

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号  
特許第5880124号  
(P5880124)

(45) 発行日 平成28年3月8日 (2016.3.8)

(24) 登録日 平成28年2月12日 (2016.2.12)

(51) Int.Cl.

F I

HO 1 M 10/0567 (2010.01)

HO 1 M 10/052 (2010.01)

HO 1 M 10/0567

HO 1 M 10/052

請求項の数 6 (全 96 頁)

(21) 出願番号	特願2012-36327 (P2012-36327)	(73) 特許権者	000005968
(22) 出願日	平成24年2月22日 (2012.2.22)		三菱化学株式会社
(65) 公開番号	特開2012-190791 (P2012-190791A)		東京都千代田区丸の内一丁目1番1号
(43) 公開日	平成24年10月4日 (2012.10.4)	(72) 発明者	島 邦久
審査請求日	平成27年2月19日 (2015.2.19)		茨城県稲敷郡阿見町中央八丁目3番1号
(31) 優先権主張番号	特願2011-36427 (P2011-36427)		株式会社三菱化学科学技術研究センター内
(32) 優先日	平成23年2月22日 (2011.2.22)	(72) 発明者	澤 脩平
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)		茨城県稲敷郡阿見町中央八丁目3番1号
			株式会社三菱化学科学技術研究センター内
		(72) 発明者	大橋 洋一
			茨城県稲敷郡阿見町中央八丁目3番1号
			株式会社三菱化学科学技術研究センター内
		審査官	神野 将志
			最終頁に続く

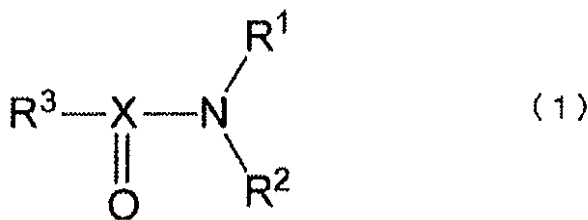
(54) 【発明の名称】 非水系電解液、及びそれを用いた電池

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

電解質と非水溶媒とを含む非水系電解液において、下記一般式(1)で表される、鎖状カルボン酸アミド、ジカルボン酸アミド、尿素誘導体、環状尿素誘導体、およびスルホンアミドからなる群より選ばれる少なくとも一種の化合物を含有する非水系電解液。

【化1】



10

( R <sup>1</sup> 及び R <sup>2</sup> は、水素基、又はヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1 ～ 10 の飽和又は不飽和炭化水素基、芳香族炭化水素基 を表し、 R <sup>3</sup> は、水素基、又はヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1 ～ 20 の有機基を表し、 R <sup>1</sup> ～ R <sup>3</sup> はそれぞれ同一でも異なってもよく、 R <sup>1</sup> ～ R <sup>3</sup> のうち2つ又は3つすべてが互いに結合して環を形成してもよい。また、 R <sup>1</sup> 及び R <sup>2</sup> のうち少なくとも一方が、窒素原子に直接結合しない炭素 - 炭素不飽和結合を有し、ヘテロ原子を含んでもよい炭素数 3 ～ 10 の不飽和炭化水素基を表す。 X は C、又は S = O を表す。 )

20

## 【請求項 2】

前記一般式(1)の $R^1$ 及び $R^2$ のうち少なくとも一方が炭素-炭素不飽和結合を末端に有し、ヘテロ原子を含んでもよい炭素数3~10の不飽和炭化水素基である請求項1に記載の非水系電解液。

## 【請求項 3】

前記一般式(1)の $R^1$ 及び $R^2$ のうち少なくとも一方がアリル基またはプロパルギル基である請求項2に記載の非水系電解液。

## 【請求項 4】

前記一般式(1)で表される化合物を0.001質量%以上10質量%以下含有する請求項1乃至3のうち何れか1項に記載の非水系電解液。

10

## 【請求項 5】

炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート、ハロゲン原子を有する環状カーボネート、モノフルオロリン酸塩、ジフルオロリン酸塩、ニトリル化合物及びイソシアナト化合物からなる群より選ばれる少なくとも1つの化合物を含有する請求項1乃至4のうち何れか1項に記載の非水系電解液。

## 【請求項 6】

リチウムイオンを吸蔵・放出可能な負極及び正極、並びに非水系電解液を含む非水系電解液電池であって、前記非水系電解液が請求項1乃至5のうちいずれか1項に記載の非水系電解液である非水系電解液電池。

## 【発明の詳細な説明】

20

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明は、非水系電解液、及びそれを用いた電池に関するものである。

## 【背景技術】

## 【0002】

電子機器の急速な進歩に伴い、二次電池に対する高容量化への要求が高くなっており、ニッケル・カドミウム電池やニッケル・水素電池に比べてエネルギー密度の高いリチウムイオン二次電池が広く使用され、また活発に研究されている。

非水系電解液電池に用いる電解液は、通常、主として電解質と非水溶媒とから構成されている。リチウムイオン二次電池の電解液としては、 $LiPF_6$ 、 $LiBF_4$ 、 $LiN(CF_3SO_2)_2$ 等の電解質を、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、 $\gamma$ -ブチロラクトン等の高誘電率溶媒と、ジメチルカーボネート、ジエチルカーボネート、エチルメチルカーボネート等の低粘度溶媒との混合溶媒に溶解させた非水系電解液が用いられている。

30

## 【0003】

このようなリチウムイオン二次電池は、従来より充電状態において高温条件下で保存するとガスが発生し、電池容量の低下などの劣化が起こり、最悪の場合には電池内部の暴走反応により電池の破裂、発火などの重篤な危険性があることが知られており、それを改善するために非水溶媒や電解質について種々の検討がなされている。

これまでに、リチウムイオン二次電池の特性を改善する方法として、ビフェニル構造を有する環状リン化合物を含有する非水系電解液が提案されている(特許文献1参照)。特許文献1では、該リン化合物としてリン酸エステル基上の酸素原子とリン原子とが環を形成する化合物を含有する電解液を用いることで、正極での非水系電解液の酸化分解を抑制し、寿命特性の低下を抑制することがなされている。

