

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】令和3年4月22日(2021.4.22)

【公表番号】特表2020-515558(P2020-515558A)

【公表日】令和2年5月28日(2020.5.28)

【年通号数】公開・登録公報2020-021

【出願番号】特願2019-552897(P2019-552897)

【国際特許分類】

C 07 D 233/90	(2006.01)
H 01 M 4/13	(2010.01)
H 01 M 4/62	(2006.01)
H 01 M 4/02	(2006.01)
H 01 M 10/0568	(2010.01)
H 01 M 10/0565	(2010.01)
H 01 M 10/052	(2010.01)
H 01 M 10/36	(2010.01)
H 01 M 10/054	(2010.01)
H 01 M 6/16	(2006.01)
H 01 M 6/18	(2006.01)
H 01 M 6/04	(2006.01)
H 01 G 11/30	(2013.01)
H 01 G 11/64	(2013.01)
C 07 D 403/04	(2006.01)
C 07 C 311/51	(2006.01)
C 07 F 1/02	(2006.01)

【F I】

C 07 D 233/90	C S P B
H 01 M 4/13	
H 01 M 4/62	Z
H 01 M 4/02	A
H 01 M 10/0568	
H 01 M 10/0565	
H 01 M 10/052	
H 01 M 10/36	A
H 01 M 10/36	Z
H 01 M 10/054	
H 01 M 4/02	Z
H 01 M 6/16	A
H 01 M 6/18	E
H 01 M 6/16	Z
H 01 M 6/04	
H 01 G 11/30	
H 01 G 11/64	
C 07 D 403/04	
C 07 C 311/51	
C 07 F 1/02	

【手続補正書】

【提出日】令和3年3月10日(2021.3.10)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

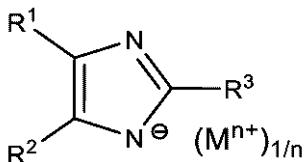
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

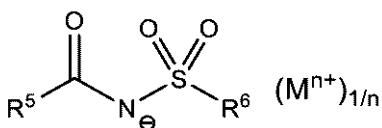
【請求項1】

式IからV:

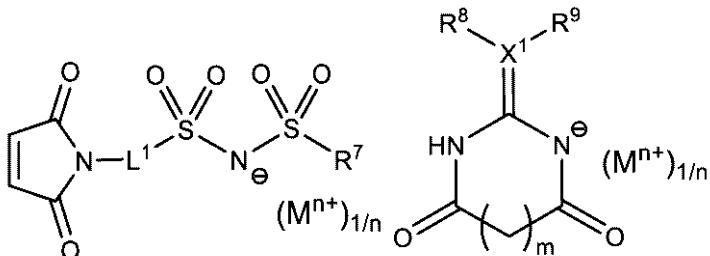
【化44】



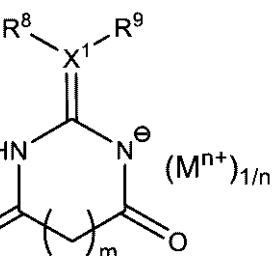
式 I



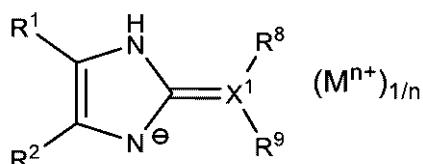
式 II



式 III



式 IV



式 V

[式中、

R¹およびR²は、独立して、H、F、CN、NO₂、必要に応じて置換されているアルキルから選択され、好ましくはCNであり、

R³は、NH₂SO₂R⁴、NH₂SO₂OR⁴、SO₂NHSO₂R⁴、SO₂NHSO₂OR⁴、または必要に応じて置換されている複素環から選択され、

R⁴は、フッ素、必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキル、および必要に応じて置換されているC₆アリールから選択され、

R⁵は、必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルおよび必要に応じて置換されるC₆アリールから選択され、

