vm_series.html

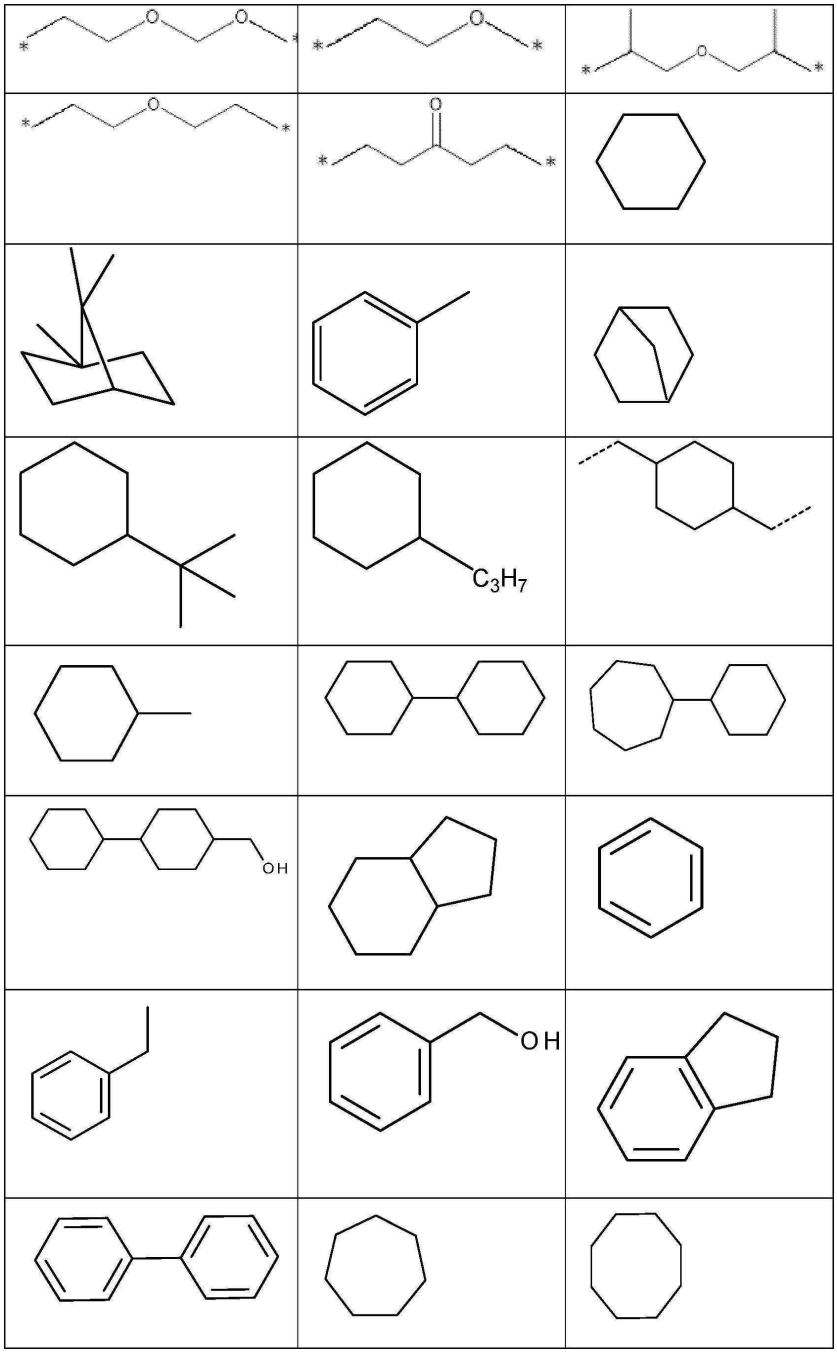
[0251] - 매트릭스 재료로서의, 화학식 (I)로 표시되는 (메트)아크릴레이트 모노머

[0252] 더욱 더 바람직하게, 상기 식 (I)의 R^3 및 식 (I)의 R^4는, 각각 서로 독립적으로, 하기 기들로부터 선택된다.

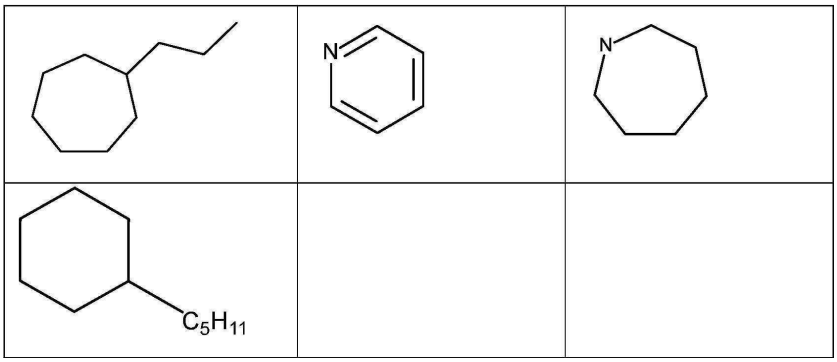
[0253]

-$(CH_2)_1$-	*-$(CH_2)_2$-*	*-$(CH_2)_3$-*
-$(CH_2)_4$-	*-$(CH_2)_5$-*	*-$(CH_2)_6$-*
-$(CH_2)_7$-		

[0254]

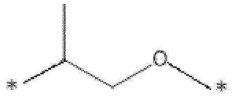
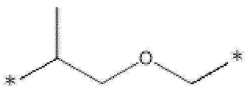
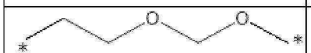
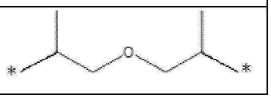


[0255]



[0256] 특히 바람직하게, 식 (I)의 상기 R^3 및 R^4는, 각각의 경우에, 독립적으로 또는 상이하게, 하기 기들로부터 선택된다.

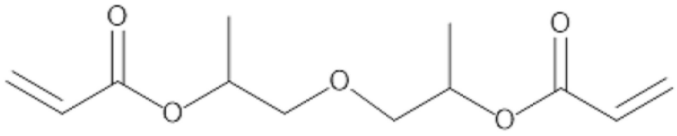
[0257]

-$(CH_2)_1$-	*-$(CH_2)_2$-*	*-$(CH_2)_3$-*
-$(CH_2)_4$-	*-$(CH_2)_5$-*	*-$(CH_2)_6$-*
-$(CH_2)_7$-		
		

*

[0258] 여기서 "*"는 R^3의 경우에 식의 X^2 에 대한 연결 지점 또는 식의 산소 원자에 대한 연결 지점을 나타내고, "*"는 R^4의 경우에 식의 X^1에 대한 연결 지점 또는 식의 산소 원자에 대한 연결 지점을 나타낸다.

[0259] 더욱 더 바람직하게는, 상기 식 (I)은 NDDA(노난디올 디아크릴레이트; BP:342℃), HDDMA(헥산디올 디메타크릴레이트; BP:307), HDDA(헥산디올 디아크릴레이트; BP:295℃) 또는 DPGDA(BP: 314℃)이다.

[0260]  (DPGDA)

[0261] - 화학식 (II)로 표시되는 (메트)아크릴레이트 모노머

[0262] 하기 화학식 (II)로 표시되는 (메트)아크릴레이트 모노머는 식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 점도보다 훨씬 더 낮은 점도 값을 보이는 것으로 간주된다. 따라서, 화학식 (II)로 표시되는 (메트)아크릴레이트 모노머를 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머와 조합하여 사용함으로써, 매끄러운 잉크젯 프린팅에 바람직한 훨씬 더 낮은 점도를 갖는 조성물이 실현될 수 있으며, 바람직하게는 외부 양자 효율(EQE) 값을 감소시키지 않는다.

[0263] 상기 조합물은, 높은 로딩의 반도체 발광 나노 입자와 같은, 다량의 다른 재료를 포함하는 저점도 조성물을 실현할 수 있는 것으로 간주된다. 따라서, 이는 조성물이 다른 재료를 포함하는 경우 잉크젯 프린팅에 특히 적합하다.

[0264] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 화학식 (II)의 상기 (메트)아크릴레이트 모노머의 비점(B.P.)은 250℃ 이상이며, 대면적 균일 잉크젯 프린팅을 위해 바람직하게 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머는 250℃ 이상, 더 바람직하게는 250℃부터 350℃까지, 보다 더 바람직하게는 280℃부터 350℃까지, 더욱 더 바람직하게는 300℃부터 348℃까지의 범위이다.

[0265] 본 발명의 추가의 바람직한 실시예에서, 화학식 (I)의 상기 (메트)아크릴레이트 모노머의 비점(B.P.) 및/또는 화학식 (II)의 상기 (메트)아크릴레이트 모노머의 비점(B.P.)은 250℃ 이상이며, 대면적 균일 잉크젯 프린팅을 위해 바람직하게 화학식 (I) 및 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머는 둘 모두 250℃ 이상, 더 바람직하게는 250℃부터 350℃까지, 보다 더 바람직하게는 280℃부터 350℃까지, 더욱 더 바람직하게는 300℃부터 348℃까지의 범위이다.

[0266] 더욱 바람직하게, 식 (II)의 상기 R^7은 각각의 경우, 독립적으로 또는 상이하게, 하기 기들로부터 선택되며, 여기서 기들은 R^a로 치환될 수 있고, 바람직하게는 이들은 R^a에 의해 치환되지 않는다.

[0267]

*-$(CH_2)_6$-CH_3	*- $(CH_2)_7$-CH_3	*-$(CH_2)_8$-CH_3
*-$(CH_2)_9$-CH_3	*-$(CH_2)_{10}$-CH_3	*-$(CH_2)_{11}$-CH_3
*-$(CH_2)_{12}$-CH_3	*-$(CH_2)_4$-OH	*-$(CH_2)_2$-OH
*-$(CH_2)_6$-OH	*-$(CH_2)_3$-OH	*-$(CH_2)_5$-OH

[0268] 여기서 "*"는, l가 1인 경우 X^3의 R^6에 대한 연결 지점을 나타내고, n이 0인 경우 식 (II)의 X^3의 산소 원자에 대한 연결 지점을 나타내고 있다.

[0269] 더욱 더 바람직하게는, 상기 식 (II)는 라우릴 메타크릴레이트(LM, 점도 6 cP, BP: 142℃) 또는 라우릴 아크릴레이트(LA, 점도: 4.0cP, BP: 313.2℃)이다.

[0270] 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 총량에 대해 더 많은 양의 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머는 조성물의 개선된 EQE를 초래하고, 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 총량에 대한 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 혼합 중량 비가 50 중량% 미만인 것이 조성물의 점도, 조성물의 더 나은 잉크 젯팅 특성의 관점에서 바람직한 것으로 여겨진다.

[0271] 바람직하게는, 실리카 컬럼을 사용하여 정제된 (메트)아크릴레이트 모노머가 사용된다.

[0272] 실리카 컬럼 정제에 의한 (메트)아크릴레이트 모노머로부터의 불순물 제거는 조성물 중 반도체 발광 나노입자의 개선된 QY를 야기하는 것으로 여겨진다.

[0273] - 화학식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머

[0274] 화학식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머는 잉크젯 프린팅 후 조성물로부터 추후 제조된 것의 그 견고성을 개선하는데 유용한 것으로 간주된다.

[0275] 본 발명에 따르면, 하기 화학식 (III)으로 표시되는 공지된 (메트)아크릴레이트 모노머를 사용하여 잉크젯 프린팅 및 가교(cross linking) 후 층의 견고성을 개선시킬 수 있다.

[0276] 매우 바람직하게는, 트리메틸올프로판 트리아크릴레이트(TMPTA)가 화학식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머로서 사용된다.

[0277] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 조성물 중 (메트)아크릴레이트 모노머의 총량에 대한 화학식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 양은 0.001 중량%부터 25 중량%까지의 범위, 더 바람직하게는 0.1 중량%부터 15 중량%까지, 보다 더 바람직하게는 1 중량%부터 10 중량%까지, 더욱 더 바람직하게는 3부터 7 중량%까지의 범위이다.

[0278] 바람직하게는, 실리카 컬럼을 사용함으로써 정제된 (메트)아크릴레이트 모노머가 사용된다.