40

## 【先行技術文献】

## 【特許文献】

## 【0004】

【特許文献1】日本国特開2009-266663号公報

## 【発明の概要】

## 【発明が解決しようとする課題】

50

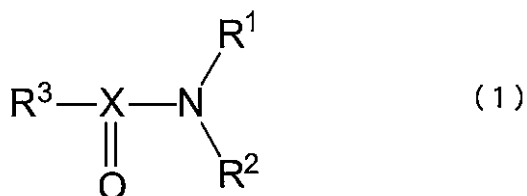
## 【 0 0 0 5 】

しかしながら、非水系電解液二次電池において、高温条件下で保存した場合のガス発生の抑制効果は十分とは言えず、改善の余地があった。

そこで本発明では、非水系電解液二次電池において、充電状態での高温保存時におけるガス発生を抑制し、かつ電池の充放電特性を向上させる二次電池用非水系電解液と、この非水系電解液を用いた二次電池を提供することを課題とする。更に、上記非水系電解液の添加剤として一般式(1)で表される化合物を提供することを課題とする。

## 【 0 0 0 6 】

## 【化1】



10

## 【 0 0 0 7 】

( $\text{R}^1$  及び  $\text{R}^2$  は、水素基、又はヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1 ~ 10 の飽和又は不飽和炭化水素基、芳香族炭化水素基を表し、 $\text{R}^3$  は、水素基、又はヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1 ~ 20 の有機基を表し、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^3$  はそれぞれ同一でも異なってもよく、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^3$  のうち 2 つ又は 3 つすべてが互いに結合して環を形成してもよい。また、 $\text{R}^1$  及び  $\text{R}^2$  のうち少なくとも一方が、窒素原子に直接結合しない炭素 - 炭素不飽和結合を有し、ヘテロ原子を含んでもよい炭素数 3 ~ 10 の不飽和炭化水素基を表す。

20

## 【 0 0 0 8 】

X は C、又は S = O を表す。)

## 【課題を解決するための手段】

## 【 0 0 0 9 】

本発明者らは、上記課題を解決するために種々の検討を重ねた結果、一般式(1)で表される化合物を電解液中に含有することによって、上記課題を解決できることを見出し、本発明を完成させるに至った。

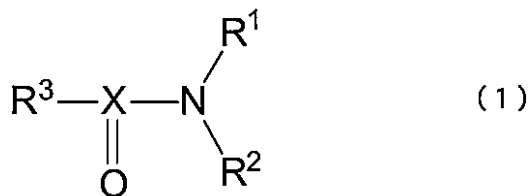
即ち、本発明の要旨は、下記に示す通りである。

30

(a) 電解質と非水溶媒とを含む非水系電解液において、下記一般式(1)で表される鎖状カルボン酸アミド、ジカルボン酸アミド、尿素誘導体、環状尿素誘導体、およびスルホンアミドからなる群より選ばれる少なくとも一種の化合物を含有する非水系電解液。

## 【 0 0 1 0 】

## 【化2】



40

## 【 0 0 1 1 】

( $\text{R}^1$  及び  $\text{R}^2$  は、水素基、又はヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1 ~ 10 の飽和又は不飽和炭化水素基、芳香族炭化水素基を表し、 $\text{R}^3$  は、水素基、又はヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1 ~ 20 の有機基を表し、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^3$  はそれぞれ同一でも異なってもよく、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^3$  のうち 2 つ又は 3 つすべてが互いに結合して環を形成してもよい。また、 $\text{R}^1$  及び  $\text{R}^2$  のうち少なくとも一方が、窒素原子に直接結合しない炭素 - 炭素不飽和結合を有し、ヘテロ原子を含んでもよい炭素数 3 ~ 10 の不飽和炭化水素基を表す。

## 【 0 0 1 2 】

X は C、又は S = O を表す。)

50

(b) 前記一般式(1)の $R^1$ 及び $R^2$ のうち少なくとも一方が炭素-炭素不飽和結合を末端に有し、ヘテロ原子を含んでいてもよい炭素数3~10の不飽和炭化水素基である(a)に記載の非水系電解液。

(c) 前記一般式(1)の $R^1$ 及び $R^2$ のうち少なくとも一方がアリル基またはプロパルギル基である(b)に記載の非水系電解液。

(d) 前記一般式(1)で表される化合物を0.001質量%以上10質量%以下含有する(a)乃至(c)のうち何れか1に記載の非水系電解液。

(e) 炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート、ハロゲン原子を有する環状カーボネート、モノフルオロリン酸塩、ジフルオロリン酸塩、ニトリル化合物及びイソシアナト化合物からなる群より選ばれる少なくとも1つの化合物を含有する(a)乃至(d)のうち何れか1に記載の非水系電解液。

(f) リチウムイオンを吸蔵・放出可能な負極及び正極、並びに非水系電解液を含む非水系電解液電池であって、前記非水系電解液が(a)乃至(e)のうちいずれか1に記載の非水系電解液である非水系電解液電池。

#### 【発明の効果】

##### 【0013】

本発明に係る電解液は、これを電池の電解液として用いることで、電池の充電状態での高温保存時におけるガス発生を抑制し、充放電特性、特に、高温保存時の電圧及び容量に優れた電池を得ることができる。又、本発明に係る化合物は、上記効果を有する電池の電解液の成分として有用である。

#### 【発明を実施するための形態】

##### 【0014】

以下に、本発明を実施するための形態を詳細に説明する。ただし、以下に記載する説明は本発明の実施形態の一例(代表例)であり、本発明の要旨を超えない限り、これらの内容に特定されるものではなく、任意に実施することができる。

ここで“重量%”、“重量部”と“質量%”、“質量部”とは、それぞれ同義である。

##### 〔1. 非水系電解液〕

本発明に係る非水系電解液は、一般的な非水系電解液と同様に、電解質及びこれを溶解する非水溶媒を含有し、更に前記一般式(1)で表される化合物を含有することを特徴とする。

##### 【0015】

##### 〔1-1. 電解質〕

本発明の非水系電解液に用いる電解質に制限は無く、目的とする非水系電解液二次電池に電解質として用いられるものであれば公知のものを任意に採用することができる。本発明の非水系電解液をリチウムイオン二次電池に用いる場合には、通常は、電解質としてリチウム塩を用いる。