R⁶は、必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルおよび必要に応じて置換されるC₆アリールから選択され、

R⁷は、フッ素原子および必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルから選択され、L¹は、共有結合、または必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルおよび必要に応じて置換されているC₆アリールから選択されるリンカーであり、

式IVまたはVにおいてX¹は、炭素または窒素原子であり、

式IVまたはVにおいてX¹が炭素原子であるとき、R⁸およびR⁹は、それぞれ独立してF、CN、もしくは必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルであるか、または

式 I V または V において X¹ が窒素原子であるとき、 R⁸ は存在せず、かつ R⁹ は必要に応じて置換されている S O₂ アルキルもしくは必要に応じて置換されている C₁ ~ ₆ アルキルであるか、または

式 V において R⁸ および R⁹ は存在せず、 X¹ は酸素原子であり、 m は、 0 または 1 から選択される整数であり、

(Mⁿ⁺)₁ / _n は金属カチオンであり、 M は金属でありかつ n は 1 または 2 であり、例えば M は、アルカリ金属、アルカリ土類金属であり、例えば M は、 L i 、 N a 、もしくは K であるか、または M は L i でありかつ n は 1 である] のいずれか 1 つで定義される化合物またはその互変異性体。

【請求項 2】

R³ が N H S O₂ R⁴ 、 N H S O₂ O R⁴ または複素環である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

R⁴ が、フッ素およびアルコキシのうちの少なくとも 1 つで置換されている C₁ ~ ₆ アルキル、または少なくとも 1 個のフッ素原子で置換されている C₆ アリールである、請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

R¹ および R² のうちの少なくとも 1 つが C N である、請求項 1 から 3 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 5】

R¹ および R² の両方が C N である、請求項 4 に記載の化合物。

【請求項 6】

R⁵ が、非置換 C₁ ~ ₆ アルキル基またはフッ素化 C₁ ~ ₆ アルキル基である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 7】

R⁶ が、フッ素化 C₁ ~ ₆ アルキル基またはフッ素化 C₆ アリール基である、請求項 1 または 6 に記載の化合物。

【請求項 8】

R⁷ がフッ素原子であるか、またはフッ素置換 C₁ ~ ₆ アルキル基から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 9】

