

【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 0 7 D	233/90	(2006.01)
H 0 1 M	4/13	(2010.01)
H 0 1 M	4/62	(2006.01)
H 0 1 M	4/02	(2006.01)
H 0 1 M	10/0568	(2010.01)
H 0 1 M	10/0565	(2010.01)
H 0 1 M	10/052	(2010.01)
H 0 1 M	10/36	(2010.01)
H 0 1 M	10/054	(2010.01)
H 0 1 M	6/16	(2006.01)
H 0 1 M	6/18	(2006.01)
H 0 1 M	6/04	(2006.01)
H 0 1 G	11/30	(2013.01)
H 0 1 G	11/64	(2013.01)
C 0 7 D	403/04	(2006.01)
C 0 7 C	311/51	(2006.01)
C 0 7 F	1/02	(2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D	233/90	C S P B
H 0 1 M	4/13	
H 0 1 M	4/62	Z
H 0 1 M	4/02	A
H 0 1 M	10/0568	
H 0 1 M	10/0565	
H 0 1 M	10/052	
H 0 1 M	10/36	A
H 0 1 M	10/36	Z
H 0 1 M	10/054	
H 0 1 M	4/02	Z
H 0 1 M	6/16	A
H 0 1 M	6/18	E
H 0 1 M	6/16	Z
H 0 1 M	6/04	
H 0 1 G	11/30	
H 0 1 G	11/64	
C 0 7 D	403/04	
C 0 7 C	311/51	
C 0 7 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

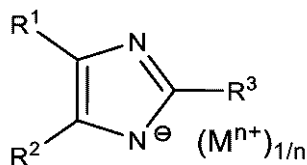
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

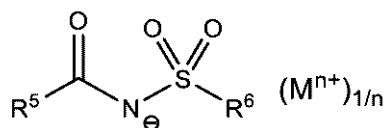
【請求項１】

式ⅠからⅤ：

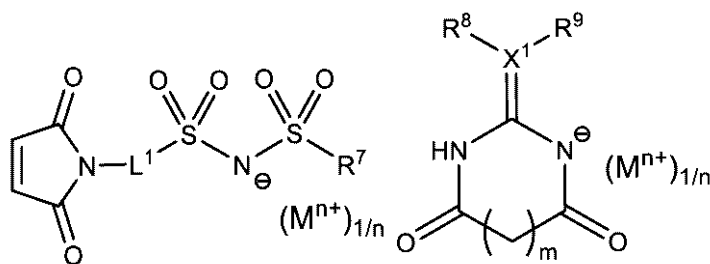
【化４４】



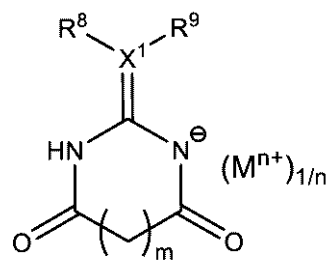
式Ⅰ



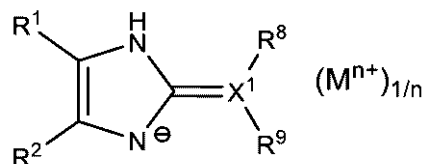
式Ⅱ



式Ⅲ



式Ⅳ



式Ⅴ

[式中、

R^1 および R^2 は、独立して、 H 、 F 、 CN 、 NO_2 、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、

R^3 は、 $NHSO_2R^4$ 、 $NHSO_2OR^4$ 、 $SO_2NHSO_2R^4$ 、 $SO_2NHSO_2OR^4$ 、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、

R^4 は、フッ素、必要に応じて置換されている $C_1 \sim 6$ 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^5 は、必要に応じて置換されている $C_1 \sim 6$ 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 $C_1 \sim 6$ 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^7 は、フッ素原子および必要に応じて置換されている $C_1 \sim 6$ アルキルから選択され、

L^1 は、共有結合、または必要に応じて置換されている $C_1 \sim 6$ 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るリンカーであり、

式ⅠⅤまたはⅤにおいて X^1 は、炭素または窒素原子であり、

式ⅠⅤまたはⅤにおいて X^1 が炭素原子であるとき、 R^8 および R^9 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 $C_1 \sim 6$ アルキルであるか、または