##### 【0016】

電解質の具体例としては、 $LiClO_4$ 、 $LiAsF_6$ 、 $LiPF_6$ 、 $Li_2CO_3$ 、 $LiBF_4$ 、 $LiSbF_6$ 、 $LiSO_3F$ 、 $LiN(FSO_2)_2$ 等の無機リチウム塩； $LiCF_3SO_3$ 、 $LiN(CF_3SO_2)_2$ 、 $LiN(C_2F_5SO_2)_2$ 、リチウム環状1,3-ヘキサフルオロプロパンジスルホニルイミド、リチウム環状1,2-テトラフルオロエタンジスルホニルイミド、 $LiN(CF_3SO_2)(C_4F_9SO_2)$ 、 $LiC(CF_3SO_2)_3$ 、 $LiPF_4(CF_3)_2$ 、 $LiPF_4(C_2F_5)_2$ 、 $LiPF_4(CF_3SO_2)_2$ 、 $LiPF_4(C_2F_5SO_2)_2$ 、 $LiBF_2(CF_3)_2$ 、 $LiBF_2(C_2F_5)_2$ 、 $LiBF_2(CF_3SO_2)_2$ 、 $LiBF_2(C_2F_5SO_2)_2$ 等の含フッ素有機リチウム塩；リチウムビス(オキサラト)ボレート、リチウムジフルオロ(オキサラト)ボレート、リチウムトリス(オキサラト)フォスフェート、リチウムジフルオロビス(オキサラト)フォスフェート、リチウムテトラフルオロ(オキサラト)フォスフェート等の含ジカルボン酸錯体リチウム塩などが挙げられる。

##### 【0017】

10

20

30

40

50

これらのうち、非水溶媒への溶解性・解離度、電気伝導度および得られる電池特性の点から  $\text{LiPF}_6$ 、 $\text{LiBF}_4$ 、 $\text{LiSO}_3\text{F}$ 、 $\text{LiN}(\text{FSO}_2)_2$ 、 $\text{LiCF}_3\text{SO}_3$ 、 $\text{LiN}(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2$ 、 $\text{LiN}(\text{C}_2\text{F}_5\text{SO}_2)_2$ 、リチウム環状1,3-ヘキサフルオロプロパンジスルホニルイミド、リチウム環状1,2-テトラフルオロエタンジスルホニルイミド、リチウムビス(オキサト)ボレート、リチウムジフルオロ(オキサト)ボレート、リチウムトリス(オキサト)フォスフェート、リチウムジフルオロビス(オキサト)フォスフェート、リチウムテトラフルオロ(オキサト)フォスフェートが好ましく、特に  $\text{LiPF}_6$ 、 $\text{LiBF}_4$  が好ましい。

#### 【0018】

また、電解質は、1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用してもよい。中でも、特定の無機リチウム塩の2種を併用したり、無機リチウム塩と含フッ素有機リチウム塩とを併用したりすると、トリクル充電時のガス発生が抑制されたり、高温保存後の劣化が抑制されるので好ましい。特に、 $\text{LiPF}_6$  と  $\text{LiBF}_4$  との併用や、 $\text{LiPF}_6$ 、 $\text{LiBF}_4$  等の無機リチウム塩と、 $\text{LiCF}_3\text{SO}_3$ 、 $\text{LiN}(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2$ 、 $\text{LiN}(\text{C}_2\text{F}_5\text{SO}_2)_2$  等の含フッ素有機リチウム塩とを併用することが好ましい。

#### 【0019】

更に、 $\text{LiPF}_6$  と  $\text{LiBF}_4$  とを併用する場合、電解質全体に対して  $\text{LiBF}_4$  が通常0.01質量%以上、50質量%以下の比率で含有されていることが好ましい。上記比率は、好ましくは0.05質量%以上、より好ましくは0.1質量%以上であり、一方、好ましくは20質量%以下、より好ましくは10質量%以下、特に好ましくは5質量%以下、最も好ましくは3質量%以下である。比率が上記範囲にあることにより、所望の効果を得やすくなり、また、 $\text{LiBF}_4$  の低い解離度により、電解液の抵抗が高くなることを抑制する。

#### 【0020】

一方、 $\text{LiPF}_6$ 、 $\text{LiBF}_4$  等の無機リチウム塩と、 $\text{LiSO}_3\text{F}$ 、 $\text{LiN}(\text{FSO}_2)_2$  等の無機リチウム塩、 $\text{LiCF}_3\text{SO}_3$ 、 $\text{LiN}(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2$ 、 $\text{LiN}(\text{C}_2\text{F}_5\text{SO}_2)_2$ 、リチウム環状1,3-ヘキサフルオロプロパンジスルホニルイミド、リチウム環状1,2-テトラフルオロエタンジスルホニルイミド、 $\text{LiN}(\text{CF}_3\text{SO}_2)(\text{C}_4\text{F}_9\text{SO}_2)$ 、 $\text{LiC}(\text{CF}_3\text{SO}_2)_3$ 、 $\text{LiPF}_4(\text{CF}_3)_2$ 、 $\text{LiPF}_4(\text{C}_2\text{F}_5)_2$ 、 $\text{LiPF}_4(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2$ 、 $\text{LiPF}_4(\text{C}_2\text{F}_5\text{SO}_2)_2$ 、 $\text{LiBF}_2(\text{CF}_3)_2$ 、 $\text{LiBF}_2(\text{C}_2\text{F}_5)_2$ 、 $\text{LiBF}_2(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2$ 、 $\text{LiBF}_2(\text{C}_2\text{F}_5\text{SO}_2)_2$  等の含フッ素有機リチウム塩、又は、リチウムビス(オキサト)ボレート、リチウムトリス(オキサト)フォスフェート、リチウムジフルオロオキサトボレート、リチウムトリ(オキサト)フォスフェート、リチウムジフルオロビス(オキサト)フォスフェート、リチウムテトラフルオロ(オキサト)フォスフェート等の含ジカルボン酸錯体リチウム塩などを併用する場合、電解質全体に占める無機リチウム塩の割合は、通常70質量%以上、好ましくは80質量%以上、より好ましくは85質量%以上、また、通常99質量%以下、好ましくは95質量%以下である。