[0279] 실리카 컬럼 정제에 의한 (메트)아크릴레이트 모노머로부터의 불순물 제거는 조성물 중 반도체 발광 나노입자의 개선된 QY를 야기하는 것으로 간주된다.

[0280] 본 발명에 따르면, 바람직하게 조성물은 23% 이상, 바람직하게는 24% 이상 및 95% 미만, 바람직하게는 50% 미만의 EQE 값을 보이도록 구성된다.

[0281] 본 발명에 따르면, 상기 EQE는 실온에서 하기 EQE 측정 프로세스에 의해 측정되며 이는 광섬유를 통해 커플링된 450nm(excitation) 여기 광원이 장착된 적분구(integrating sphere) 및 분광계(Compass X, BWTEK)를 사용하는 것에 기초하고, 여기 광의 입사 광자(photons)를 검출하기 위해 레퍼런스로서 공기를 사용한 제1 측정 및 샘플을 통해 투과된 여기 광원으로부터 입사하는 광자 및 샘플 또는 테스트 셀로부터 방출되는 광(photos)을 검출하기 위해 적분구의 개구와 광 섬유의 출구 사이에 적분구의 전방에 배치된 샘플 또는 테스트 셀을 이용한 제 2 측정으로 이루어지는 반면, 두 경우 모두에 대해 적분구를 빠져나가는 광자는 분광계에 의해 카운팅되고 EQE 및 BL 계산이 하기 등식으로 수행되고 여기 광 및 방출 광의 광자의 수는 하기 파장 범위에 걸친 적분에 의해 계산된다;

[0282] EQE = 광자 [방출 광] / 광자 [제자리에 샘플을 두지 않고 측정된 여기 광];

[0283] BL = 광자[샘플을 제자리에 두고 측정된 여기광] / 광자[제자리에 샘플을 두지 않고 측정된 여기광];

[0284] 녹색 발광 모이어티가 사용되는 경우의 방출 광: 490nm-600nm,

[0285] 적색 발광 모이어티가 사용되는 경우 방출 광: 560nm-780nm

[0286] 여기 광: 390nm-490nm.

[0287] 본 발명에 따르면, 바람직한 실시예에서, 조성물의 점도는 실온에서 35 cP 이하, 바람직하게는 1부터 35 cP까지, 더 바람직하게는 2부터 30 cP까지, 보다 더 바람직하게 2부터 25 cP까지 범위이다.

[0288] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 조성물은 조성물의 총량을 기준으로 용매 10중량% 이하를 포함하고, 더 바람직하게는 5중량% 이하이고, 더 바람직하게는 무용매 조성물이며, 바람직하게 조성물은 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 이를테면 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에

테르, 및 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알킬 에테르, 이를테면 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 및 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 이를테면 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르(PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 이를테면 메틸 셀로솔브 아세테이트 및 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 이를테면 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트(PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 이를테면 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤, 및 시클로헥사논; 알코올, 이를테면 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜 및 글리세린; 에스테르, 이를테면 에틸 3-에톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 및 에틸 락테이트; 및 시클릭 에스테르, 이를테면 감마-부티로-락톤; 염소화 탄화수소, 이를테면 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠, 트리메틸 벤젠 이를테면 1,3,5-트리메틸벤젠, 1,2,4-트리메틸 벤젠, 1,2,3-트리메틸 벤젠, 도세실벤젠, 시클로헥실벤젠, 1,2,3,4-테트라메틸벤젠, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 3-이소프로필비페닐, 3-메틸비페닐, 4-메틸비페닐 및 디클로로벤젠으로 이루어진 그룹의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 용매 중 어느 하나도 포함하지 않으며, 바람직하게 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜, 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르이다.

[0289] 조성물 중 10중량% 미만의 용매는 개선된 잉크 젯팅을 초래하고 그것은 용매의 증발 후 동일한 픽셀 상으로의 제2의 또는 그 이상의잉크 젯팅을 회피할 수 있는 것으로 생각된다.

[0290] 본 발명에 따르면, 노즐에서 어떠한 막힘도 일으키지 않고서 개선된 균일성을 갖는 그리고/또는 반도체 발광 나노입자의 양호한 분산도를 갖는 그리고/또는 산란 입자의 양호한 분산도를 갖는 대면적 잉크젯 프린팅을 실현하기 위해 어떠한 용매도 첨가하지 않는 것이 바람직하다.

[0291] 본 발명에 따르면, 바람직하게는 조성물은 다음으로 이루어지는 그룹의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 다른 재료를 더 포함한다;

[0292] iii) 본 발명의 발광 모이어티와는 상이한 다른 발광 모이어티로서, 바람직하게 상기 발광 모이어티는 리간드를 포함하고, 더 바람직하게 상기 발광 모이어티는 2 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 타입 리간드를 포함하는, 상기 다른 발광 모이어티;

[0293] iv) 다른 (메트)아크릴레이트 모노머;

[0294] v) 산란 입자, 및

[0295] vi) 광학적으로 투명한 폴리머, 산화방지제, 라디칼 소광제(quenchers), 광 개시제 및/또는 계면활성제, 바람직하게는 상기 다른 물질은 산란 입자이다.

[0296] 본 발명의 일부 실시예에서, 바람직하게는 본 발명의 조성물은 다음을 포함하며

[0297] v) 산란 입자; 및

[0298] vii) 적어도 하나의 폴리머가 산란 입자로 하여금 조성물에 분산될 수 있게 하도록 구성된 상기 폴리머;

[0299] 여기서 폴리머는 적어도 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스페이트기, 포스포네이트 기, 티올 기, 3급 아민, 카르복실기, 헤테로 시클릭기, 실란기, 술폰 산, 히드록실기, 포스폰산 또는 이들의 조합물을 포함하고, 바람직하게는 폴리머는 3급 아민, 포스핀 옥사이드기, 포스폰산, 또는 포스페이트기를 포함한다.

[0300] 본 발명에 따르면, 산란 입자를 조성물에 분산시킬 수 있게 하도록 구성된 상기 폴리머는, 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 3급 아민, 카르복실기, 헤테로 시클릭기, 실란기, 술폰산, 히드록실기, 포스폰산 또는 이들의 조합물을 포함하는 적어도 반복 단위 A를 포함하며, 바람직하게는 반복 단위 A는 3급 아민, 포스핀 옥사이드기, 포스폰산 또는 포스페이트기를 포함한다.

[0301] 본 발명의 일부 실시예에서, 반복 단위 A 및 반복 단위 B는 구성 반복 단위(constitutional repeating unit)이다.

[0302] 보다 더 바람직하게는, 반복 단위 A는 하기 화학식 (VII)로 표시되는 3급 아민을 포함하며,

[0303] $NR^{12}R^{13}R^{14}-$ - (VII)

[0304] 여기서 R^{12}는 수소 원자, 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 또는 분지형 알킬기, 또는 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기이고; R^{13}은 수소 원자, 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 또는 분지형 알킬기, 또는 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기이며; R^{12} 및 R^{13}은 동일하거나 서로 상이할 수 있고; R^{14}는 단일 결합, 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 또는 분지형 알킬렌기, 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 알케닐렌기, 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 (폴리)옥사알킬렌기이다.

[0305] 보다 더 바람직하게는, R^{12}는 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 또는 분지형 알킬기이고; R^{13}은 1 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 또는 분지형 알킬기이며; R^{12} 및 R^{13}은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0306] 더욱 더 바람직하게는, R^{12}는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 또는 n-부틸기이고; R^{13}은 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 또는 n-부틸기이다.

[0307] 본 발명에 따르면, 바람직한 실시예에서, 반복 단위 A는 염을 포함하지 않는다.

[0308] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 폴리머는 그라프트 코폴리머, 블록 코폴리머, 교대 코폴리머, 및 랜덤 코폴리머로 이루어진 그룹으로부터 선택된 코폴리머이고, 바람직하게 상기 코폴리머는 반복 단위 A 및 반복 단위 B를 포함하며, 상기 반복 단위 B는 임의의 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 3급 아민, 카르복실기, 헤테로 시클릭기, 실란기, 술폰기, 히드록실기, 포스폰산, 및 이들의 조합물을 포함하지 않고, 보다 바람직하게는 코폴리머는 하기 화학식 (VIII) 또는 (IX)로 표현되는 블록 코폴리머이며,

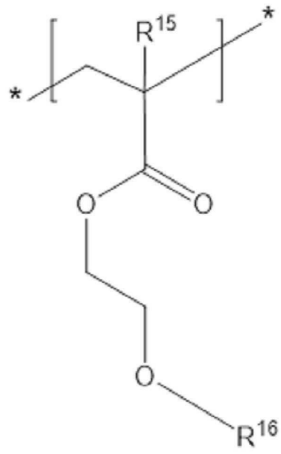
[0309] $A_n - B_m$ - (VIII)

[0310] $B_o - A_n - B_m$ - (IX)

[0311] 여기서 기호 "A"는 반복 단위 A를 나타내고; 기호 "B"는 반복 단위 B를 의미하도록 취해진 것이고; 기호 "n", "m", 및 "o"는 각각의 경우, 독립적으로 또는 서로 의존적으로, 1 내지 100, 바람직하게는 5 내지 75, 더 바람직하게는 7 내지 50의 정수이고; 보다 더 바람직하게 반복 단위 B는 (폴리)에틸렌, (폴리)페닐렌, 폴리디비닐벤젠, (폴리)에테르, (폴리)에스테르, (폴리)아미드, (폴리)우레탄, (폴리)카보네이트, 폴리락트산, (폴리)비닐에스테르, (폴리)비닐 에테르, 폴리비닐 알코올, 폴리비닐피롤리돈, 셀룰로오스 및 이들 중 임의의 것의 유도체로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 폴리머 사슬을 포함한다.

[0312] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 반복 단위 B의 폴리머 사슬은 폴리에틸렌 글리콜이다.

[0313] 더 바람직하게는, 반복 단위 B는 하기 화학식 (X)로 표시되는 화학 구조를 포함하며,



[0314] 화학식 (X)

[0315] 화학식 (X) 중, R^{15}은 수소 원자, 또는 메틸기이고; R^{16}은 1 내지 10 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기이고; n은 1 내지 5의 정수이며, "*"는 다른 폴리머 반복 단위 또는 폴리머의 말단에 대한 연결 지점을 나타낸다.

[0316] 보다 더 바람직하게, R^{15}는 수소 원자, 또는 메틸기일 수 있고, R^{16}은 에틸기일 수 있고, n은 1 내지 5의 정수이다.

[0317] 본 발명의 일부 실시예에서, 반도체 발광 나노입자의 코어의 표면, 또는 하나 이상의 쉘(shell) 층의 최외부 표면은 폴리머에 의해 부분적으로 또는 전체적으로 코팅될 수 있다.

[0318] *예를 들어 Thomas Nann, Chem. Commun., 2005, 1735 - 1736, DOI: 10.1039/b-414807j에 기술된 리간드 교환 방법을 사용함으로써, 반도체 발광 나노입자의 코어의 표면 또는 코어의 최외부 표면 상에 폴리머가 도입될 수 있다.

[0319] 본 발명에 따르면, 일부 실시예에서, 상기 폴리머의 함량은 반도체 발광 나노입자의 총 중량에 대하여 1 중량%부터 500 중량%까지의 범위, 더 바람직하게는 20 중량%부터 350 중량%까지, 보다 더 바람직하게는 50 중량%부터 200 중량%까지의 범위이다.

[0320] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 폴리머의 중량 평균 분자량(Mw)은 200 g/mol부터 30,000 g/mol까지, 바람직하게는 250 g/mol부터 5,000 g/mol까지, 더 바람직하게는 300 g/mol부터 2,000 g/mol까지의 범위이다.

[0321] 분자량(M_w)은 내부 폴리스티렌 표준에 대한 GPC (= 겔 투과 크로마토그래피)에 의해 결정된다.