式 I V または V において X^1 が窒素原子であるとき、 R^8 は存在せず、かつ R^9 は必要に応じて置換されている SO_2 アルキルもしくは必要に応じて置換されている C_{1-6} アルキルであるか、または

式 V において R^8 および R^9 は存在せず、 X^1 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、

$(M^{n+})_{1/n}$ 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]

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】

R^3 が $NHSO_2R^4$ 、 $NHSO_2OR^4$ または複素環である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

R^4 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、または少なくとも 1 個のフッ素原子で置換されている C_6 アリールである、請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

R^1 および R^2 のうちの少なくとも 1 つが CN 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】

R^1 および R^2 の両方が CN である、請求項 4 に記載の化合物。

【請求項 6】

R^5 が、非置換 C_{1-6} アルキル基またはフッ素化 C_{1-6} アルキル基である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 7】

R^6 が、フッ素化 C_{1-6} アルキル基またはフッ素化 C_6 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】

R^7 がフッ素原子であるか、またはフッ素置換 C_{1-6} 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】

L^1 が共有結合または必要に応じて置換されている C_6 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】

X^1 が炭素原子である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 11】

R^8 および R^9 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、請求項 10 に記載の化合物。

【請求項 12】

R^8 および R^9 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、請求項 10 または 11 に記載の化合物。

【請求項 13】

R^8 および R^9 が共に CN であるか、または共にフッ素置換 C_{1-6} 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】

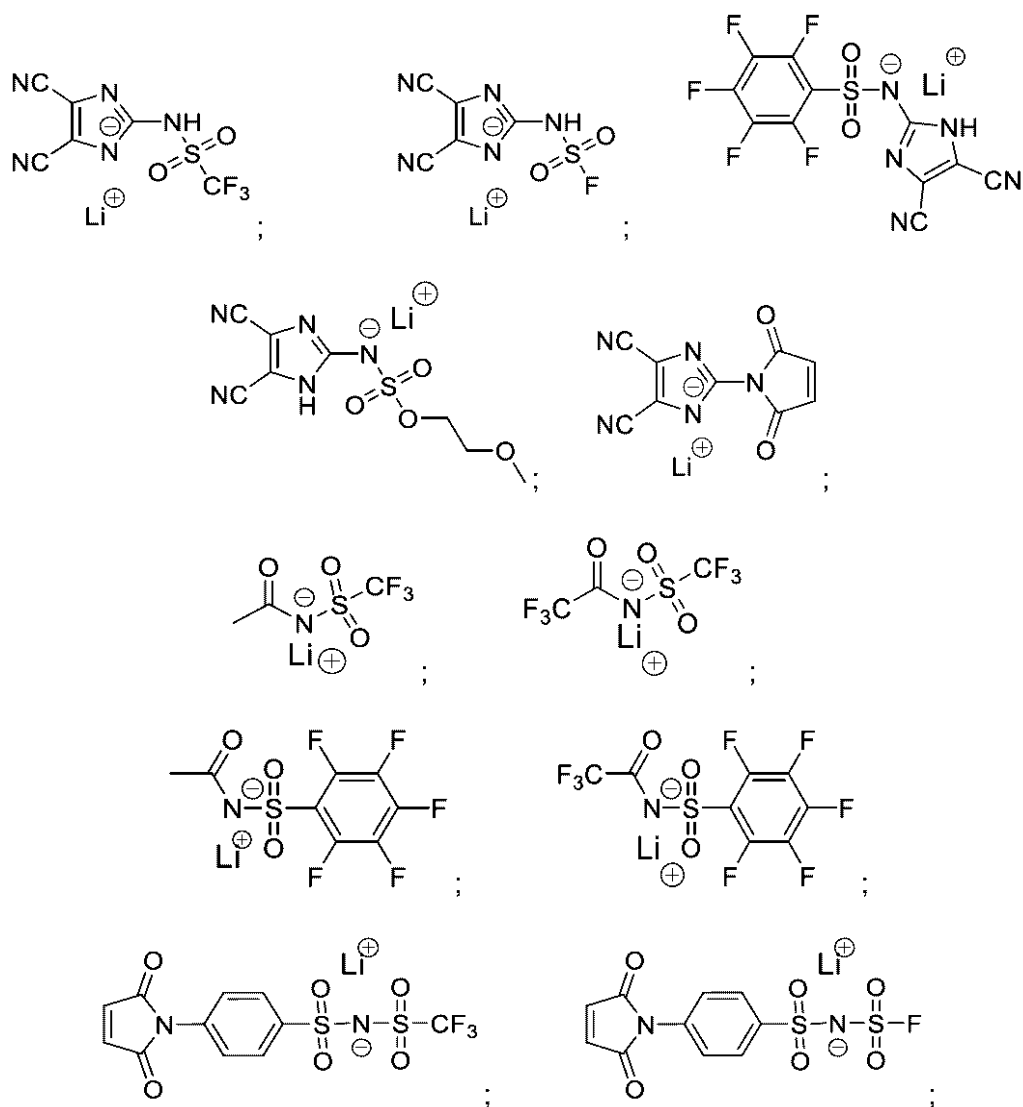
X^1 が窒素原子であり、好ましくは R^9 が、フッ素置換 SO_2 アルキル (例えば、 SO_2CF_3) である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 15】