#### 【0021】

本発明の非水系電解液中におけるリチウム塩の濃度は、本発明の要旨を損なわない限り任意であるが、通常0.5mol/L以上、好ましくは0.6mol/L以上、より好ましくは0.8mol/L以上である。また、通常3mol/L以下、好ましくは2mol/L以下、より好ましくは1.8mol/L以下、更に好ましくは1.6mol/L以下の範囲である。リチウム塩の濃度が上記範囲にあることにより、非水系電解液の電気伝導率が十分となり、また、粘度上昇による電気伝導率の低下、ひいては、非水系電解液二次電池の性能の低下を抑制する。

#### 【0022】

##### 〔1-2. 非水溶媒〕

本発明の非水系電解液に含まれる非水溶媒としては、従来から非水系電解液の溶媒とし

10

20

30

40

50

て公知のものの中から適宜選択して用いることができる。なお、非水溶媒は、1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用してもよい。

通常使用される非水溶媒の例としては、環状カーボネート、鎖状カーボネート、鎖状又は環状カルボン酸エステル、鎖状又は環状エーテル類、含リン有機溶媒、含硫黄有機溶媒、芳香族含フッ素溶媒等が挙げられる。

#### 【0023】

環状カーボネートとしては、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート等の環状カーボネート類が挙げられ、環状カーボネート類の炭素数は、通常3以上6以下である。

これらの中でも、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネートは、誘電率が高いため電解質が溶解し易く、非水系電解液二次電池にしたときにサイクル特性が良いという点で好ましく、特にエチレンカーボネートが好ましい。また、これらの化合物の水素の一部をフッ素で置換していてもよい。

#### 【0024】

フッ素で置換した環状カーボネート類としては、フルオロエチレンカーボネート、1, 2 - ジフルオロエチレンカーボネート、1, 1 - ジフルオロエチレンカーボネート、1, 1, 2 - トリフルオロエチレンカーボネート、テトラフルオロエチレンカーボネート、1 - フルオロ - 2 - メチルエチレンカーボネート、1 - フルオロ - 1 - メチルエチレンカーボネート、1, 2 - ジフルオロ - 1 - メチルエチレンカーボネート、1, 1, 2 - トリフルオロ - 2 - メチルエチレンカーボネート、トリフルオロメチルエチレンカーボネート等のフッ素で置換した炭素数3～5の環状カーボネート類が挙げられ、これらの中でもフルオロエチレンカーボネート、1, 2 - ジフルオロエチレンカーボネート、トリフルオロメチルエチレンカーボネートが好ましい。

#### 【0025】

鎖状カーボネートとしては、ジメチルカーボネート、エチルメチルカーボネート、ジエチルカーボネート、メチル - n - プロピルカーボネート、エチル - n - プロピルカーボネート、ジ - n - プロピルカーボネート等の鎖状カーボネート類が挙げられ、構成するアルキル基の炭素数は、夫々1以上5以下が好ましく、特に好ましくは1以上4以下である。中でも、ジメチルカーボネート、ジエチルカーボネート、エチルメチルカーボネートが電池特性向上の点から好ましい。

#### 【0026】

また、アルキル基の水素の一部がフッ素で置換されていてもよい。フッ素で置換した鎖状カーボネート類としては、ビス(フルオロメチル)カーボネート、ビス(ジフルオロメチル)カーボネート、ビス(トリフルオロメチル)カーボネート、ビス(2 - フルオロエチル)カーボネート、ビス(2, 2 - ジフルオロエチル)カーボネート、ビス(2, 2, 2 - トリフルオロエチル)カーボネート、2 - フルオロエチルメチルカーボネート、2, 2 - ジフルオロエチルメチルカーボネート、2, 2, 2 - トリフルオロエチルメチルカーボネート等が挙げられる。

#### 【0027】

鎖状カルボン酸エステル類としては、酢酸メチル、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸sec - ブチル、酢酸イソブチル、酢酸t - ブチル、プロピオン酸メチル、プロピオン酸エチル、プロピオン酸プロピル、プロピオン酸イソプロピル、酪酸メチル、酪酸エチル、酪酸プロピル、吉草酸メチル、吉草酸エチル等、及びこれらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物等が挙げられる。

#### 【0028】

このフッ素で置換した化合物として、トリフルオロ酢酸メチル、トリフルオロ酢酸エチル、トリフルオロ酢酸プロピル、トリフルオロ酢酸ブチル、トリフルオロ酢酸2, 2, 2 - トリフルオロエチル等が挙げられる。この中でも、酢酸メチル、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸ブチル、プロピオン酸メチル、プロピオン酸エチル、プロピオン酸プロピル、酪酸メチル、酪酸エチル、吉草酸メチルが電池特性向上の点から好ましい。

## 【 0 0 2 9 】

環状カルボン酸エステル類としては、 - ブチロラクトン、 - バレロラクトン等及びこれらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物が挙げられる。これらの中でも、 - ブチロラクトンがより好ましい。

## 【 0 0 3 0 】

更に、鎖状エーテルとしては、ジメトキシメタン、 1 , 1 - ジメトキシエタン、 1 , 2 - ジメトキシエタン、ジエトキシメタン、 1 , 1 - ジエトキシエタン、 1 , 2 - ジエトキシエタン、エトキシメトキシメタン、 1 , 1 - エトキシメトキシエタン、 1 , 2 - エトキシメトキシエタン等、及びこれらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物等が挙げられる。

10

## 【 0 0 3 1 】

これらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物として、ビス(トリフルオロエトキシ)エタン、エトキシトリフルオロエトキシエタン、メトキシトリフルオロエトキシエタン、 1 , 1 , 1 , 2 , 2 , 3 , 4 , 5 , 5 , 5 - デカフルオロ - 3 - メトキシ - 4 - トリフルオロメチル - ペンタン、 1 , 1 , 1 , 2 , 2 , 3 , 4 , 5 , 5 , 5 - デカフルオロ - 3 - エトキシ - 4 - トリフルオロメチル - ペンタン、 1 , 1 , 1 , 2 , 2 , 3 , 4 , 5 , 5 , 5 - デカフルオロ - 3 - プロポキシ - 4 - トリフルオロメチル - ペンタン、 1 , 1 , 2 , 2 , 2 - テトラフルオロエチル - 2 , 2 , 3 , 3 - テトラフルオロプロピルエーテル、 2 , 2 - ジフルオロエチル - 2 , 2 , 3 , 3 - テトラフルオロプロピルエーテル等が挙げられる。これらの中でも、 1 , 2 - ジメトキシエタン、 1 , 2 - ジエトキシエタンがより好ましい。