[0322] 폴리머로서, 비극성 및/또는 저극성 유기 용매에 용해될 수 있는 상업적으로 이용가능한 습윤 및 분산 첨가제가 바람직하게 사용될 수 있다. 이를테면 BYK-111, BYK-LPN6919, BYK-103, BYK-P104, BYK-163 ([상표], BYK com.사제), MD1000, MD1100와 같은 TERPLUS MD1000 시리즈 ([상표], Otsuka Chemical사제), 폴리(에틸렌 글리콜) 메틸 에테르 아민 (Sigma-Ald 767565 [상표], Sigma Aldrich사제), 폴리에스테르 비스-MPA 덴드론, 32 히드록실, 1 티올, (Sigma-Ald 767115 [상표], Sigma Aldrich사제), LIPONOL DA-T/25 (Lion Specialty Chemicals Co.사제), 카르복시메틸 셀룰로오스 (Polyscience 등 사제), 예를 들어 "Marc Thiry 등의, ACSNANO, American Chemical society, Vol. 5, No. 6, pp 4965 - 4973, 2011", "Kimihiro Susumu, 등의, J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, pp 9480-9496"에 개시된 다른 습윤 및 분산 첨가제.

[0323] 따라서, 본 발명의 일부 실시예에서, 조성물은 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머, 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머, 및 폴리머가 산란 입자로 하여금 조성물 중에 분산할 수 있게 하도록 구성된 상기 폴리머를 적어도 포함하며, 여기서 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머: 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머: 폴리머의 혼합 비는 10:89:1 내지 50:40:10, 바람직하게는 15:82:3부터 30:60:10까지의 범위이다.

[0324] 본 발명의 일부 실시예에서, 조성물은 화학식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머, 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머, 및 폴리머가 산란 입자로 하여금 조성물 중에 분산할 수 있게 하도록 구성된 상기 폴리머를 적어도 포함하며, 여기서 화학식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머: 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머: 폴리머의 혼합 비는 10:89:1 내지 50:40:10, 바람직하게는 15:82:3부터 30:60:10까지의 범위이다.

[0325] 본 발명의 일부 실시예에서, 조성물은 본 발명의 조성물의 (메트)아크릴레이트 모노머로부터 유도된 또는 유도가능한 폴리머를 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어진다.

[0326] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 상기 폴리머는 조성물 중 모든 (메트)아크릴레이트 모노머, 예를 들어 적어도 화학식 (I)의 (메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머로부터 유도되거나 유도가능하다.

[0327] v) 산란 입자

[0328] 본 발명에 따르면, 산란 입자로서, SiO_2, SnO_2, CuO, CoO, Al_2O_3 TiO_2, Fe_2O_3, Y_2O_3, ZnO, ZnS, MgO와 같은 무기 산화물의 공지된 소립자(small particles); 폴리머화된(polymerized) 폴리스티렌, 폴리머화된 PMMA와 같은 유기 입자; 중공(hollow) 실리카와 같은 무기 중공 산화물 또는 이들 중 임의의 것의 조합물이; 사용될 수 있다. 산란 입자의 양은, 층의 고형분의 총량을 기준으로 바람직하게는 8wt% 이하, 바람직하게는 4부터 0wt%까지의 범위, 더 바람직하게는 1부터 0wt%까지의 범위이고, 더 바람직하게 층 및/또는 조성물은 임의의 산란 입자를 포함하지 않는다.

[0329] 본 발명의 일부 실시예에서, 조성물은 다음을 포함한다

[0330] iii) 제1 반도체 나노입자를 포함하는 적어도 하나의 반도체 발광 나노입자로서, 선택적으로 하나 이상의 쉘 층은 제1 반도체 나노입자의 적어도 일부를 커버하고, 바람직하게 조성물은 23% 이상, 바람직하게는 24% 이상 및 95% 미만, 바람직하게는 50% 미만의 EQE 값을 갖는, 상기 반도체 발광 나노입자.

[0331] 본 발명에 따르면, 투명 폴리머로서, 예를 들어 WO 2016/134820A에 기술된, 광학 디바이스에 적합한 광범위하게

다양한 공지된 투명 폴리머가 바람직하게 사용될 수 있다.

[0332] 본 발명에 따르면, 용어 "투명"은 광학 매체에서 사용되는 두께에서 그리고 광학 매체의 작동 동안 사용되는 파장 또는 파장 범위에서 적어도 약 60%의 입사광이 투과되는 것을 의미한다. 바람직하게, 이는 70%를 넘고, 보다 바람직하게는 75%를 넘고, 가장 바람직하게는 이는 80%를 넘는다.

[0333] 본 발명에 따르면, 용어 "폴리머"는 반복 단위를 갖고 1000 g/mol 또는 그 이상의 중량 평균 분자량(Mw)을 갖는 재료를 의미한다.

[0334] 분자량(M_w)은 내부 폴리스티렌 표준에 대한 GPC (= 겔 투과 크로마토그래피)에 의해 결정된다.

[0335] 본 발명의 일부 실시예에서, 투명 폴리머의 유리 전이 온도(Tg)는 70 ℃ 이상이고 250 ℃ 이하이다.

[0336] Tg는, Rickey J Seyler, Assignment of the Glass Transition, ASTM PCN(publication code number) 04-012490-50에 기술된 것 같은 시차 주사 열량계에서 관측된 열용량의 변화에 기초하여 측정된다.

[0337] 예를 들어, 투명 매트릭스 재료용 투명 폴리머로서, 폴리(메트)아크릴레이트, 에폭시, 폴리우레탄, 폴리실록산이 바람직하게 사용될 수 있다.

[0338] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 투명 매트릭스 재료로서의 폴리머의 중량 평균 분자량(Mw)은 1,000부터 300,000 g/mol까지 범위이고, 더 바람직하게 이는 10,000부터 250,000 g/mol까지 범위이다.

[0339] 본 발명에 따르면, 공지된 산화방지제, 라디칼 소광제, 광개시제 및/또는 계면활성제가 WO 2016/134820A에 기술된 것 같이 바람직하게 사용될 수 있다.

[0340] - 발광 모이어티 (110)

[0341] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 상기 발광 모이어티(110)는 유기 및/또는 무기 발광 재료이고, 바람직하게는 이는 유기 염료, 무기 형광체(phosphor) 및/또는 양자 재료와 같은 반도체 발광 나노입자이다. 명료화를 위해, 단지 입사광을 반사하고/하거나 입사광을 흡수하고 광을 방출하지 않는 재료(예를 들어, 진주광택 안료(pearlescent pigment), 컬러 필터 염료)는 본 발명의 발광 모이어티가 아니다.

[0342] 본 발명의 일부 실시예에서, 발광 모이어티(110)의 총량은 제1 픽셀(161)의 총량을 기준으로 0.1 중량%부터 90 중량%까지, 바람직하게는 10 중량%부터 70 중량%까지, 더 바람직하게는 30 중량%부터 50 중량%까지의 범위이다.

[0343] - iii) 반도체 발광 나노입자

[0344] 본 발명에 따르면, 용어 "반도체"는 실온에서 도체(예컨대, 구리)의 전기 전도도와 절연체(예컨대, 유리)의 전기 전도도 사이의 정도로 전기 전도도를 갖는 재료를 의미한다. 바람직하게는, 반도체는 온도와 함께 전기 전도도가 증가하는 재료이다.

[0345] 용어 "나노크기"는 0.1 nm 내지 150 nm 사이, 더 바람직하게는 3 nm 내지 50 nm의 크기를 의미한다.

[0346] 따라서, 본 발명에 따르면 "반도체 발광 나노입자"는, 발광 재료가 크기가 0.1nm 내지 150 nm 사이, 더 바람직하게는 3nm 내지 50nm이며 실온에서 도체(예컨대 구리)의 전기 전도도와 절연체(예컨대 유리)의 전기 전도도 사이 정도의 전기 전도도를 갖는 의미하는 것으로 간주되며, 바람직하게, 반도체는 온도에 따라 전기 전도도가 증가하는 재료이고, 크기는 0.1 nm와 150 nm 사이, 바람직하게는 0.5 nm 내지 150 nm, 더 바람직하게는 1 nm 내지 50 nm이다.

[0347] 본 발명에 따르면, 용어 "크기"는 TEM 이미지에서 어두운 콘트라스트 특징부의 평균 면적과 동일한 면적을 갖는 원의 평균 직경을 의미한다.

[0348] 반도체 나노크기 발광 입자의 평균 직경은 Tecnai G2 Spirit Twin T-12 투과 전자 현미경에 의해 생성된 TEM 이미지에서 100 반도체 발광 나노입자에 기초하여 계산된다.

[0349] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 본 발명의 반도체 발광 나노입자는 양자크기(quantum sized) 재료(양자 재료)이다. 더 바람직하게는, 상기 양자크기 재료는 양자점(quantum dot)이다.

[0350] 본 발명에 따르면 용어 "양자크기"는, 예를 들어 ISBN:978-3-662-44822-9에 기술된 것 같이, 양자 구속 효과(quantum confinement effect)를 나타낼 수 있는, 리간드 또는 또 다른 표면 개질이 없는 반도체 재료 자체의 크기를 의미한다.

[0351] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 상기 코어는 적어도 주기율표의 13족의 하나의 원소 및 주기율표의 15족의 하나의 원소를 포함하고, 바람직하게는 13족의 원소는 In이고, 15족의 원소는 P이며, 더 바람직하게는 코어 재료는 InP, InPZn, InPZnS, InPZnSe, InPZnSeS, InPZnGa, InPGaS, InPGaSe, InPGaSeS, InPZnGaSeS 및 InPGa로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

[0352] 본 발명에 따르면, 반도체 발광 나노입자의 코어의 형상의 유형, 및 합성될 반도체 발광 나노입자의 형상은 특별히 제한되지 않는다.

[0353] 예를 들어, 구형, 세장형, 별형, 다면체형, 피라미드형, 테트라포드형, 사면체형, 플레이트렛(platelet)형, 원뿔형, 및 불규칙 형상 코어 및 - 또는 반도체 발광 나노입자가 합성될 수 있다.

[0354] 본 발명의 일부 실시예에서, 코어의 평균 직경은 1.5 nm부터 3.5 nm까지의 범위이다.

[0355] 코어의 평균 직경은 각각의 단일 입자의 최장축을 측정함으로써 Tecnai G2 Spirit Twin T-12 투과 전자 현미경에 의해 생성된 TEM 이미지에서 100 반도체 발광 나노입자에 기초하여 계산된다.

[0356] 본 발명의 일부 실시예에서, 적어도 하나의 쉘 층은 주기율표의 12 족의 제1 원소 및 주기율표의 16 족의 제2 원소를 포함하거나 그로 이루어지고, 바람직하게는, 제1 원소는 Zn이고, 제2 원소는 S, Se 또는 Te이며; 바람직하게는 상기 코어를 직접적으로 커버하는 제1 쉘 층은 주기율표의 12 족의 제1 원소 및 주기율표의 16 족의 제2 원소를 포함하거나 그로 이루어지고, 바람직하게는, 제1 원소는 Zn이고 제2 원소는 S, Se, 또는 Te이고, 바람직하게는, 쉘 층은 ZnSe, ZnS, ZnS_xSe_y, $ZnSe_yTe_z$ 또는 ZnS_xTe_z이며, 여기서 $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $0 \leq z \leq 1$, 그리고 $x+y+z=1$이다,

[0357] 본 발명의 일부 실시예에서, 상기 쉘 층은 합금(alloyed) 쉘 층 또는 그레이디드(graded) 쉘 층이고, 바람직하게는 상기 그레이디드 쉘 층은 ZnS_xSe_y, $ZnSe_yTe_z$, 또는 ZnS_xTe_z이고, 더 바람직하게는 ZnS_xSe_y이다.

[0358] 본 발명의 일부 구현예에서, 반도체 발광 나노입자는 상기 쉘 층 상에 제2 쉘 층을 더 포함하고, 바람직하게는 제 2 쉘 층은 주기율표의 12 족의 제3 원소 및 주기율표의 16 족의 제4 원소를 포함하거나 그로 이루어지며, 보다 바람직하게는 제3 원소는 Zn이고, 제4 원소는 S, Se, 또는 Te이며, 단, 제4 원소와 제2 원소는 동일하지 않다.

[0359] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 제2 쉘 층은 하기 식 (XI´)으로 표시되며,

[0360] $ZnS_xSe_yTe_z$ - (XI´)

[0361] 여기서 $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $0 \leq z \leq 1$, 그리고 $x+y+z=1$이며, 바람직하게, 쉘 층은 ZnSe, ZnS_xSe_y, $ZnSe_yTe_z$, 또는 ZnS_xTe_z이며 단, 쉘 층 및 제2 쉘 층은 동일하지 않다.