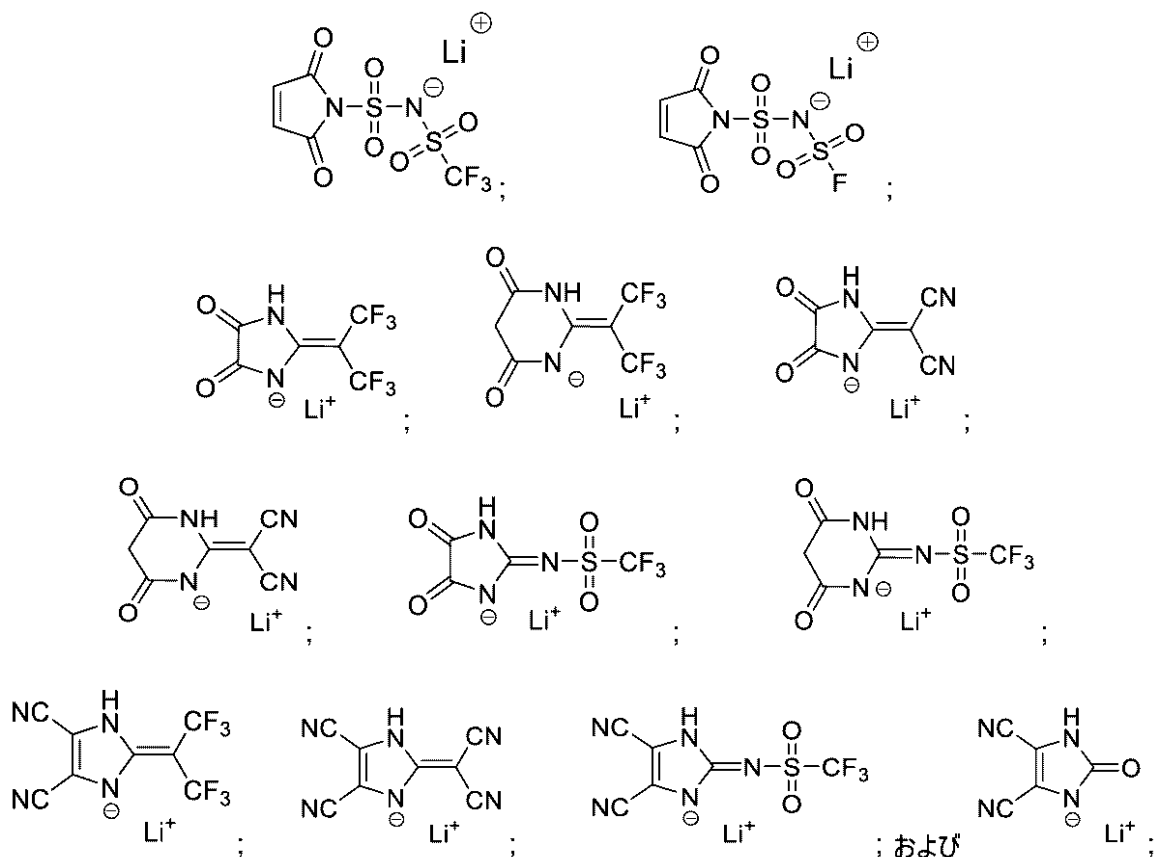
M が Li であり、 n が 1 である、請求項 1 から 14 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 16】