20

## 【 0 0 3 2 】

環状エーテルとしては、テトラヒドロフラン、 2 - メチルテトラヒドロフラン等、及びこれらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物等が挙げられる。

更に、含リン有機溶媒としては、リン酸トリメチル、リン酸トリエチル、リン酸ジメチルエチル、リン酸メチルジエチル、リン酸エチレンメチル、リン酸エチレンエチル、リン酸トリフェニル、亜リン酸トリメチル、亜リン酸トリエチル、亜リン酸トリフェニル、トリメチルホスフィンオキシド、トリエチルホスフィンオキシド、トリフェニルホスフィンオキシド等、及びこれらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物が挙げられる。

## 【 0 0 3 3 】

これらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物として、リン酸トリス( 2 , 2 , 2 - トリフルオロエチル)、リン酸トリス( 2 , 2 , 3 , 3 , 3 - ペンタフルオロプロピル)などが挙げられる。

30

更に、含硫黄有機溶媒としては、スルホラン、 2 - メチルスルホラン、 3 - メチルスルホラン、ジメチルスルホン、ジエチルスルホン、エチルメチルスルホン、メチルプロピルスルホン、ジメチルスルホキシド、メタンスルホン酸メチル、メタンスルホン酸エチル、エタンスルホン酸メチル、エタンスルホン酸エチル、硫酸ジメチル、硫酸ジエチル、硫酸ジブチル等、及びこれらの化合物の水素の一部をフッ素で置換した化合物が挙げられる。

## 【 0 0 3 4 】

更に、芳香族含フッ素溶媒としては、フルオロベンゼン、ジフルオロベンゼン、トリフルオロベンゼン、テトラフルオロベンゼン、ペンタフルオロベンゼン、ヘキサフルオロベンゼン、ベンゾトリフルオライド等が挙げられる。

40

上記の非水溶媒の中でも、環状カーボネートであるエチレンカーボネート及び/又はプロピレンカーボネートを用いることが好ましく、更にこれらの環状カーボネートと鎖状カーボネートとを併用することが電解液の高い電導度と低い粘度を両立できる点から好ましい。

## 【 0 0 3 5 】

このように環状カーボネートと鎖状カーボネートとを非水溶媒として併用する場合、本発明の非水系電解液中の非水溶媒中に占める鎖状カーボネートの好適な含有量は、通常 20 体積%以上、好ましくは 40 体積%以上、また、通常 95 体積%以下、好ましくは 90

50

体積%以下である。

一方、本発明の非水系電解液中の非水溶媒中に占める環状カーボネートの好適な含有量は、通常5体積%以上、好ましくは10体積%以上、また、通常80体積%以下、好ましくは60体積%以下である。鎖状カーボネートの割合が上記範囲にあることにより、本発明の非水系電解液の粘度上昇を抑制し、また、電解質であるリチウム塩の解離度の低下による本発明の非水系電解液の電気伝導率低下を抑制する。ただし、フルオロエチレンカーボネートは溶媒として用いても添加剤として用いてもよく、その場合は上記の含有量に限定されない。

【0036】

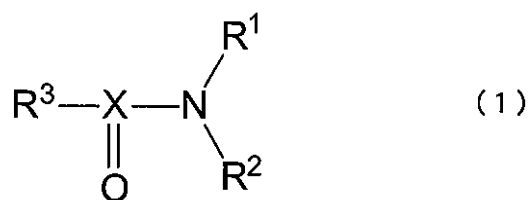
なお、本明細書において、非水溶媒の容量は25 での測定値であるが、エチレンカーボネートのように25 で固体のものは融点での測定値を用いる。

10

本発明の非水系電解液は、下記一般式(1)で表される化合物を含有することを特徴とする。

【0037】

【化3】



20

【0038】

(R<sup>1</sup>及びR<sup>2</sup>は、水素基、又はヘテロ原子を含んでいてもよい炭素数1~10の有機基を表し、R<sup>3</sup>は、水素基、又はヘテロ原子を含んでいてもよい炭素数1~20の有機基を表し、R<sup>1</sup>~R<sup>3</sup>はそれぞれ同一でも異なってもよく、R<sup>1</sup>~R<sup>3</sup>のうち2つ又は3つすべてが互いに結合して環を形成してもよい。

また、R<sup>1</sup>及びR<sup>2</sup>のうち少なくとも一方が、窒素原子に直接結合しない炭素-炭素不飽和結合を有し、ヘテロ原子を含んでいてもよい、炭素数2~10の有機基を表す。

【0039】

XはC、S=O又はP(R<sup>4</sup>)を表し、R<sup>4</sup>はヘテロ原子を含んでもよい炭素数1~10の有機基を表す。)

30

一般式(1)のR<sup>1</sup>~R<sup>3</sup>のヘテロ原子を含んでいてもよい有機基のヘテロ原子については、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素で挙げられるハロゲン原子、カルボニル基、カルボン酸エステル基、炭酸エステルなどの炭素と酸素からなる官能基、カルボン酸アミド、カーバメート基、尿素基、シアネート基、イソシアナト基などの炭素、酸素、窒素からなる官能基、ニトリル基、イソニトリル基など炭素と窒素からなる官能基、ニトロ基、ニトロソ基などの窒素と酸素からなる官能基、アミノ基などの窒素からなる官能基、エーテル基などの酸素からなる官能基、シリル基などのケイ素からなる官能基、スルホキシド基、スルホニル基、スルホン酸エステル基、硫酸エステル基などの硫黄と酸素からなる官能基、スルホン酸アミド基、硫酸アミド基などの硫黄、酸素、窒素からなる官能基、スルフィド基、ジスルフィド基など硫黄からなる官能基、ホスフィン基、リン酸エステル、ホスホン酸エステル基、ホスフィン酸エステル基、リン酸アミド、ホスホン酸アミド、ホスフィン酸アミドなどリンを含む官能基が挙げられる。

40

【0040】

また、有機基としては、飽和又は不飽和炭化水素基、芳香族炭化水素基が挙げられる。

飽和炭化水素基としては、メチル基、エチル基、n-プロピル基、i-プロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基等の直鎖状又は分岐鎖状のアルキル基、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等の環状アルキル基が挙げられる。