[0362] 본 발명의 일부 실시예들에서, 상기 제2 쉘 층은 합금 쉘 층일 수 있다.

[0363] 본 발명의 일부 실시예들에서, 반도체 발광 나노입자는 멀티쉘로서 제2 쉘 층 상의 하나 이상의 추가적인 쉘 층을 더 포함할 수 있다.

[0364] 본 발명에 따르면, 용어 "멀티쉘"은 3 개 이상의 쉘 층으로 이루어진 적층된 쉘층을 의미한다.

[0365] 예를 들어, CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnSeS, ZnTe, ZnO, GaAs, GaP, GaSb, HgS, HgSe, HgSe, HgTe, InAs, InP, InPZn, InPZnS, InPZnSe, InPZnSeS, InPZnGa, InPGaS, InPGaSe, InPGaSeS, InPZnGaSeS and InPGa, InCdP, InPCdS, InPCdSe, InSb, AlAs, AlP, AlSb, Cu_2S, Cu_2Se, CuInS2, $CuInSe_2$, $Cu_2(ZnSn)S_4$, $Cu_2(InGa)S_4$ 같은 쉘 층을 갖지 않는 양자크기 재료; 코어로서의 CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnSeS, ZnTe, ZnO, GaAs, GaP, GaSb, HgS, HgSe, HgSe, HgTe, InAs, InP, InPZn, InPZnS, InPZnSe, InPZnSeS, InPZnGa, InPGaS, InPGaSe, InPGaSeS, InPZnGaSeS and InPGa, InCdP, InPCdS, InPCdSe, InSb, AlAs, AlP, AlSb, Cu_2S, Cu_2Se, CuInS2, $CuInSe_2$, $Cu_2(ZnSn)S_4$, $Cu_2(InGa)S_4$ 및 ZnSe, ZnS, ZnSeS, ZnSeTe, ZnSTe와 같은 코어-쉘 양자크지 재료, 코어로서의 CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnSe, ZnSeS, ZnTe, ZnO, GaAs, GaP, GaSb, HgS, HgSe, HgSe, HgTe, InAs, InP, InPZn, InPZnS, InPZnSe, InPZnSeS, InPZnGa, InPGaS, InPGaSe, InPGaSeS, InPZnGaSeS and InPGa, InCdP, InPCdS, InPCdSe, InSb, AlAs, AlP, AlSb, Cu_2S, Cu_2Se, CuInS2, $CuInSe_2$, $Cu_2(ZnSn)S_4$, $Cu_2(InGa)S_4$, 제1 쉘로서의 ZnSe, ZnS, ZnSeS, ZnSeTe, ZnSTe, 제2 쉘로서의 ZnSe, ZnS, ZnSeS, ZnSeTe, ZnSTe와 같은 코어-더블 쉘

양자크기 재료로서, 제1 쉘 층 및 제2 쉘 층은 동일한 재료가 아닌, 상기 코어-더블 쉘 양자크기 재료;가 바람직하게 사용될 수 있다.

[0366] 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 이들 중 임의의 것의 조합이 사용될 수 있다. 보다 더 바람직하게는, 독성이 적다는 관점에서 nP/ZnS, InP/ZnSe, InP/ZnSe/ZnS, InZnP /ZnS, InZnP /ZnSe, InZnP /ZnSe/ZnS, InGaP/ZnS, InGaP/ZnSe, InGaP/ZnSe/ZnS를 사용할 수 있다.

[0367] 이러한 반도체 발광 나노입자는 (예를 들어 Sigma Aldrich로부터) 공개적으로 이용가능하고 그리고/또는 예를 들어 US 7,588,828 B, US 8,679,543 B 및 Chem. Mater. 2015, 27, pp 4893-4898에 기술된 방법으로 합성될 수 있다.

[0368] 본 발명의 일부 실시예에서, 조성물은 둘 이상의 반도체 발광 나노입자를 포함한다.

[0369] 본 발명의 일부 실시예에서, 조성물은 복수의 반도체 발광 나노입자를 포함한다.

[0370] 본 발명의 일부 실시예에서, 반도체 발광 나노입자의 총량은 조성물의 총량을 기준으로 0.1 중량%부터 90 중량%까지, 바람직하게는 10 중량%부터 70 중량%까지, 더 바람직하게는 15 중량%부터 50 중량%까지의 범위이다.

[0371] - 리간드

[0372] 본 발명의 일부 실시예에서, 선택적으로, 발광 모이어티는 위에서 이미 설명된 바와 같이 하나 이상의 리간드에 의해 직접 위에 코팅될 수 있다.

[0373] 리간드로서, 포스핀 및 포스핀 옥사이드 이를테면, 트리옥틸포스핀 옥사이드(TOPO), 트리옥틸포스핀(TOP), 및 트리부틸포스핀(TBP); 포스폰산 이를테면, 도데실포스폰산(DDPA), 트리데실포스폰산(TDPA), 옥타데실포스폰산(ODPA), 및 헥실포스폰산(HPA); 아민 이를테면, 올레일아민, 데데실 아민(DDA), 테트라데실 아민(TDA), 헥사데실 아민(HDA), 및 옥타데실 아민(ODA), 올레일아민(OLA), 1-옥타데센(ODE), 에루크산, 옥타데칸티올, 티올 이를테면, 헥사데칸 티올 및 헥산 티올; 머캅토 카르복실산 이를테면, 머캅토 프로피온산 및 머캅토운데칸산; 카르복실산 이를테면, 올레산, 스테아르산, 미리스트산; 아세트산, 폴리에틸렌이민(PEI), 단일작용기 PEG 티올(mPEG-티올) 또는 mPEG 티올의 유도체 및 이들 중 임의의 것의 조합물이 사용될 수 있다.

[0374] 이러한 리간드의 예는, 예를 들어 국제 특허 출원 공개 번호 WO 2012/059931A에 기술되어 있다.

[0375] -조성물의 용도

[0376] 다른 양태에서, 본 발명은 전자 디바이스, 광학 디바이스, 센싱 디바이스 또는 바이오메디컬 디바이스에서의, 또는 전자 디바이스, 센싱 디바이스, 광학 디바이스 또는 바이오메디컬 디바이스를 제조하기 위한, 본 발명의 조성물의 용도에 관한 것이다.

[0377] - 조성물을 포함하는 층 및 그 층을 제조하는 프로세스

[0378] 다른 양태에서, 본 발명은 본 발명의 조성물을 포함하는 층에 관한 것이다.

[0379] 다른 양태에서, 본 발명은 다음을 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어진 층에 관한 것이며;

[0380] X) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

[0381] XI) (메트)아크릴레이트 폴리머; 및

[0382] XII) 본 발명의 화합물.

[0383] 바람직한 실시예에서, 층의 층 두께는 1부터 50 ㎛까지, 바람직하게는 5부터 30까지, 더 바람직하게는 8부터 20까지, 더욱 더 바람직하게는 10부터 15 ㎛까지의 범위이다.

[0384] 다른 양태에서, 본 발명은 다음을 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나, 또는 그로 이루어진 층을 형성하기 위한 방법에 관한 것이다:

[0385] S1) 바람직하게는 잉크-제팅에 의해, 본 발명의 조성물을 기판 상에 제공하는 단계;

[0386] S2) 상기 조성물을 경화시키는 단계, 바람직하게 상기 경화는 광 조사, 열 경화 또는 광 경화와 열 경화의 조합에 의해 수행된다.

[0387] 다른 양태에서, 본 발명은 본 발명의 방법에 의해 수득가능한 또는 수득되는 조성물을 경화시킴으로써 수득가능한 또는 수득되는 층에 관한 것이다.

[0388] 다른 양태에서, 본 발명은 다음을 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어진 층에 관한 것이다;

[0389] X) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

[0390] XI) (메트)아크릴레이트 폴리머; 및

[0391] XII) 상술한 바와 같은 본 발명의 화합물.

[0392] - 색변환 디바이스(100)

[0393] 색변환 디바이스(100)는, 발광 모이어티(110)를 포함하는 적어도 매트릭스 재료(120)를 포함하는 청구항 20 항 내지 22 항 및 24 항 중 어느 한 항의 층으로 부분적으로 또는 완전히 충전된 적어도 제1 픽셀(161), 및 적어도 폴리머 재료를 포함하는 뱅크(150)를 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어지며, 바람직하게 색변환 디바이스(100)는 지지 매체(170)를 추가로 포함한다.

[0394] - 제1 픽셀(161)

[0395] 본 발명에 따르면, 상기 제1 픽셀(161)은 적어도, 발광 모이어티(110)를 포함하는 매트릭스 재료(120)를 포함한다. 바람직한 실시예에서, 제1 픽셀(161)은 적어도 하나의 발광 모이어티(110)와 함께 적어도 하나의 아크릴레이트 모노머를 포함하는 본 발명의 조성물을 경화시킴으로써 수득되거나 수득가능한 고체 층이며, 바람직하게는 상기 경화는 광 조사에 의한 광 경화, 열 경화 또는 광 경화와 열 경화의 조합이다.

[0396] 본 발명의 일부 구현예에서, 픽셀(161)의 층 두께는 0.1부터 100㎛까지의 범위이며, 이는 바람직하게는 1부터 50㎛까지, 더 바람직하게는 5부터 25㎛까지이다.

[0397] 본 발명의 일부 실시예에서, 색변환 디바이스(100)은 제2 픽셀(162)을 추가로 포함하고, 바람직하게는 디바이스(100)는 적어도 상기 제1 픽셀(161), 제2 픽셀(162) 및 제3 픽셀(163)을 포함하고, 더 바람직하게는 상기 제1 픽셀(161)은 적색 컬러 픽셀이고, 제2 픽셀(162)는 녹색 컬러 픽셀이고 그리고 제3 픽셀(163)은 청색 컬러 픽셀이고, 보다 더 바람직하게는 제1 픽셀(161)은 적색 발광 모이어티(110R)를 포함하고, 제2 색 픽셀(162)은 녹색 발광 모이어티(110G)를 포함하고, 제3 픽셀(163)은 어떠한 발광 모이어티도 포함하지 않는다.

[0398] 일부 실시예에서, 적어도 하나의 픽셀(160)은 매트릭스 재료(120)에 적어도 하나의 광 산란 입자(130)을 추가적으로 포함하며, 바람직하게 픽셀(160)은 복수의 광 산란 입자(130)를 포함한다.

[0399] 본 발명의 일부 실시예에서, 상기 제1 픽셀(161)은 여기 광에 의해 조사될 때 적색 컬러를 방출하도록 구성된 하나의 픽셀 또는 둘 이상의 서브픽셀로 이루어지고, 보다 바람직하게는 상기 서브픽셀은 동일한 발광 모이어티(110)을 포함한다.

[0400] - 매트릭스 재료(120)

[0401] 바람직한 실시예에서, 매트릭스 재료(120)는 (메트)아크릴레이트 폴리머를 포함하며, 바람직하게는 이는 메타크릴레이트 폴리머, 아크릴레이트 폴리머 또는 이들의 조합이고, 더 바람직하게는 아크릴레이트 폴리머이고, 보다 더 바람직하게 상기 매트릭스 재료(120)는 적어도 하나의 아크릴레이트 모노머를 포함하는 본 발명의 조성물로부터 수득되거나 수득가능하고, 더욱 더 바람직하게는 상기 매트릭스 재료(120)은 적어도 하나의 디-아크릴레이트 모노머를 포함하는 본 발명의 조성물로부터 수득되거나 수득가능하고, 특히 바람직하게 상기 매트릭스 재료(120)는 적어도 하나의 디-아크릴레이트 모노머 및 모노-아크릴레이트 모노머를 포함하는 본 발명의 조성물로부터 수득되거나 수득가능하고, 바람직하게는 상기 조성물은 감광성 조성물이다.

[0402] - 뱅크(150)

[0403] 본 발명의 일부 구현예에서, 뱅크(150)의 높이는 0.1부터 100㎛까지의 범위이며, 이는 바람직하게는 1부터 50㎛까지, 더 바람직하게는 1부터 25㎛까지, 더욱 더 바람직하게는 5부터 20㎛까지이다.