L¹ が共有結合または必要に応じて置換されている C₆ アリール基から選択されるリンカーである、請求項 1 または 8 に記載の化合物。

【請求項 10】

X¹ が炭素原子である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 11】

R⁸ および R⁹ のうちの少なくとも 1 つが、 C N または必要に応じて置換されている C₁ ~ ₆ アルキルである、請求項 10 に記載の化合物。

【請求項 12】

R⁸ および R⁹ が共に、 C N または必要に応じて置換されている C₁ ~ ₆ アルキルである、請求項 10 または 11 に記載の化合物。

【請求項 13】

R⁸ および R⁹ が共に C N であるか、または共にフッ素置換 C₁ ~ ₆ アルキルである、請求項 10 または 11 に記載の化合物。

【請求項 14】

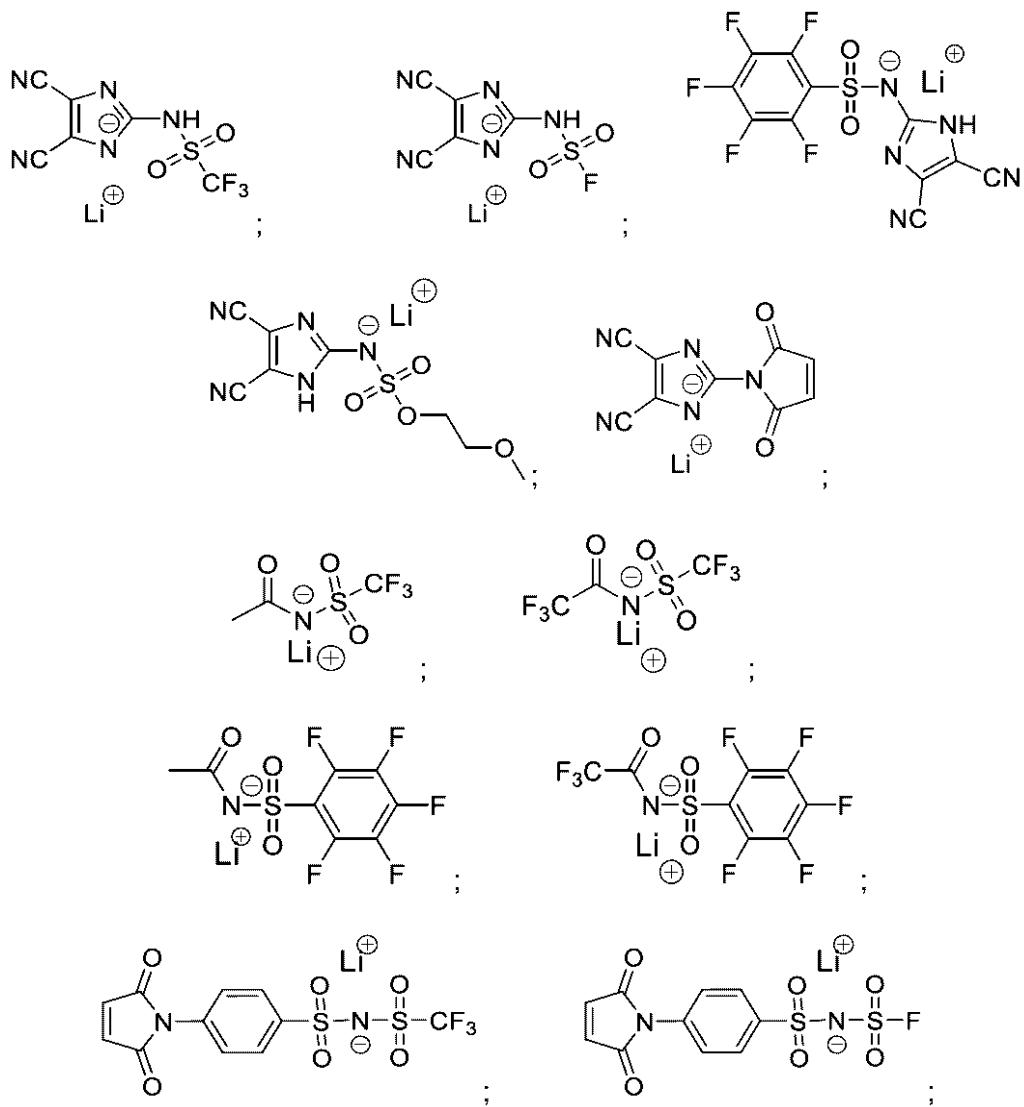
X¹ が窒素原子であり、好ましくは R⁹ が、フッ素置換 S O₂ アルキル（例えば、 S O₂ C F₃ ）である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 15】