前記化合物が
【化 45 - 1】



【化 4 5 - 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 1 7】

添加剤としての請求項 1 から 1 6 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 1 8】

請求項 1 から 1 6 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 1 9】

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 1 7 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 1 8 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 2 0】

前記電気化学セルが、バッテリー、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ーが、リチウムまたはリチウムイオンバッテリーである、請求項 1 9 に記載の電気化学セル。

【請求項 2 1】

請求項 1 9 または 2 0 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】0 0 7 8

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 0 7 8 】

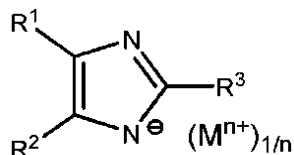
数多くの変更を、本発明の範囲から逸脱することなく上述の実施形態のいずれかに行うことができる。本出願で言及される任意の参考文献、特許、または科学文献の文書は、全ての目的でそれらの全体が参照により本明細書に組み込まれる。

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 3 3 】



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C₁ - 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C₁ - 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。

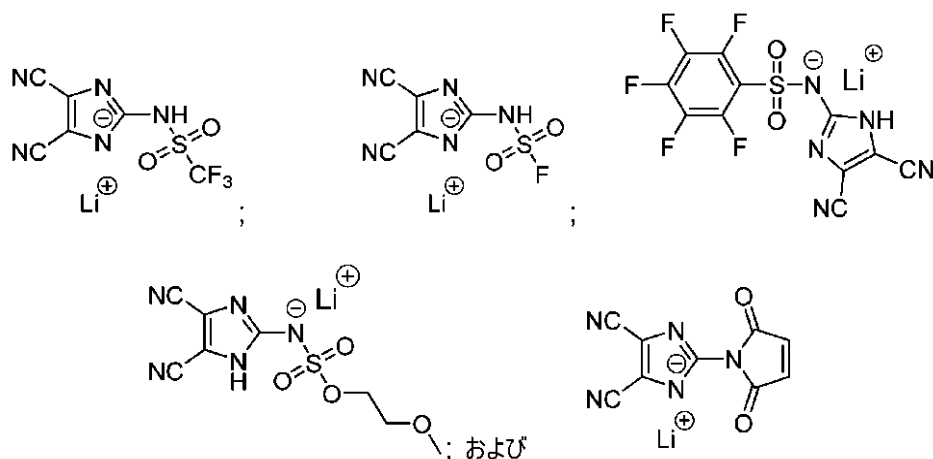
(項目 8)

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 3 4】

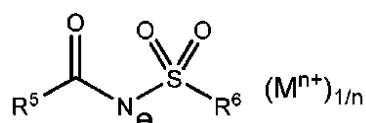


から選択される、項目 1 に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目 1 0)

式 I I :

【化 3 5】



式 II

[式中、

R^5 は、必要に応じて置換されている $C_1 \sim 6$ 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 $C_1 \sim 6$ 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、

$(M^{n+})_{1/n}$ 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 1 1)

R^5 が、非置換 $C_1 \sim 6$ アルキル基である、項目 1 0 に記載の化合物。

(項目 1 2)

R^5 が、フッ素化 $C_1 \sim 6$ アルキル基である、項目 1 0 に記載の化合物。

(項目 1 3)

R^6 が、フッ素化 $C_1 \sim 6$ アルキル基である、項目 1 0 から 1 2 のいずれか一項に記載の化合物。

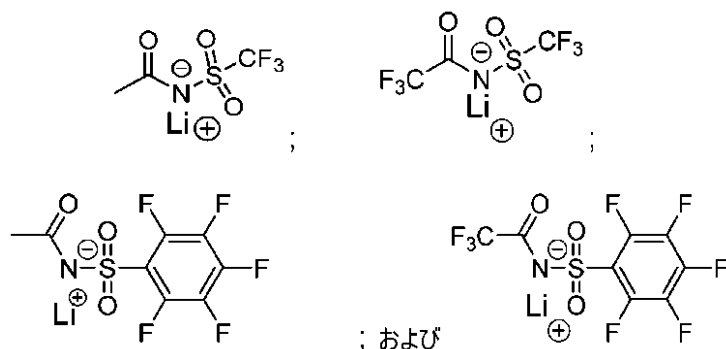
(項目 1 4)