[0404] 본 발명의 바람직한 실시예에서, 뱅크(150)는 상기 제1 픽셀(161)의 면적을 결정하도록 구성되고, 뱅크(150)의 적어도 일부는 제1 픽셀(161)의 적어도 일부에 직접적으로 접촉하며, 바람직하게는 뱅크(150)의 상기 제2 폴리머는 제1 픽셀(161)의 제1 폴리머의 적어도 일부에 직접적으로 접촉한다.

[0405] 더 바람직하게는, 상기 뱅크(150)는 포토리소그래피로 패터닝되고, 상기 제1 픽셀(161)은 뱅크(150)에 의해 둘러싸이며, 바람직하게는 상기 제1 픽셀(161), 제2 픽셀(162) 및 제3 픽셀(163)은 모두, 포토리소그래피로 패터닝된 뱅크(150)에 의해 둘러싸인다.

[0406] 다른 양태에서, 본 발명은 또한 적어도 하기 단계를, 바람직하게는 이러한 순서로, 포함하는 본 발명의 색변환 디바이스(100)를 제조하기 위한 방법에 관한 것이다;

[0407] Xi) 지지 매체의 표면 상에 뱅크 조성물을 제공하는 단계,

[0408] Xii) 뱅크 조성물을 경화하는 단계,

[0409] Xiii) 경화된 상기 조성물에 포토패터닝을 적용하여 뱅크 및 패터닝된 픽셀 영역을 제조하는 단계,

[0410] Xiv) 바람직하게는 잉크 젯팅(ink-jetting)에 의해, 적어도 하나의 픽셀 영역에 본 발명의 조성물을 제공하는 단계,

[0411] Xv) 조성물을 경화하는 단계로서, 바람직하게는 상기 색변환 디바이스(100)는 지지 매체(170)를 더 포함하는, 상기 조성물을 경화하는 단계.

[0412] 다른 양태에서, 본 발명은 추가로, 본 발명의 방법으로부터 수득가능하거나 수득되는 색변환 디바이스(100)에 관한 것이다.

[0413] 다른 양태에서, 본 발명은 또한, 광을 변조하도록 구성되거나 광을 방출하도록 구성되는 적어도 하나의 기능성 매체(320, 420, 520)를 포함하는 광학 디바이스(300)에서의 본 발명의 색변환 디바이스(100)의 용도에 관한 것이다.

[0414] 또한, 다른 양태에서, 본 발명은 추가로, 광을 변조하도록 구성되거나 광을 방출하도록 구성된 적어도 하나의 기능성 매체(320, 420, 520), 및 본 발명의 색변환 디바이스(100)를 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어지는 광학 디바이스(300)에 관한 것이다.

[0415] **바람직한 실시예**

[0416] 1. 조성물로서, 바람직하게는 이는 광경화성 조성물이며,

[0417] i) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

[0418] ii) 적어도 1종의 반응성 모노머 또는 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물; 및

[0419] iii) 화합물을 적어도 포함하거나, 이들로 본질적으로 이루어지거나 또는 이들로 이루어지며,

[0420] 상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하며, 여기서 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 대체될 수 있거나;

[0421] 또는

[0422] 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 치환되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 치환되는, 상기 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를

갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 적어도 하나의 기를 포함하며; 바람직하게는 상기 언급된 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고;

[0423] 상기 화합물의 분자량은 2000 이하, 바람직하게는 1000 이하, 보다 더 바람직하게는 500 이하이고 상기 화합물의 분자량은 100 이상, 바람직하게는 200 이상, 보다 더 바람직하게는 300 이상인, 조성물. 이는 본 발명의 화합물이 폴리머가 아니라는 것을 의미한다. 이는 모노머 또는 올리고머이다.

[0424] 2. 실시예 1에 있어서, 상기 화합물은, 포스핀기, 포스핀 옥사이드기, 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 3급 아민, 카르복실기, 헤테로 시클릭기, 실란기, 술폰산, 히드록실기, 포스폰산으로 이루어진 그룹의 멤버 중 하나 이상으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 더 포함하며, 바람직하게 상기 기는 포스페이트기, 포스포네이트기, 티올기, 카르복실기, 또는 이들 중 임의의 것의 조합물이고, 더 바람직하게는 티올기인, 조성물.

[0425] 3. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹의 하나 이상의 멤머로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 그리고

[0426] 상기 리간드는, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 상기 비극성 리간드의 상기 그룹의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 또는

[0427] 상기 화학 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택된 리간드로부터 선택된 그룹의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 상기 비극성 리간드의 상기 그룹의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 그리고

[0428] 상기 리간드는, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH2, SO, SO2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고, 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있는, 조성물.

[0429] 4. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 상기 조성물에 첨가되는 상기 화합물 의 총량(T)은 하기 화학식 (I^a) 및 (II^a)에 기초하여 결정되는, 조성물.

[0430] $Tch = (Pl - Pm) * Al / (Pm - P)$ $-(I^a)$

[0431] Pl: 발광 모이어티의 리간드의 극성값

[0432] Pm: 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물이 조성물에 사용되는 모노머 혼합물의 극성값

[0433] Al: 리간드의 총량

[0434] P: 화합물의 극성값

[0435] Tch: 화합물의 미리 결정된 총량

[0436] $T=Tch*Z$ - (II^a)

[0437] $0.5 \leq Z \leq 1.5$, 바람직하게는 $0.7 \leq Z \leq 1.3$, 더 바람직하게는 $0.8 \leq Z \leq 1.2$;

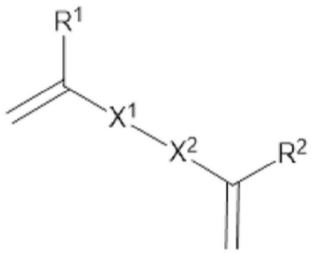
[0438] T: 화합물의 총량

[0439] 5. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 상기 발광 모이어티의 총 중량에 대한 화합물의 총 중량의 비율이 0.6:40 내지 1:3이고; 상기 발광 모이어티가 무기 발광 재료인 경우에, 무기 발광 물질의 무기 부분의 중량에 대한 화합물의 중량의 비율이 0.003 내지 3.2인, 조성물.

[0440] 6. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 상기 반응성 모노머은, 모노-(메트)아크릴레이트 모노머, 디-(메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 트리-(메트)아크릴레이트 모노머로부터 선택된 (메트)아크릴레이트 모노머인, 조성물.

[0441] 바람직하게는, 모노머 혼합물의 상기 반응성 모노머는 각각 독립적으로 모노-(메트)아크릴레이트 모노머, 디-(메트)아크릴레이트 모노머 및/또는 트리-(메트)아크릴레이트 모노머로부터 선택된다.

[0442] 7. 실시예 6에 있어서, 상기 디-(메트)아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (I^b)로 표시되고, 상기 모노-아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (II^b)로 표시되고, 그리고/또는 상기 트리-(메트)아크릴레이트 모노머는 하기 화학식 (III^b)로 표시되며;

[0443] 

(I^b)

[0444] 식 중

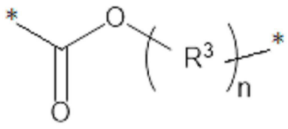
[0445] X^1은 비치환 또는 치환된 알킬기 또는 아릴기이고, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자,C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X는 에스테르기이고, 바림직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고;

[0446] X^2는 비치환 또는 치환된 알킬기 또는 아릴기이고, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자,C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고, 하나 이상의 H 원자는D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X는 에스테르기이고, 바림직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고;

[0447] R^1은 수소 원자, Cl, Br, 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기이며, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1은 에스테르

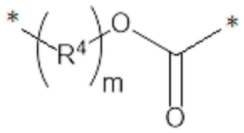
기이고; 상기 에스테르기는 카르복실산기이며, 바람직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소원자를 갖고;

[0448] R^2는 수소 원자, Cl, Br, 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기이며, 여기서 알킬 또는 아릴기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체될 수 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있거나; 또는 X^1은 에스테르기이고; 상기 에스테르기는 카르복실산기이며, 바람직하게 상기 알킬기는 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖고, 바람직하게 상기 아릴기는 3 내지 45 개의 탄소원자를 갖고;

[0449] 바람직하게 기호 X^1은  이며,

[0450] 여기서 식의 좌측의 "*"는 식 (I)의 말단기 $C=CR^1$의 탄소 원자와의 연결 지점을 나타내고, 우측의 "*"는 식 (I)의 기호 X^2와의 연결 지점을 나타내고;

[0451] n은 0 또는 1이고;

[0452] 바람직하게 기호 X^2는  이며,

[0453] 여기서 식의 좌측의 "*"는 식 (I)의 기호 X1과의 연결 지점을 나타내고, 우측의 "*"는 식 (I)의 말단기 $C=CR^2$와의 연결 지점을 나타내고;

[0454] m은 0 또는 1이며;

[0455] 바람직하게는 적어도 m 또는 n은 1이고;

[0456] R^3은 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬, 3 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 시클로알칸 또는 3 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 아릴기이며, 바람직하게는 R^3은 1 내지 15 개의 탄소 원자, 보다 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며,

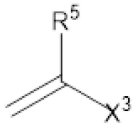
[0457] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0458] R^4는 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬, 3 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 시클로알칸 또는 3 내지 25개의 탄소 원자를 갖는 아릴기이며, 바람직하게는 R^4는 1 내지 15 개의 탄소 원자, 보다 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며,

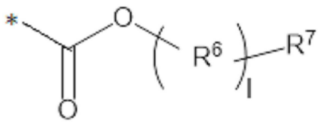
[0459] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0460] R^a는 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 시클릭 알킬 또는 알콕시기, 5 내지 60 개의 탄소 고리 원자를 갖는 방향족 고리계, 또는

5 내지 60 개의 탄소 원자를 갖는 헤테로 방향족 고리계이며, 여기서 H 원자는 D, F, Cl, Br, I에 의해 대체될 수도 있고; 여기에서 2 개 이상의 인접한 치환기 R^a는 또한, 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수도 있고;

[0461]  (II^b)

[0462] X^3은 비치환된 또는 치환된 알킬기, 아릴기 또는 알콕시기이고;

[0463] 바람직하게 기호 X^3은  이며,

[0464] 여기서 식의 좌측의 "*"는 식 (I)의 말단기 $C=CR^5$와의 연결 지점을 나타내고;

[0465] l는 0 또는 1이고;

[0466] R^5는 수소 원자, Cl, Br 또는 F의 할로겐 원자, 메틸기, 알킬기, 아릴기, 알콕시기, 에스테르기 또는 카르복실산기이고;

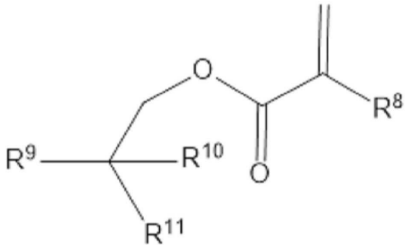
[0467] R^6은 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며, 괄호 내의 R^6은 폴리-알콕실렌의 반복 단위가 아니며, 바람직하게는 R^6은 1 내지 15의 탄소 원자, 더 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이고,

[0468] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0469] R^7은 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며, 바람직하게는 R^7은 1 내지 15 개의 탄소 원자, 더 바람직하게는 1 내지 5 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬렌 사슬 또는 알콕실렌 사슬이며,

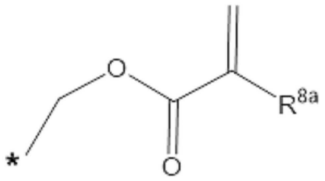
[0470] 이는 하나 이상의 라디칼 R^a에 의해 치환될 수도 있고, 여기서 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 $R^aC=CR^a$, C≡C, $Si(R^a)_2$, $Ge(R^a)_2$, $Sn(R^a)_2$, C=O, C=S, C=Se, $C=NR^a$, $P(=O)(R^a)$, SO, SO2, NR^a, OS, 또는 $CONR^a$에 의해 대체될 수도 있고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수도 있고;