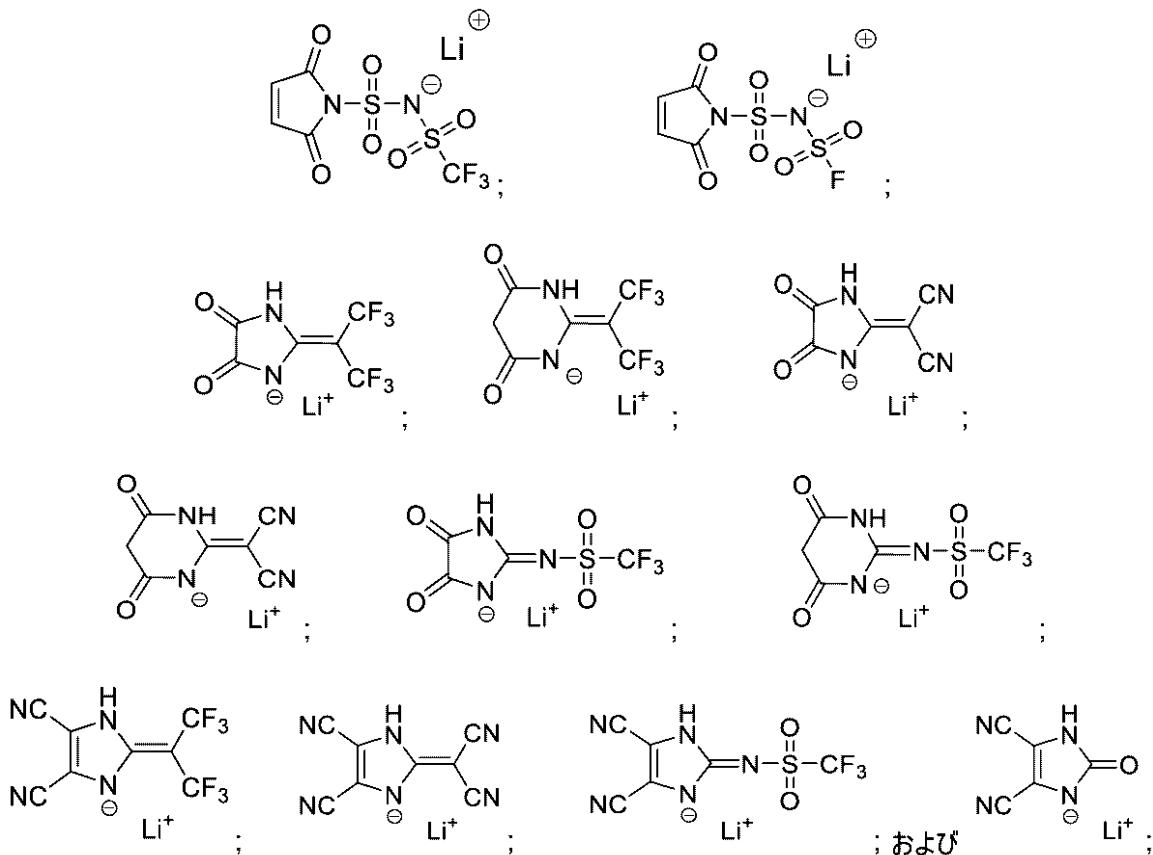
M が L i であり、 n が 1 である、請求項 1 から 14 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 16】

前記化合物が
【化 4 5 - 1】



【化45-2】



から選択される、請求項1に記載の化合物またはその互変異性体。

【請求項17】

添加剤としての請求項1から16のいずれか一項に記載の化合物と、少なくとも1種の電気化学的に活性な材料とを含む、電極材料。

【請求項18】

請求項1から16のいずれか一項に記載の化合物と一緒に、相溶性の溶媒（例えば、有機または水性溶媒）または相溶性の溶媒和ポリマーを含む、電解質組成物。

【請求項19】

電解質、電極、および対電極であって、前記電極または対電極のうちの少なくとも1つが、請求項17に記載の電極材料を含む、電解質、電極、および対電極、または

請求項18に記載の電解質、電極、および対電極を含む、電気化学セル。

【請求項20】

前記電気化学セルが、バッテリ、エレクトロクロミックデバイス、またはキャパシタであり、好ましくは前記バッテリが、リチウムまたはリチウムイオンバッテリである、請求項19に記載の電気化学セル。

【請求項21】

請求項19または20に記載の電気化学セルの、電気自動車もしくはハイブリッド車における、またはユビキタスITデバイスにおける使用。

【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0078

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0078】

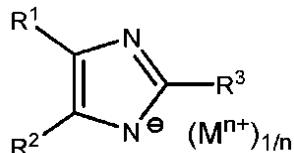
数多くの変更を、本発明の範囲から逸脱することなく上述の実施形態のいずれかに行うことができる。本出願で言及される任意の参考文献、特許、または科学文献の文書は、全ての目的でそれらの全体が参照により本明細書に組み込まれる。