R^6 が、フッ素化 C_6 アリール基である、項目 1 0 から 1 2 のいずれか一項に記載の化合物。

(項目 1 5)

前記化合物が

【化 3 6】

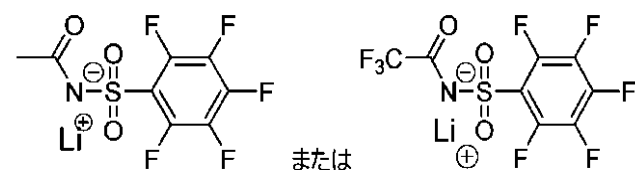


から選択される、項目 1 0 に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目 1 6)

前記化合物が

【化 3 7】

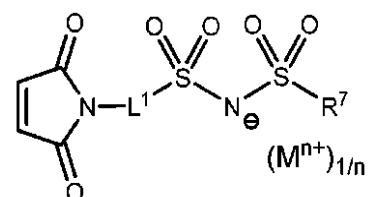


から選択される、項目 1 5 に記載の化合物。

(項目 1 7)

式 I I I :

【化 3 8】



式 III

[式中、

R^7 は、フッ素原子および必要に応じて置換されている $C_{1 \sim 6}$ アルキルから選択され、

L^1 は、共有結合、または必要に応じて置換されている $C_{1 \sim 6}$ 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るリンカーであり、

$(M^{n+})_{1/n}$ 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 1 8)

R^7 がフッ素原子である、項目 1 7 に記載の化合物。

(項目 1 9)

R^7 が、フッ素置換 $C_{1 \sim 6}$ アルキル基から選択される、項目 1 7 に記載の化合物。

(項目 2 0)

L^1 が共有結合である、項目 1 7 から 1 9 のいずれか一項に記載の化合物。

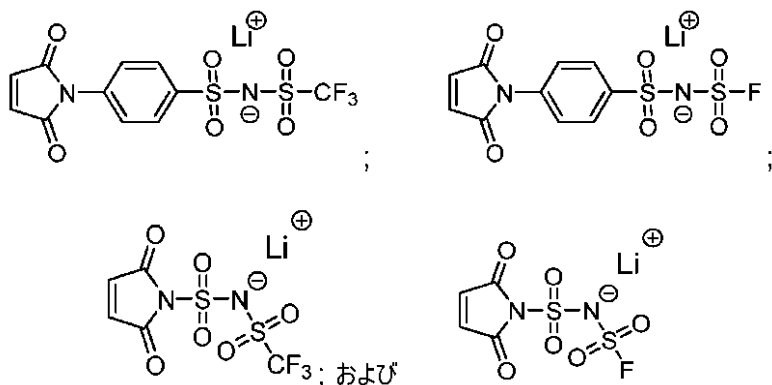
(項目 2 1)

L^1 が、必要に応じて置換されている C_6 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】

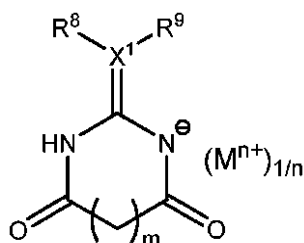


から選択される、項目 17 に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目 23)

式 I V :

【化 40】



式 IV

[式中、

X^1 は、炭素または窒素原子であり、

X^1 が炭素原子であるとき、 R^8 および R^9 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

X^1 が窒素原子であるとき、 R^8 は存在せず、かつ R^9 は必要に応じて置換されている SO_2 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、

$(M^{n+})_{1/n}$ 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)

X^1 が炭素原子である、項目 23 に記載の化合物。

(項目 25)

R^8 および R^9 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)

R^8 および R^9 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)

R^8 および R^9 が共に CN である、項目 24 または 25 に記載の化合物。

(項目 28)

R^8 および R^9 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)

X^1 が窒素原子である、項目 23 に記載の化合物。

(項目 30)

R^9 が、フッ素置換 SO_2 アルキル (例えば、 SO_2CF_3) 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。