不飽和炭化水素基としては、ビニル基、アリル基、1-プロペニル基等のアルケニル基、エチニル基、プロパルギル基、1-プロピニル基などのアルキニル基が挙げられる。

50



## 【 0 0 4 1 】

芳香族炭化水素基としては、フェニル基、トリル基等のアリール基、ベンジル基、フェネチル基等のアラルキル基等が挙げられる。

飽和炭化水素基の炭素数は、通常 1 以上 10 以下であり、好ましくは 6 以下、更に好ましくは、4 以下であり、不飽和炭化水素基の炭素数は、通常 2 以上 10 以下、好ましくは 6 以下であり、更に好ましくは 4 以下であり、芳香族炭化水素基の炭素数は、通常 6 以上 10 以下、好ましくは 8 以下である。

## 【 0 0 4 2 】

また、上記一般式 ( 1 ) の  $R^1$  及び  $R^2$  のうち少なくとも一方は、窒素原子に直接結合しない炭素 - 炭素不飽和結合を有し、ヘテロ原子を含んでいてもよい、炭素数 2 ~ 10 の有機基である必要がある。

10

窒素原子に直接結合しない炭素 - 炭素不飽和結合とは、 $-N-C=C-$  のような窒素原子の隣の炭素原子が不飽和結合する場合は入らない。

## 【 0 0 4 3 】

また、炭素 - 炭素不飽和結合を有さない場合には、電池を高温で保存した際のガスの発生抑制効果が劣り、又高温保存後の容量が劣ることとなる。

上記の炭素 - 炭素不飽和結合の中でも、高温保存時のガス発生抑制の点から、一般式 ( 1 ) の  $R^1$  及び  $R^2$  のうち少なくとも一方は、炭素 - 炭素不飽和結合を末端に有し、ヘテロ原子を含んでいてもよい炭素数 2 ~ 10 の有機基であることが好ましい。更に、上記炭素 - 炭素不飽和結合を末端に有し、ヘテロ原子を含んでいてもよい炭素数 2 ~ 10 の有機基は、アリル基またはプロパルギル基であることが好ましい。

20

## 【 0 0 4 4 】

また、一般式 ( 1 ) の  $R^1$  及び  $R^2$  のうち一方が、窒素原子に直接結合しない炭素 - 炭素不飽和結合を有せば、他方は窒素原子に直接結合する炭素 - 炭素不飽和結合を有していてもよい。具体的な組み合わせとしては、以下の例が挙げられる。

$R^1$  ; ビニル基、 $R^2$  ; アリル基

$R^1$  ; ビニル基、 $R^2$  ; プロパルギル基

$R^1$  ; 1 - プロペニル基、 $R^2$  ; アリル基

$R^1$  ; 1 - プロペニル基、 $R^2$  ; プロパルギル基

更に、上記一般式 ( 1 ) の  $X$  は  $C$ 、 $S=O$ 、又は  $P(R^4)$  を表し、 $R^4$  はヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1 ~ 10 の有機基を表す。ここで、 $X$  と  $R^3$  は環を形成しない。また、 $X$  が  $P(R^4)$  の場合、 $R^3$  および  $R^4$  のうちいずれか一方が酸素原子を有し、該酸素原子が  $P(R^4)$  のリン原子と直接結合し、もう一方が  $P(R^4)$  のリン原子と  $P-C$  結合を有する場合、 $R^3$  と  $R^4$  は互いに結合して環を形成しない。

30

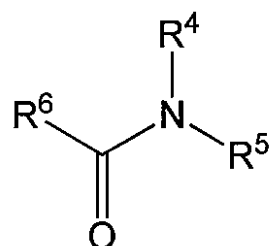
## 【 0 0 4 5 】

前記一般式 ( 1 ) で表される化合物の具体例としては、次のようなものが挙げられる。

1 . 鎖状カルボン酸アミド

## 【 0 0 4 6 】

## 【 化 4 】



(2)

40

## 【 0 0 4 7 】

$R^4$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis* - 2 - ブテニル基、*trans* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オク

50

チニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0048】

R<sup>5</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

10

【0049】

R<sup>6</sup>としては、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、t - ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、シクロヘキシル基、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ヘプタフルオロプロピル基、ビニル基、アリル基、1 - プロペニル基、イソプロペニル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシメチル、エトキシメチル、アセチルメチル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基などが挙げられる。

20

【0050】

R<sup>4</sup> ~ R<sup>6</sup> の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から R<sup>4</sup> が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; 水素基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; 水素基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; 水素基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; 水素基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; 水素基

30

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; 水素基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; 水素基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; 水素基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; メチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; メチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; メチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; メチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; メチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; メチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; メチル基

40

【0051】

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; メチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; エチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; エチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; エチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; エチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; エチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; エチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; エチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; エチル基

50

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; プロピル基

## 【 0 0 5 2 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ブチル基

10

20

## 【 0 0 5 3 】

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; sec - ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; tert - ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; tert - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; tert - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; tert - ブチル基

30

## 【 0 0 5 4 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; tert - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; tert - ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; tert - ブチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; tert - ブチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; ペンチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ペンチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; ペンチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ペンチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ペンチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ペンチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ペンチル基

40

50

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ペンチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; ヘキシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ヘキシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; ヘキシル基

## 【 0 0 5 5 】

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ヘキシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ヘキシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ヘキシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ヘキシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ヘキシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ヘプチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; オクチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; オクチル基

10

20

## 【 0 0 5 6 】

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; オクチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; オクチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; オクチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; オクチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; オクチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; オクチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ノニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; デシル基

30

## 【 0 0 5 7 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; デシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; デシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; デシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; デシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; デシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; デシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; デシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; シクロヘキシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; シクロヘキシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; シクロヘキシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; シクロヘキシル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; シクロヘキシル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; シクロヘキシル基

40

50

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; シクロヘキシル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; シクロヘキシル基

【 0 0 5 8 】

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; フェニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; ビニル基

【 0 0 5 9 】

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; イソプロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

【 0 0 6 0 】

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; エチル基、R<sup>6</sup> ; シアノメチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; アリル基、R<sup>6</sup> ; 1 - シアノエチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; 1 - シアノエチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; プロパルギル基、R<sup>6</sup> ; 1 - シアノエチル基