特定の実施形態では、例えば以下の項目が提供される。

(項目1)

式I:

【化33】



式I

[式中、

R¹およびR²は、独立して、H、F、CN、NO₂、必要に応じて置換されているアルキルから選択され、好ましくはCNであり、

R³は、NH₂SO₂R⁴、NH₂SO₂OR⁴、SO₂NH₂SO₂R⁴、SO₂NH₂SO₂OR⁴、または必要に応じて置換されている複素環から選択され、

R⁴は、フッ素、必要に応じて置換されているC_{1~6}アルキル、および必要に応じて置換されているC₆アリールから選択され、

(Mⁿ⁺)_{1/n}は金属カチオンであり、Mは金属でありかつnは1または2であり、例えばMは、アルカリ金属、アルカリ土類金属であり、例えばMは、Li、Na、もしくはKであるか、またはMはLiでありかつnは1である]で定義される化合物またはその互変異性体。

(項目2)

R³がNH₂SO₂R⁴である、項目1に記載の化合物。

(項目3)

R³がNH₂SO₂OR⁴である、項目1に記載の化合物。

(項目4)

R⁴が、フッ素およびアルコキシのうちの少なくとも1つで置換されているC_{1~6}アルキルである、項目2または3に記載の化合物。

(項目5)

R⁴が、少なくとも1個のフッ素原子で置換されているC₆アリールである、項目2または3に記載の化合物。

(項目6)

R³が複素環である、項目1に記載の化合物。

(項目7)

R¹およびR²のうちの少なくとも1つがCNである、項目1から6のいずれか一項に記載の化合物。

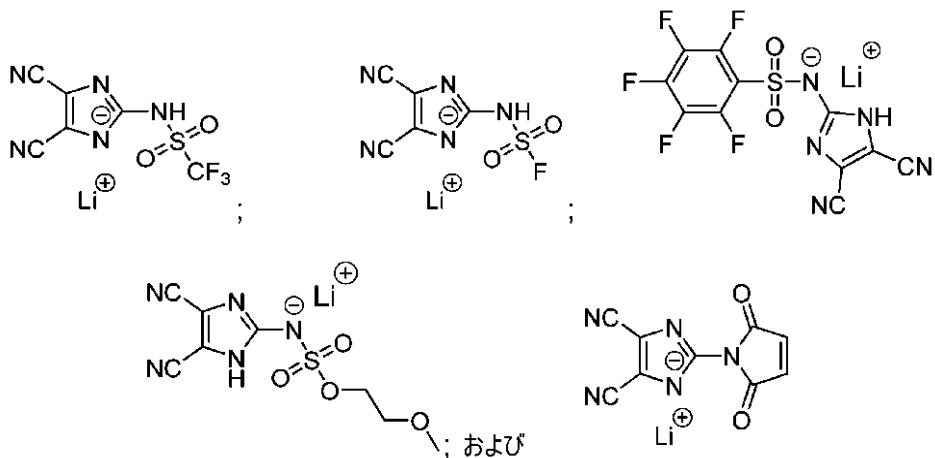
(項目8)

R¹およびR²の両方がCNである、項目7に記載の化合物。

(項目9)

前記化合物が

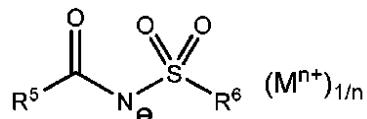
【化34】

から選択される、項目1に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目10)

式II:

【化35】



式II

[式中、

 R^5 は、必要に応じて置換されている $\text{C}_{1\sim6}$ アルキルおよび必要に応じて置換されている C_6 アリールから選択され、 R^6 は、必要に応じて置換されている $\text{C}_{1\sim6}$ アルキルおよび必要に応じて置換されている C_6 アリールから選択され、 $(\text{M}^{n+})_{1/n}$ は金属カチオンであり、 M は金属でありかつ n は1または2であり、例えば M は、アルカリ金属、アルカリ土類金属であり、例えば M は、 Li 、 Na 、もしくは K であるか、または M は Li でありかつ n は1である]で定義される化合物またはその互変異性体。

(項目11)

 R^5 が、非置換 $\text{C}_{1\sim6}$ アルキル基である、項目10に記載の化合物。

(項目12)

 R^5 が、フッ素化 $\text{C}_{1\sim6}$ アルキル基である、項目10に記載の化合物。

(項目13)

 R^6 が、フッ素化 $\text{C}_{1\sim6}$ アルキル基である、項目10から12のいずれか一項に記載の化合物。

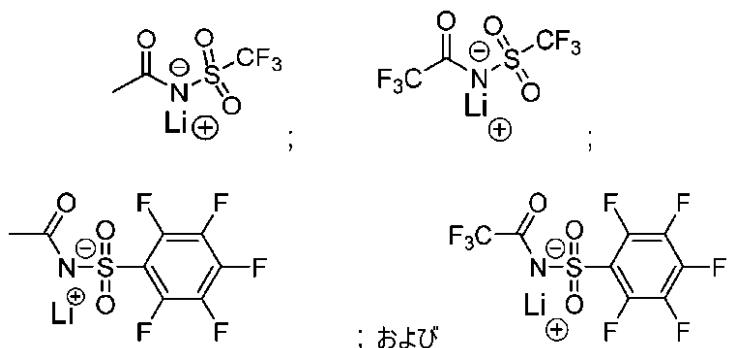
(項目14)

 R^6 が、フッ素化 C_6 アリール基である、項目10から12のいずれか一項に記載の化合物。

(項目15)

前記化合物が

【化36】

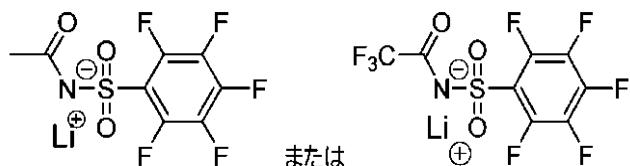


から選択される、項目10に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目16)

前記化合物が

【化37】

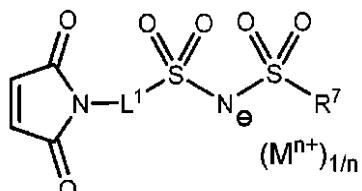


から選択される、項目15に記載の化合物。

(項目17)

式III：

【化38】



式 III

[式中、

R⁷は、フッ素原子および必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルから選択され、L¹は、共有結合、または必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルおよび必要に応じて置換されているC₆アリールから選択されるリンカーであり、

(Mⁿ⁺)_{1/n}は金属カチオンであり、Mは金属でありかつnは1または2であり、例えばMは、アルカリ金属、アルカリ土類金属であり、例えばMは、Li、Na、もしくはKであるか、またはMはL¹でありかつnは1である]

で定義される化合物またはその互変異性体。

(項目18)

R⁷がフッ素原子である、項目17に記載の化合物。

(項目19)

R⁷が、フッ素置換C_{1～6}アルキル基から選択される、項目17に記載の化合物。

(項目20)