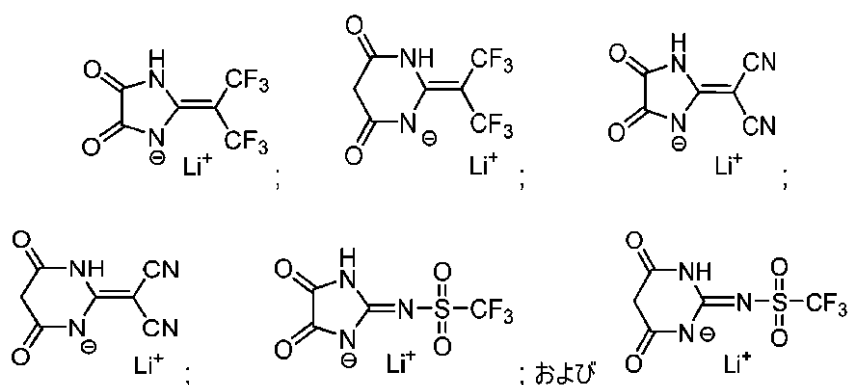
(項目 32)

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】

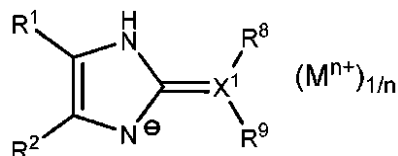


から選択される、項目 23 に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目 34)

式 V :

【化 42】



式 V

[式中、 R^1 、 R^2 、 R^8 、 R^9 、 X^1 、M、および n は、先に定義された通りであるか、または R^8 および R^9 は存在せず、 X^1 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)

R^1 および R^2 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)

R^1 および R^2 の両方が CN である、項目 35 に記載の化合物。

(項目 37)

X^1 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 3 8)

R^8 および R^9 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 C_{1-6} アルキルである、項目 3 7 に記載の化合物。

(項目 3 9)

R^8 および R^9 が共に、C N 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 3 7 に記載の化合物。

(項目 4 0)

R^8 および R^9 が共に C N である、項目 3 7 に記載の化合物。

(項目 4 1)

R^8 および R^9 が共にフッ素置換 C_{1-6} アルキルである、項目 3 7 に記載の化合物。

(項目 4 2)

X^1 が窒素原子である、項目 3 4 から 3 6 のいずれか一項に記載の化合物。

(項目 4 3)

R^9 が、フッ素置換 SO_2 アルキル (例えば、 SO_2CF_3) である、項目 4 2 に記載の化合物。

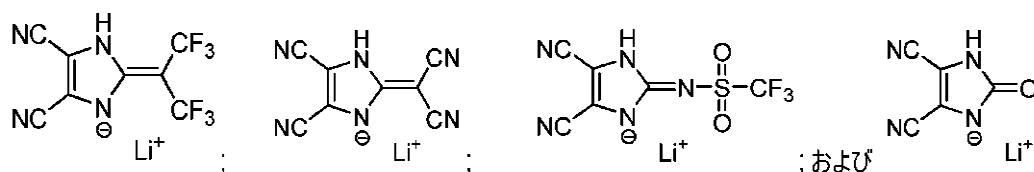
(項目 4 4)

M が Li であり、n が 1 である、項目 1 から 4 3 のいずれか一項に記載の化合物。

(項目 4 5)

前記化合物が

【化 4 3】



から選択される、項目 3 4 に記載の化合物またはその互変異性体。

(項目 4 6)

添加剤としての項目 1 から 4 5 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 4 7)

項目 1 から 4 5 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 4 8)

相溶性の溶媒をさらに含む、項目 4 7 に記載の電解質組成物。

(項目 4 9)

前記相溶性の溶媒が有機溶媒である、項目 4 8 に記載の電解質組成物。

(項目 5 0)

前記相溶性の溶媒が水性溶媒である、項目 4 8 に記載の電解質組成物。

(項目 5 1)

相溶性の溶媒和ポリマーをさらに含む、項目 4 7 に記載の電解質組成物。

(項目 5 2)

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 4 6 に記載の電極材料を含む、電気化学セル。

(項目 5 3)

項目 4 7 から 5 1 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 5 4)

前記電気化学セルが、バッテリー、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 5 2 または 5 3 に記載の電気化学セル。

(項目 5 5)

前記バッテリーが、リチウムまたはリチウムイオンバッテリーである、項目 5 4 に記載の電気化学セル。

(項目 5 6)

項目 5 2 から 5 5 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。