R<sup>4</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5</sup> ; 水素基、R<sup>6</sup> ; 1 - シアノエチル基

R<sup>4</sup> ; アリル基、R<sup>5</sup> ; メチル基、R<sup>6</sup> ; 1 - シアノエチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基

【 0 0 6 1 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; プロパルギル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

10

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【 0 0 6 2 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; 水素基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 水素基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 水素基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; 水素基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 水素基

20

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; メチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; メチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; メチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; メチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; メチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; エチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; エチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; エチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; エチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; エチル基

30

【 0 0 6 3 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; プロピル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; プロピル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; プロピル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; プロピル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; プロピル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; イソプロピル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロピル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロピル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; イソプロピル基

40

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; イソプロピル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; ブチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ブチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ブチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ブチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ブチル基

【 0 0 6 4 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; s e c - ブチル基

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; s e c - ブチル基

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; s e c - ブチル基

50

R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; sec - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; sec - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	10
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
【 0 0 6 5 】	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ヘプチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘプチル基	20
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘプチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; ヘプチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; ヘプチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	
【 0 0 6 6 】	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	30
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	40
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	
【 0 0 6 7 】	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; メチル基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; エチル基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	50

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; ビニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ビニル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; ビニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; ビニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; ビニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; イソプロペニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロペニル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロペニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; イソプロペニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; イソプロペニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; 1 - プロペニル基

10

## 【 0 0 6 8 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 1 - プロペニル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 1 - プロペニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; 1 - プロペニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 1 - プロペニル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; シアノメチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; シアノメチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; シアノメチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; シアノメチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; シアノメチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

20

## 【 0 0 6 9 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; メチル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; エチル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

30

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

## 【 0 0 7 0 】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; 水素基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 水素基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 水素基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; メチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; メチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; メチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; エチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; エチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; エチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; プロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロピル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; イソプロピル基

40

## 【 0 0 7 1 】

50



R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ブチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; sec - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; sec - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; sec - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; tert - ブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	10
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ペンチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘキシル基	
【 0 0 7 2 】	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ヘブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘブチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ヘブチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	20
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; オクチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ノニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; デシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	30
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; シクロヘキシル基	
【 0 0 7 3 】	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; フェニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; ビニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ビニル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; ビニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; イソプロペニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; イソプロペニル基	40
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; イソプロペニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; 1 - プロペニル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; シアノメチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; シアノメチル基	
R <sup>4</sup> ; プロパルギル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; シアノメチル基	
【 0 0 7 4 】	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; アリル基、R <sup>6</sup> ; 1 - シアノエチル基	
R <sup>4</sup> ; アリル基、R <sup>5</sup> ; 水素基、R <sup>6</sup> ; 1 - シアノエチル基	50

$R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 1 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; 2 - シアノエチル基

## 【0075】

上記組み合わせ中の  $R^4 \sim R^6$  はヘテロ原子で置換されていてもよく、ヘテロ原子で置換される場合、該ヘテロ原子は、好ましくはフッ素、塩素、臭素またはヨウ素で挙げられるハロゲン原子であり、更に好ましくはフッ素原子である。 $R^4 \sim R^6$  がヘテロ原子で置換されたものとして、以下のものが挙げられる。

## 【0076】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^4$  ; プロパルギル基、 $R^5$  ; 水素基、 $R^6$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; トリフルオロメチル基

好ましくは、以下のものが挙げられる。

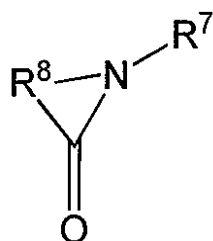
## 【0077】

$R^4$  ; アリル基、 $R^5$  ; アリル基、 $R^6$  ; トリフルオロメチル基

## 2. 環状カルボン酸アミド

## 【0078】

## 【化5】



(3)

## 【0079】

$R^7$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis* - 2 - ブテニル基、*trans* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【0080】

$R^8$  としては、エチレン基、トリメチレン基、1 - メチルトリメチレン基、2 - メチルトリメチレン基、3 - メチルトリメチレン基、1 - メチルトトラメチレン基、4 - メチルトトラメチレン基、ペンタメチレン基などが挙げられる。

$R^7$  及び  $R^8$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から  $R^7$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものである。

## 【0081】

$R^7$  がアリル基であるものとして、N - アリル - プロピオラクタム、N - アリル - 2 - ピロリドン、N - アリル - 3 - メチル - 2 - ピロリドン、N - アリル - 5 - メチル - 2 - ピロリドン、N - アリル - 2 - ピペリドン、N - アリル - 3 - メチル - 2 - ピペリドン、N - アリル - 6 - メチル - 2 - ピペリドン、N - アリル - カプロラクタムなどが挙げられる。

## 【0082】

また、 $R^7$  がプロパルギル基であるものとして、N - プロパルギル - プロピオラクタム、N - プロパルギル 2 - ピロリドン、N - プロパルギル 3 - メチル - 2 - ピロリドン、N - プロパルギル 5 - メチル - 2 - ピロリドン、N - プロパルギル 2 - ピペリドン、N

10

20

30

40

50

- プロパルギル 3 - メチル - 2 - ピペリドン、N - プロパルギル 6 - メチル - 2 - ピペリドン、N - プロパルギル - カプロラクタムなどが挙げられる。

【 0 0 8 3 】

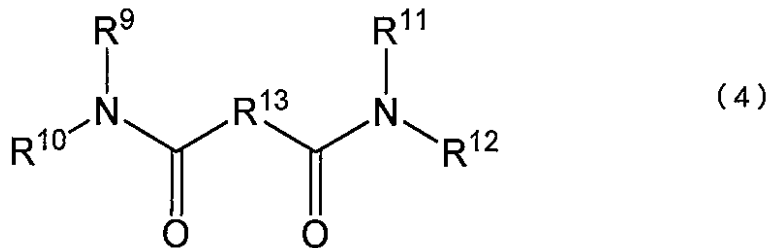
好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、N - アリル - プロピオラクタム、N - アリル - 2 - ピロリドン、N - アリル - 2 - ピペリドン、N - アリル - カプロラクタム、N - プロパルギル - プロピオラクタム、N - プロパルギル - 2 - ピロリドン、N - プロパルギル - 2 - ピペリドン、N - プロパルギル - カプロラクタムが挙げられる。