L¹が共有結合である、項目17から19のいずれか一項に記載の化合物。

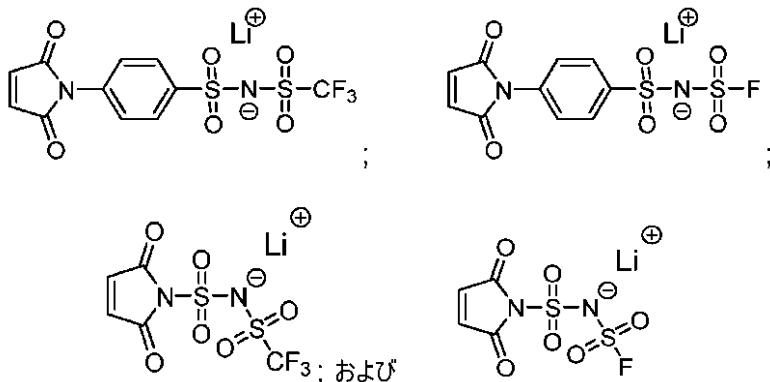
(項目21)

L¹ が、必要に応じて置換されている C₆ アリール基から選択されるリンカーである、項目 17 から 19 のいずれか一項に記載の化合物。

(項目 22)

前記化合物が

【化 39】

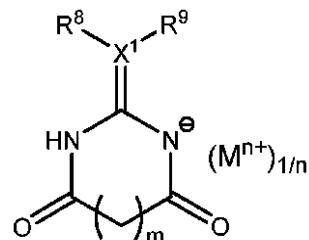


から選択される、項目 17 に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目 23)

式 IV :

【化 40】



式 IV

[式中、

X¹ は、炭素または窒素原子であり、

X¹ が炭素原子であるとき、R⁸ および R⁹ は、それぞれ独立して F、CN、もしくは必要に応じて置換されている C_{1～6} アルキルであるか、または

X¹ が窒素原子であるとき、R⁸ は存在せず、かつ R⁹ は必要に応じて置換されている SO₂ アルキルもしくは必要に応じて置換されている C_{1～6} アルキルであり、

(Mⁿ⁺)_{1/n} は金属カチオンであり、M は金属でありかつ n は 1 または 2 であり、例えば M は、アルカリ金属、アルカリ土類金属であり、例えば M は、Li、Na、もしくは K であるか、または M は Li でありかつ n は 1 であり、

m は、0 または 1 から選択される整数である]

で定義される化合物またはその互変異性体。

(項目 24)

X¹ が炭素原子である、項目 23 に記載の化合物。

(項目 25)

R⁸ および R⁹ のうちの少なくとも 1 つが、CN または必要に応じて置換されている C_{1～6} アルキルである、項目 24 に記載の化合物。

(項目 26)

R⁸ および R⁹ が共に、CN または必要に応じて置換されている C_{1～6} アルキルである、項目 24 または 25 に記載の化合物。

(項目27)

R⁸およびR⁹が共にCNである、項目24または25に記載の化合物。

(項目28)

R⁸およびR⁹が共に、フッ素置換C_{1~6}アルキルである、項目24または25に記載の化合物。

(項目29)

X¹が窒素原子である、項目23に記載の化合物。

(項目30)

R⁹が、フッ素置換SO₂アルキル(例えば、SO₂CF₃)である、項目29に記載の化合物。

(項目31)

mが0である、項目23から30のいずれか一項に記載の化合物。

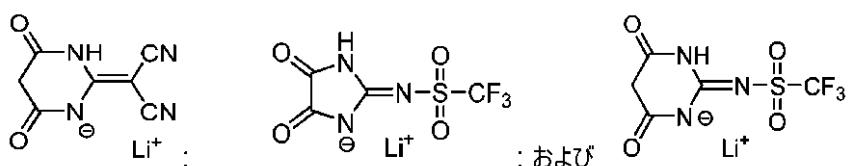
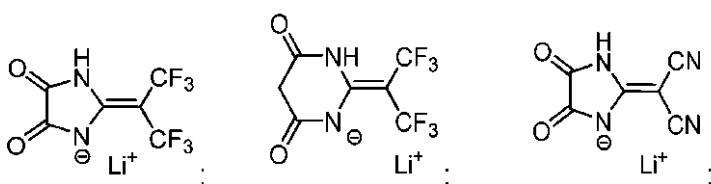
(項目32)

mが1である、項目23から30のいずれか一項に記載の化合物。

(項目33)