[0471] R^a는 각각의 경우, 동일하게 또는 상이하게, H, D 또는 1 내지 20 개의 탄소 원자를 갖는 알킬기, 3 내지 40 개의 탄소 원자를 갖는 시클릭 알킬 또는 알콕시기, 5 내지 60 개의 탄소 고리 원자를 갖는 방향족 고리계, 또는 5 내지 60 개의 탄소 원자를 갖는 헤테로 방향족 고리계이며, 여기서 H 원자는 D, F, Cl, Br, I에 의해 대체될 수도 있고; 여기에서 2 개 이상의 인접한 치환기 R^a는 또한, 서로 모노- 또는 폴리시클릭, 지방족, 방향족 또는 헤테로방향족 고리계를 형성할 수도 있고;



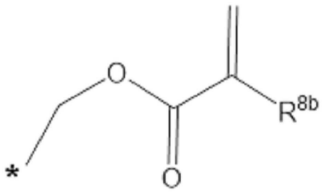
[0472] (III^b);

[0473] 식 중 R^9는 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (IV^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이며



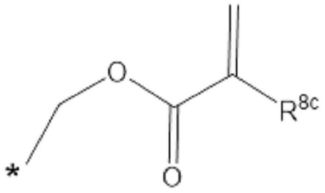
[0474] (IV^b);

[0475] R^{10}은 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (V^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이고



[0476] (V^b);

[0477] R^{11}은 수소 원자, 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기 또는 화학식 (VI^b)로 표시되는 (메트)아크릴기이고



[0478] (VI^b);

[0479] R^8, R^{8a}, R^{8b} 및 R^{8c}는, 각각의 경우에 각각 독립적으로 또는 서로 의존적으로, H 또는 CH_3이며;

[0480] 식 중 R^9, R^{10} 및 R^{11} 중 적어도 하나는 (메트)아크릴기이며, 바람직하게 R^9, R^{10} 및 R^{11} 중 2 개는 (메트)아크릴기이고 나머지 하나는 수소 원자 또는 1 내지 25 개의 탄소 원자를 갖는 직선형 알킬기이고, 바람직하게 식 (III)의 (메트)아크릴레이트 모노머의 전기 전도도(S/cm)는 $1.0*10^{-10}$ 이하, 바람직하게는 $5.0*10^{-11}$ 이하, 더 바람직하게는 $5.0*10^{-11}$부터 $1.0*10^{-15}$까지의 범위, 보다 더 바람직하게는 $5.0*10^{-12}$부터 $1.0*10^{-15}$까지의 범위인, 조성물.

[0481] 8. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 화학식 (I) 및/또는 화학식 (II)의 상기 (메트)아크릴레이트 모노머의 비점(B.P.)은 250℃ 이상이며, 바람직하게 화학식 (I) 및 화학식 (II)의 (메트)아크릴레이트 모노머는 둘 모두 250℃ 이상이고, 더 바람직하게는 250℃부터 350℃까지, 보다 더 바람직하게는 280℃부터 350℃까지, 더욱 더 바람직하게는 300℃부터 348℃까지의 범위인, 조성물.

[0482] 9. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 조성물의 점도는 1000[1/s]에서의 전단율(share rate), 25 ° C에서 레오미터(rheometer)에 의해 측정된 실온에서 35 (cP) 이하, 바람직하게는 1부터 35 cP까지, 더 바람직하게는 2

부터 30 cP까지, 보다 더 바람직하게는 2부터 25 cP까지인, 조성물.

[0483] 10. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 다음으로 이루어진 그룹의 하나 이상의 멤버들로부터 선택된 다른 재료를 포함하는, 조성물;

[0484] iii) 실시예 1의 발광 모이어티와 상이한 다른 발광 모이어티;

[0485] iv) 다른 (메트)아크릴레이트 모노머;

[0486] v) 산란 입자, 및

[0487] vi) 광학적으로 투명한 폴리머, 산화방지제, 라디칼 소광제, 광 개시제 및/또는 계면활성제, 바람직하게는 상기 다른 재료는 산란 입자이고, 바람직하게는 상기 다른 재료는 산란 입자이다.

[0488] 11. 전술한 실시예 중 어느 하나에 있어서, 조성물은 조성물의 총량을 기준으로 10중량% 이하의 용매를 포함하며, 이는 더 바람직하게는 5중량% 이하이고, 더 바람직하게는 무용매 조성물이며, 바람직하게 상기 조성물은 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 이를테면 에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르, 에틸렌 글리콜 모노프로필 에테르, 및 에틸렌 글리콜 모노부틸 에테르; 디에틸렌 글리콜 디알킬 에테르, 이를테면 디에틸렌 글리콜 디메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디에틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 디프로필 에테르, 및 디에틸렌 글리콜 디부틸 에테르; 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르, 이를테면 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르(PGME), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르; 에틸렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 이를테면 메틸 셀로솔브 아세테이트 및 에틸 셀로솔브 아세테이트; 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 이를테면 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트(PGMEA), 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르 아세테이트, 및 프로필렌 글리콜 모노프로필 에테르 아세테이트; 케톤, 이를테면 메틸 에틸 케톤, 아세톤, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤, 및 시클로헥사논; 알코올, 이를테면 에탄올, 프로판올, 부탄올, 헥산올, 시클로 헥산올, 에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜 및 글리세린; 에스테르, 이를테면 에틸 3-에톡시프로피오네이트, 메틸 3-메톡시프로피오네이트 및 에틸 락테이트; 및 시클릭 에스테르, 이를테면 감마-부티로-락톤; 염소화 탄화수소, 이를테면 클로로포름, 디클로로메탄, 클로로벤젠, 트리메틸 벤젠 이를테면 1,3,5-트리메틸벤젠, 1,2,4-트리메틸 벤젠, 1,2,3-트리메틸 벤젠, 도세실벤젠, 시클로헥실벤젠, 1,2,3,4-테트라메틸벤젠, 1,2,3,5-테트라메틸벤젠, 3-이소프로필비페닐, 3-메틸비페닐, 4-메틸비페닐 및 디클로로벤젠으로 이루어진 그룹의 하나 이상의 멤버로부터 선택되는 용매 중 임의의 것을 포함하지 않으며, 바람직하게 상기 용매는 프로필렌 글리콜 알킬 에테르 아세테이트, 알킬 아세테이트, 에틸렌 글리콜 모노알킬 에테르, 프로필렌 글리콜, 및 프로필렌 글리콜 모노알킬 에테르인, 조성물.

[0489] 12. 조성물을 제조하기 위한 방법으로서,

[0490] I) 발광 모이어티의 리간드의 극성값 및/또는 발광 모이어티의 리간드의 화학적 구조를 식별하는 단계;

[0491] II) 리간드의 극성값 및/또는 발광 모이어티의 화학적 구조에 기초하여 화합물을 선택하여 조성물 중의 모든 리간드의 극성값과 상기 화합물의 극성값의 합을 수정하는 단계;

[0492] III) 적어도 단계 (I)의 발광 모이어티와 반응성 모노머 또는 모노머 혼합물을 혼합하여 상기 조성물을 수득하는 단계;

[0493] IV) 1종의 단일 반응성 모노머가 상기 조성물에 사용되는 경우 반응성 모노머의 극성값을 식별하거나, 2종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물이 조성물에 사용되는 경우 상기 모노머 혼합물의 극성값을 식별하는 단계;

[0494] V) 선택적으로, 발광 모이어티의 리간드의 극성값에 기초하여 상기 화합물의 양을 결정하는 단계를 포함하거나, 이들로 본질적으로 이루어지거나 이들로 이루어지며,

[0495] 여기서 상기 화합물은 단계 III) 이전, 단계 III)에서 또는 단계 III) 이후, 바람직하게는 단계 III)에서 또는 단계 III) 이후에 첨가되는, 방법.

[0496] 바람직하게는 상기 리간드는 발광 모이어티 상에 직접 부착되는 복수의 리간드이고, 단계 I)에서의 상기 식별은 상기 복수의 리간드에 적용되고,

[0497] 바람직하게는, 상기 리간드가 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄

소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 비극성 리간드의 상기 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN, 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있을 때, 상기 화합물은 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN, 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있고; 상기 리간드가 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기; 및 또는 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알킬기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 극성 리간드이며, 상기 언급된 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN, 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있을 때, 상기 화합물은 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 시클로-알킬기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 시클로-알케닐기로 이루어지는 그룹으로부터 선택되는 비극성 리간드이며, 비극성 리간드의 상기 기들의 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN, 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있다.

[0498] 13. 실시예 12의 방법에 의해 수득되거나 수득가능한 조성물.

[0499] 14. 층을 형성하기 위한 방법으로서,

[0500] S1) 바람직하게는 잉크-제팅(ink-jetting)에 의해, 기판 상에 실시예 1 내지 10 중 어느 하나의 조성물을 제공하는 단계;

[0501] S2) 상기 조성물을 경화시키는 단계로서, 바람직하게 상기 경화는 광 조사, 열 경화 또는 광 경화와 열 경화의 조합에 의해 수행되는, 상기 경화시키는 단계를 포함하거나, 이들로 이루어지거나 이들로 본질적으로 이루어지는, 방법.

[0502] 15. 실시예 1 내지 실시예 10 중 어느 하나의 조성물을 경화시킴으로써 수득되는 또는 수득가능한 층, 또는 실시예 14의 방법에 의해 수득되는 또는 수득가능한 층.

[0503] 16. 층으로서, 적어도;

[0504] X) 적어도 하나의 리간드를 갖는 발광 모이어티로서, 바람직하게는 상기 발광 모이어티는 복수의 리간드를 갖는, 상기 발광 모이어티;

[0505] XI) (메트)아크릴레이트 폴리머; 및

[0506] XII) 화합물을 적어도 포함하거나 이들로 본질적으로 이루어지거나 이들로 이루어지며,

[0507] 상기 화합물은, 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH_2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO_2에 의해 대체될 수 있는, 상기 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 1 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포

화 직쇄 알콕실기 또는 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알콕실기; 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알콕실기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 분지쇄 아릴-알콕실기; 및 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 시클로-알콕실기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 포함하거나;

[0508] 또는

[0509] 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기로서, 하나 이상의 인접하지 않은 CH2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고 하나 이상의 H 원자는 D, F, Cl, Br, I, CN 또는 NO2에 의해 대체될 수 있는, 상기 1 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 알킬기 또는 3 내지 80 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 알킬기; 2 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 알케닐기; 3 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 분지쇄 알케닐기; 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 직쇄 아릴-알킬기; 6 내지 45개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 분지쇄 아릴-알킬기, 5 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 아릴-알케닐기, 6 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 분지쇄 아릴-알케닐기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 불포화 또는 포화 시클로-알킬기, 4 내지 45 개의 탄소 원자를 갖는 시클로-알케닐기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 적어도 하나의 기를 포함하며; 바람직하게는 상기 기의 하나 이상의 인접하지 않은 CH2 기는 산소 원자, C=O, C=S, C=Se, C=NH, SiH_2, SO, SO_2, OS, 또는 CONH에 의해 대체되지 않고;

[0510] 상기 화합물의 분자량은 2000 이하, 바람직하게는 1000 이하, 보다 더 바람직하게는 500 이하이고 상기 화합물의 분자량은 100 이상, 바람직하게는 200 이상, 보다 더 바람직하게는 300 이상인, 층.

[0511] 17. 색변환 디바이스(100)로서, 발광 모이어티(110)를 포함하는 적어도 매트릭스 재료(120)를 포함하는 청구항 15 항 또는 16 항의 층으로 부분적으로 또는 완전히 충전된 적어도 제1 픽셀(161), 및 적어도 폴리머 재료를 포함하는 뱅크(150)를 적어도 포함하거나, 그로 본질적으로 이루어지거나 그로 이루어지며, 바람직하게 색변환 디바이스(100)는 지지 매체(170)를 추가로 포함하는, 색변환 디바이스.

[0512] 18. 광을 변조하도록 구성되거나 광을 방출하도록 구성된 하나의 기능성 매체(320, 420, 520), 및 실시예 17 중 어느 하나의 색변환 디바이스(100)를 적어도 포함하거나 이로 본질적으로 이루어지거나 이로 이루어진 광학 디바이스(300).

[0513] **발명의 기술적 효과**

[0514] 반응성 모노머 또는 2 종 이상의 반응성 모노머의 모노머 혼합물을 포함하는 조성물 중 발광 모이어티의 개선된 균질한 분산, 조성물 중 산란 입자의 개선된 균질한 분산, 바람직하게는 발광 입자 및 산란 입자 둘 모두의 개선된 균질한 분산, 더 바람직하게는 용매 없이 발광 모이어티 및/또는 산란 입자의 개선된 균질한 분산; 잉크젯(inkjet) 프린팅에 적합한 더 낮은 점도를 갖는 조성물, 바람직하게는 발광 모이어티 및/또는 산란 입자의 높은 로딩(loading)으로 혼합되더라도, 보다 더 바람직하게는 용매 없이, 더 낮은 점도를 유지할 수 있는 조성물; 대면적 균일 프린팅을 위해 더 낮은 증기압을 갖는 조성물; 잉크젯 프린팅 동안/후에 잉크젯 프린팅 노즐 주위에 잔류물 없음 또는 감소를 실현하는 새로운 조성물, 조성물 중 발광 모이어티의 개선된 QY 및/또는 EQE, 프린팅 후에 발광 모이어티의 개선된 QY 및/또는 EQE; 개선된 열 안정성; 프린팅 노즐에서의 막힘 없는 용이한 프린팅; 조성물의 용이한 취급, 개선된 프린팅 특성; 간단한 제조 프로세스; 청색광의 개선된 흡광도; 잉크젯 프린팅 후에 조성물로부터 추후 제조된 것의 개선된 견고성.

[0515] 하기 작업예 1 내지 12은 본 발명의 설명뿐만 아니라, 그들의 제조의 상세한 설명을 제공한다.

[0516] **작업예**

[0517] mPEG350-SH: 폴리(에틸렌 글리콜) 메틸 에테르 티올, 평균 Mn 350

[0518] mPEG800-SH: 폴리(에틸렌 글리콜) 메틸 에테르 티올, 평균 Mn 800

[0519] LA: 라우릴 아크릴레이트

[0520] HDDA: 1,6-헥산디올 디아크릴레이트

[0521] **작업예 1:** 매트릭스의 제조

[0522] 0.04 g의 Irganox(TM) 819에 2.368 g의 LA 및 0.592 g의 HDDA를 첨가한다. 혼합물을 Irganox(TM) 819가 완전히 용해될 때까지 진탕한다.

[0523] **비교예 1:** 적색 QD 잉크의 제조

[0524] 예 1에서 수득된 매트릭스 0.75 g, 헵탄에 분산된 리간드로서의 도데실기를 갖는 InP계 적색 QD 0.25 g을 유리 플라스크에서 혼합하고, 30 °C에서 진공 하에 회전증발기에서 휘발물질을 증발시켰다. 남아있는 휘발성 물질을 60 mTorr의 진공 하에 Schlenk 라인 상에서 제거하였다.

[0525] **작업예 2:** mPEG350-SH를 갖는 적색 QD 잉크의 제조

[0526] mPEG350-SH 0.05g을 톨루엔 1 mL에 용해시키고, 헵탄에 분산된 리간드로서의 도데실기를 가지는 InP계 적색 QD 0.25g을 첨가하고 그 혼합물을 1.5시간 동안 교반하였다. 이어서, 예 1에서 수득된 매트릭스 0.7 g을 첨가하고, 휘발성 물질을 30° C에서 진공 하에 회전 증발기 상에서 증발시켰다. 남아있는 휘발성 물질을 60 mTorr의 진공 하에 Schlenk 라인 상에서 제거하였다.

[0527] **작업예 3:** mPEG800-SH를 갖는 적색 QD 잉크의 제조

[0528] mPEG350-SH 대신 mPEG800-SH를 사용한 것을 제외하고 상기 작업예 2와 동일한 방식으로, mPEG800-SH를 갖는 적색 QD 잉크를 제조하였다.

[0529] **작업예 4:** 분산성 테스트

[0530] 작업예 2, 3에서 수득된 적색 QD 잉크 및 비교예 1에서 수득된 적색 QD 잉크는 대기 조건에서 상온 보관된다.

[0531] 실시예 2, 3의 적색 QD 잉크(특히 실시예 2, 3의 적색 QD 잉크)는 임의의 첨가제 리간드가 없는 비교예 1에 비해 우수한 분산성을 보인다.

[0532] **작업예 5:** 노즐 플레이트 습윤 테스트

[0533] 노즐 플레이트 습윤 테스트는 아래 설명된 바와 같이 수행된다.

[0534] 작업예 2,3에서 수득된 QD 잉크 및 비교예에서 수득된 QD 잉크를 각각 개별적으로 프린트 헤드의 각 노즐 플레이트 (Dimatix DMP-2831 머티리얼 프린터, Fuji film)에 떨어뜨린 후, 떨어뜨린 잉크를 클리닝 패드로 흡수시켜 제거한다. 노즐 플레이트 상의 표면의 청결도는 육안으로 관찰된다.

[0535] **결과**

[0536] QD 잉크(2, 3)는 노즐 플레이트 상에서 잘 반발된다. QD 잉크(2, 3)를 떨어뜨린 노즐 플레이트들의 표면들은 패드에 의한 클리닝 후에 매우 청결하다. 이는, 잉크젯 프린팅 동안, 막힘을 야기하지 않고, 잉크 제트 기계의 노즐 주위에 남아 있지 않고, 노즐의 표면 상에 또는 주위에 남아 있지 않고, 잉크 조성물, 특히 본 발명의 QD 잉크(2, 3)가 기판 상에 매끄럽게 잉크 젯팅될 수 있다는 것을 나타낸다.

[0537] **작업예 6**: 비극성 리간드(도데칸 티올(DDT))를 갖는 QD의 DLS 평가를 위한 샘플 제조

[0538] 헵탄에 분산된 mPEG350SH 및 InP계 코어-이중 쉘(ZnSe/ZnS) QD를 용매에 첨가하였다. 용매 중 QD 비율은 0.5w%이고 용매 비율은 98.3w%이다. DDT에 비한 mPEG350SH 중량비는 0 내지 91%이다. 용매는 헵탄, LA, HDDA 및 LA+HDDA이다.

[0539] **작업예 7**: 비극성 리간드(도데칸산)를 갖는 QD의 DLS 평가를 위한 샘플 제조

[0540] 헵탄에 분산된 mPEG350SH, (올레산) 및 QD (InP계 ZnSe/ZnS 이중 쉘)를 용매에 첨가하였다. 용매에서의 QD 비는 0.5w%이고 용매 비는 97.8w%이다. 도데칸산에 비한 mPEG350SH의 중량비는 0~103%이다. (올레산은 도데칸산에 비해 41w%이다) 용매는 헵탄, LA 및 LA+HDDA이다.

[0541] **작업예 8**: 극성 리간드(mPEG-SH)를 갖는 QD의 DLS 평가를 위한 샘플 제조

[0542] PGMEA에 분산된 DDT(또는 올레산) 및 QD를 용매에 첨가한다. 용매에서의 QD 비는 0.5w%이고 용매 비는 97.8w%이다. mPEG-SH에 비한 DDT의 중량비는 0 내지 107%이다. (mPEG-SH에 비한 올레산의 중량비는 55%이다.) 용매는 PGMEA, LA, HDDA 및 LA+HDDA이다.

[0543] **작업예 9**: 비극성 리간드를 갖는 QD, 극성 리간드를 갖는 QD, 용매의 한센 용해도 파라미터(HSP)의 계산

[0544] 분자에 대한 HSP(δD, δP, δh)는 HSPiP 소프트웨어(pirica.com)에 의해 계산된다.

[0545] 헵탄의 HSP는, 비극성 리간드에서 -SH, -COOH 부분이 QD 표면에 달라붙기 때문에 비극성 리간드를 갖는 QD를 위해 사용된다.

[0546] 폴리(에틸렌 글리콜) 디메틸 에테르의 HSP는, DDT에서의 -SH 부분이 QD 표면에서 붙기 때문에 극성 리간드를 갖는 QD를 위해 사용된다.

[0547] 혼합된 용매의 HSP는 하기의 첨가 법칙(additive rule)에 의해 결정된다.

[0548] **작업예 10**: mPEG 350SH를 갖는 DDT 리간드를 갖는 QD를 포함하는 적색 QD 잉크의 제조

[0549] DDT에 비한 mPEG350SH의 중량 비율은 91%이다

[0550]

조성	
InP계 코어-ZnSe/ZnS 이중 쉘 QD (리간드: C12SH)	34.31%
mPEG-SH(MW350)	5.12%
LA	47.32%
HDDA	11.83%
Omnirad819	0.93%
Irganox1010	0.48%
총	100.00%

[0551] **비교예 2** : DDT 리간드를 갖는 QD를 포함하는 적색 QD 잉크의 제조

[0552]

조성	
InP계 코어-ZnSe/ZnS 이중 쉘 QD (리간드: C12SH)	35.00%
LA	50.80%
HDDA	12.70%
Omnirad819	1.00%
Irganox1010	0.50%
총	100.00%

[0553] **작업예 11**: mPEG350SH를 갖는 도데칸산 리간드를 갖는 QD를 포함하는 적색 QD 잉크의 제조

[0554] 도데칸산에 비한 mPEG350SH의 중량비는 103%이다.

[0555]

조성	
InP계 코어-ZnSe/ZnS 이중 쉘 QD (도데칸산 리간드)	40.00%
mPEG-SH(MW350)	4.80%
LA	42.96%
HDDA	10.74%
Omnirad819	1.00%
Irganox1010	0.50%
총	100.00%

[0556] **비교예 3**: 도데칸산 리간드를 갖는 QD를 포함하는 적색 QD 잉크의 제조

조성	
InP계 코어-ZnSe 이중 쉘 QD (도데칸산 리간드)	40.00%
LA	46.80%
HDDA	11.70%
Omnirad819	1.00%
Irganox1010	0.50%
총	100.00%

[0557]

[0558] **작업예 12**: 올레산을 갖는 mPEG-SH 리간드를 갖는 QD를 포함하는 적색 QD 잉크의 제조

[0559] mPEG-SH 리간드에 비한 올레산(OA)의 중량비는 55%이다

조성	
InP계 코어-ZnSe 이중 쉘 QD (mPEG-SH 리간드)	40.00%
OA	4.80%
LA	10.74%
HDDA	42.96%
Omnirad819	1.00%
Irganox1010	0.50%
총	100.00%

[0560]

[0561] **결과**

[0562] 표 1은 작업예 6의 DLS 측정 결과를 나타낸다. 표 2는 작업예 7의 DLS 측정 결과를 나타낸다. 비극성 리간드 및 반응성 모노머를 갖는 QD를 포함하는 QD 잉크 용액에 극성 리간드를 첨가하는 것은 QD의 큐뮬런트(cumulant) 사이즈를 제어하여 QD의 작은 큐뮬런트 사이즈가 QD 응집을 보이지 않고 잘 분산되게 한다. QD 잉크 용액에 비극성 및 극성 리간드들을 둘 다 첨가하는 것은 또한 반응성 모노머에서 QD의 사이즈를 제어한다.

[0563] 표 1

DDT에 비한 mPEG350SH의 중량 비	QD의 큐뮬런트 사이즈 [nm]				
	헵탄	LA	LA/HDDA 90/10	LA/HDDA 80/20	LA/HDDA 70/30
0%	14	690	분산 없음	분산 없음	분산 없음
16%	16	15	95	961	분산 없음
33%	34	15	14	192	836
49%	54	15	-	14	469
66%	892	15	-	14	15
82%	>1000	15	-	14	14
91%	>1000	17	16	16	15

[0564]

QD의 큐뮬런트 사이즈 [nm]		
LA/HDDA 60/40	LA/HDDA 40/60	HDDA
분산 없음	분산 없음	분산 없음
분산 없음	분산 없음	분산 없음
분산 없음	분산 없음	분산 없음
분산 없음	분산 없음	분산 없음
518	분산 없음	분산 없음
263	분산 없음	분산 없음
254	820	462

[0565]

[0566] 표 2

도데칸산에 비한 mPEG350SH의 중량 비	QD의 큐뮬런트 사이즈 [nm]			
	헵탄	LA	LA/HDDA 90/10	LA/HDDA 80/20
0%	38	83	53	268
62%	분산 없음	25	25	22
103%	분산 없음	23	25	20
62% + 올레산 (41%)	분산 없음	21	22	18

[0567]

[0568] 표 3은 작업예 8의 DLS 측정의 결과를 나타낸다. 극성 리간드 & 반응성 모노머를 갖는 QD를 포함하는 QD 잉크 용액에 비극성 리간드를 첨가하는 것은 QD의 큐뮬런트 사이즈를 제어하여 QD의 작은 큐뮬런트 사이즈가 QD 응집을 보이지 않고 반응성 모노머에 잘 분산되게 한다.