前記化合物が

【化41】

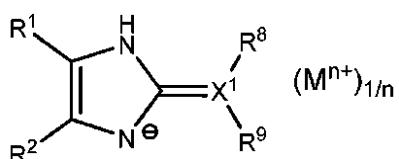


から選択される、項目23に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目34)

式V:

【化42】



式V

[式中、R¹、R²、R⁸、R⁹、X¹、M、およびnは、先に定義された通りであるか、またはR⁸およびR⁹は存在せず、X¹は酸素原子である]

で定義される化合物またはその互変異性体。

(項目35)

R¹およびR²のうちの少なくとも1つがCNである、項目34に記載の化合物。

(項目36)

R¹およびR²の両方がCNである、項目35に記載の化合物。

(項目37)

X¹が炭素原子である、項目34から36のいずれか一項に記載の化合物。

(項目38)

R⁸およびR⁹のうちの少なくとも1つが、CNまたは必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルである、項目37に記載の化合物。

(項目39)

R⁸およびR⁹が共に、CNまたは必要に応じて置換されているC_{1～6}アルキルである、項目37に記載の化合物。

(項目40)

R⁸およびR⁹が共にCNである、項目37に記載の化合物。

(項目41)

R⁸およびR⁹が共にフッ素置換C_{1～6}アルキルである、項目37に記載の化合物。

(項目42)

X¹が窒素原子である、項目34から36のいずれか一項に記載の化合物。

(項目43)

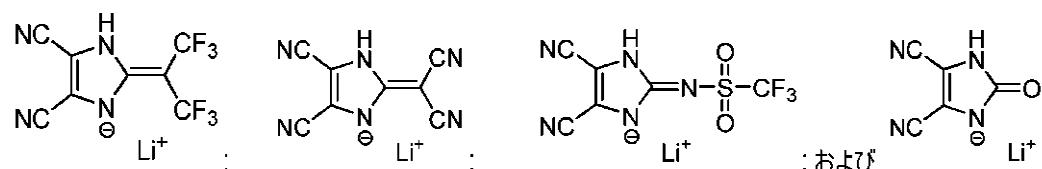
R⁹が、フッ素置換SO₂アルキル（例えば、SO₂CF₃）である、項目42に記載の化合物。

(項目44)

MがLiであり、nが1である、項目1から43のいずれか一項に記載の化合物。

(項目45)

前記化合物が

【化43】

から選択される、項目34に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目46)

添加剤としての項目1から45のいずれか一項に記載の化合物と、少なくとも1種の電気化学的に活性な材料とを含む、電極材料。

(項目47)

項目1から45のいずれか一項に記載の化合物を含む、電解質組成物。

(項目48)

相溶性の溶媒をさらに含む、項目47に記載の電解質組成物。

(項目49)

前記相溶性の溶媒が有機溶媒である、項目48に記載の電解質組成物。

(項目50)

前記相溶性の溶媒が水性溶媒である、項目48に記載の電解質組成物。

(項目51)

相溶性の溶媒和ポリマーをさらに含む、項目47に記載の電解質組成物。

(項目52)

電解質、電極、および対電極を含む電気化学セルであって、前記電極または対電極のうちの少なくとも1つが、項目46に記載の電極材料を含む、電気化学セル。

(項目53)

項目47から51のいずれか一項に記載の電解質、電極、および対電極を含む、電気化学セル。

(項目54)

前記電気化学セルが、バッテリ、エレクトロクロミックデバイス、またはキャパシタである、項目52または53に記載の電気化学セル。

(項目55)

前記バッテリが、リチウムまたはリチウムイオンバッテリである、項目54に記載の電気化学セル。

(項目56)

項目52から55のいずれか一項に記載の電気化学セルの、電気自動車もしくはハイブリッド車における、またはユビキタスＩＴデバイスにおける使用。