[0569] 표 3

mPEGSH에 비한 DDT, 올레산 중량 비	QD의 큐뮬런트 사이즈 [nm]			
	PGMEA	HDDA	LA/HDDA 20/80	LA/HDDA 40/60
0%	12	19	951	분산 없음
17% (DDT)	13	24	17	428
32% (DDT)	13	21	14	17
70% (DDT)	11	108	13	13
107% (DDT)	160	625	13	-
55% (올레산)	12	15	18	459

[0570]

QD의 큐뮬런트 사이즈 [nm]		
LA/HDDA 60/40	LA/HDDA 80/20	LA
분산 없음	분산 없음	분산 없음
분산 없음	분산 없음	분산 없음
525	분산 없음	분산 없음
15	28	229
-	16	207
분산 없음	분산 없음	분산 없음

[0571]

[0572] 표 4는 예 8의 HSP 계산의 결과를 보여준다. δD는 분산력이다. δP는 극력(polar forces)이다. δh는 수소 결합력(hydrogen bond forces)이다. 극성 리간드와 비극성 리간드를 혼합하는 것은 HSP를 반응성 모노머의 것에 가깝게 제어할 수 있다. QD와 반응성 모노머 사이의 가까운 HSP는 잘 분산된 샘플을 위해 필요하다.

[0573] 표 4

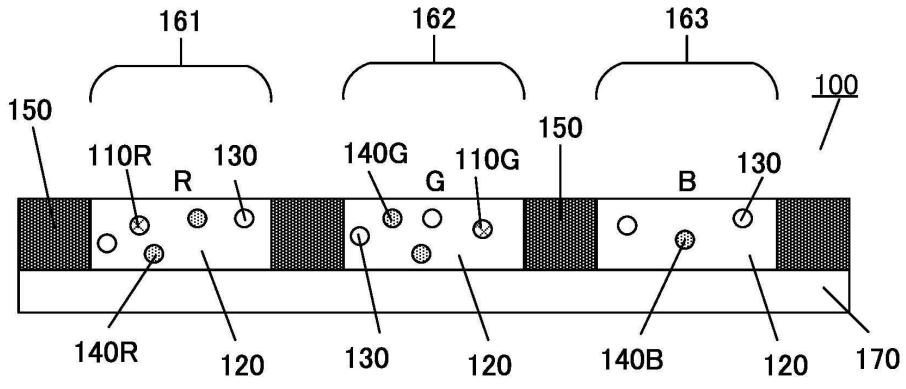
	δD	δP	δH
비극성 리간드 (헵탄)	15.3	0	0
극성 리간드 (폴리(에틸렌 글리콜)디메틸 에테르)	16.0	5.6	7.1
(비극성 리간드)/(극성 리간드) 50/50	15.7	2.8	3.6
LA	16.0	2.4	3.2
HDDA	16.3	3.9	5.1
PGMEA	15.6	5.6	9.8
LA/HDDA 80/20	16.1	2.7	3.5
LA/HDDA 20/80	16.3	3.6	4.7

[0574]

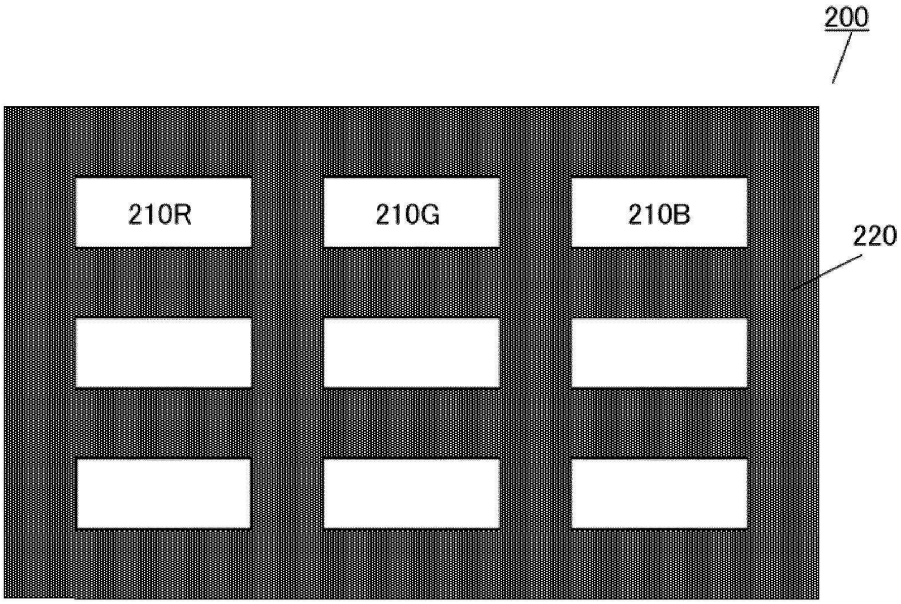
[0575] 작업예 10, 11, 12의 적색 QD 잉크는 비교예 2, 3에 비해 우수한 분산성을 보인다.

도면

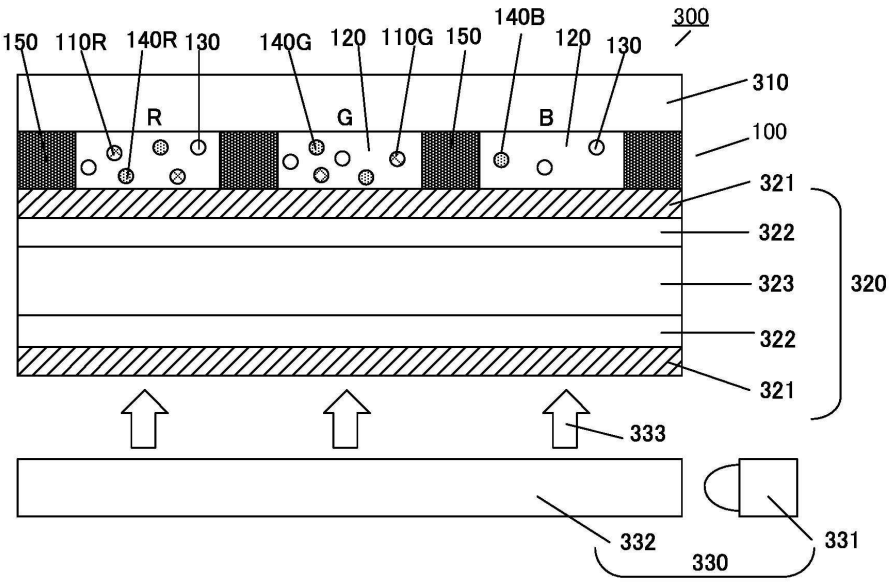
도면1



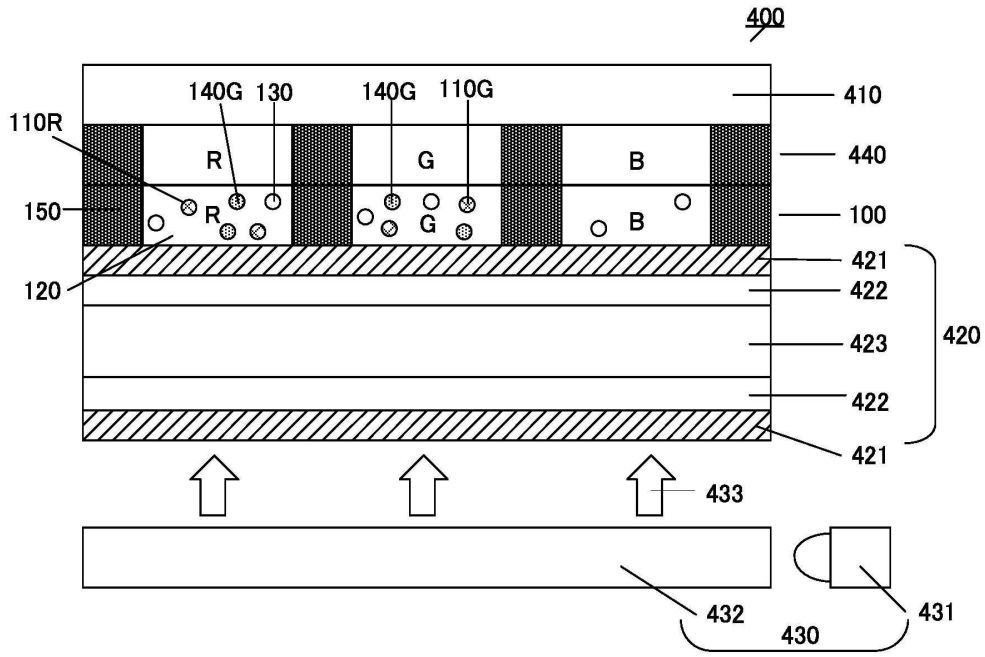
도면2


200
210R
210G
210B
220

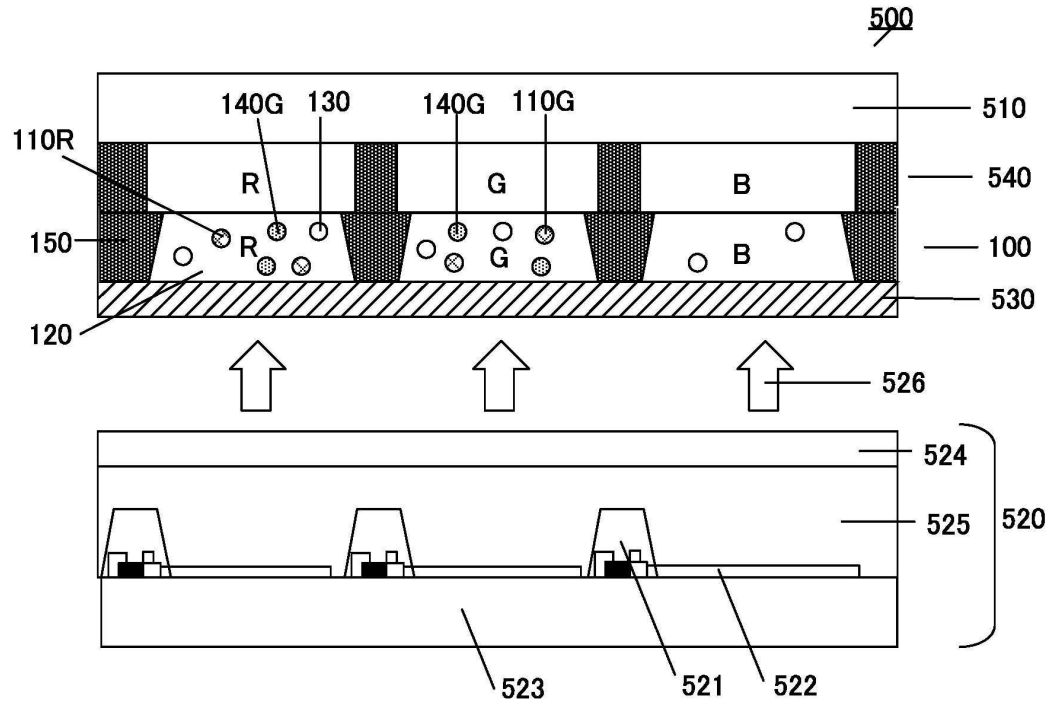
도면3


150
110R
140R
130
140G
120
110G
150
140B
120
130
300
310
100
321
322
323
320
322
321
333
332
330
331
R
G
B

도면4


400
140G
130
140G
110G
410
110R
R
G
B
440
150
R
G
B
100
421
120
422
423
420
422
421
433
432
431
430

도면5


500
140G
130
140G
110G
510
110R
R
G
B
540
150
R
G
B
100
530
120
526
524
525
520
523
521
522