3 . ジカルボン酸アミド

【 0 0 8 4 】

10

【 化 6 】



【 0 0 8 5 】

20

R<sup>9</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【 0 0 8 6 】

R<sup>10</sup> ~ R<sup>12</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

30

【 0 0 8 7 】

R<sup>13</sup>としては、直結基、メチレン基、エチレン基、トリメチレン基、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ヘプタメチレン基、オクタメチレン基、ノナメチレン基、デカメチレン基、ピニレン基、アセチレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - フェニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、1, 2 - シクロヘキサンジイル基、1, 3 - シクロヘキサンジイル基、1, 4 - シクロヘキサンジイル基などが挙げられる。

40

【 0 0 8 8 】

R<sup>9</sup> ~ R<sup>13</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、R<sup>9</sup>がアリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

R<sup>9</sup> ~ R<sup>12</sup> ; アリル基、R<sup>13</sup> ; 直結基

R<sup>9</sup> ~ R<sup>12</sup> ; アリル基、R<sup>13</sup> ; メチレン基

R<sup>9</sup> ~ R<sup>12</sup> ; アリル基、R<sup>13</sup> ; エチレン基

50

$R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; トリメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; テトラメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; ペンタメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; ヘキサメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; 1, 2 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; 1, 3 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; 1, 4 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; 1, 2 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; 1, 3 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; 1, 4 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; *c i s* - ビニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; *t r a n s* - ビニレン基

10

## 【 0 0 8 9 】

$R^9 \sim R^{12}$ ; アリル基、 $R^{13}$ ; アセチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; 直結基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; メチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; エチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; トリメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; テトラメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; ペンタメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; ヘキサメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; 1, 2 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; 1, 3 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; 1, 4 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; 1, 2 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; 1, 3 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; 1, 4 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; *c i s* - ビニレン基

20

## 【 0 0 9 0 】

$R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; *t r a n s* - ビニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$ ; プロパルギル基、 $R^{13}$ ; アセチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; 直結基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; メチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; エチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; トリメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; テトラメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; ペンタメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; ヘキサメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; 1, 2 - フェニレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; 1, 3 - フェニレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; 1, 4 - フェニレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; 1, 2 - シクロヘキサ

30

ンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; 1, 3 - シクロヘキサ  
 ンジイル基

## 【 0 0 9 1 】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; 1, 4 - シクロヘキサ  
 ンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; *c i s* - ビニレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ; 水素基、 $R^{13}$ ; *t r a n s* - ビニレン

50

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；アセチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；直結基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；メチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；エチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；トリメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；テトラメチレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；ペンタメチレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；ヘキサメチレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,2-フェニ

レン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-フェニ

レン基

【0092】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-フェニ

レン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,2-シクロ

ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-シクロ

ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-シクロ

ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；cis-ビニレ

ン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；trans-ビ

ニレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；アセチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；直結基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；メチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；エチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；トリメチレン基

【0093】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；テトラメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；ペンタメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；ヘキサメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,2-フェニレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,3-フェニレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,4-フェニレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,2-シクロヘキ

サンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,3-シクロヘキ

サンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,4-シクロヘキ

サンジイル基

10

20

30

40

50

	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; c i s - ビニレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; t r a n s - ビニレン基	
ン基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; アセチレン基	
【 0 0 9 4 】		
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 直結基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; メチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; エチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; トリメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; テトラメチレン基	10
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; ペンタメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; ヘキサメチレン基	
基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 1 , 2 - フェニレン	
基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 1 , 3 - フェニレン	
基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 1 , 4 - フェニレン	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 1 , 2 - シクロヘキサンジイル基	20
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 1 , 3 - シクロヘキサンジイル基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 1 , 4 - シクロヘキサンジイル基	
【 0 0 9 5 】		
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; c i s - ビニレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; t r a n s - ビニレン基	
ン基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; アセチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; 直結基	30
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; メチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; エチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; トリメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; テトラメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; ペンタメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; ヘキサメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; 直結基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; メチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; エチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; トリメチレン基	40
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; テトラメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; ペンタメチレン基	
【 0 0 9 6 】		
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ; アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; エチル基、R <sup>13</sup> ; ヘキサメチレン基	
	R <sup>9</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> ; 水素基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; 直結基	
	R <sup>9</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> ; 水素基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; メチレン基	
	R <sup>9</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> ; 水素基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; エチレン基	
	R <sup>9</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> ; 水素基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; トリメチレン基	
ン基	R <sup>9</sup> ; アリル基、R <sup>10</sup> ; 水素基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ; メチル基、R <sup>13</sup> ; テトラメチ	50

レン基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; ペンタメチ

レン基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチ

レン基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; 直結基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; メチレン基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; エチレン基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; トリメチレ

ン基

10

【0097】

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; テトラメチ

レン基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; ペンタメチ

レン基

$R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチ

レン基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0098】

20

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 直結基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; メチレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; エチレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; トリメチレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; テトラメチレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; ペンタメチレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 2 - フェニレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 3 - フェニレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 4 - フェニレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 2 - シクロヘキサンジイル基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 3 - シクロヘキサンジイル基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 4 - シクロヘキサンジイル基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; *cis* - ビニレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; *trans* - ビニレン基

$R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; アセチレン基

30

【0099】

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 直結基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; メチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; エチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; トリメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; テトラメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; ペンタメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 1, 2 - フェニレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 1, 3 - フェニレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 1, 4 - フェニレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 1, 2 - シクロヘキサ

ンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 1, 3 - シクロヘキサ

50

## ンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-シクロヘキサ  
ンジイル基

## 【0100】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*cis*-ビニレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*trans*-ビニレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；アセチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；直結基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；メチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；エチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；トリメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；テトラメチレン

基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；ペンタメチレン  
基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；ヘキサメチレン  
基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,2-フェニ  
レン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-フェニ  
レン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-フェニ  
レン基

## 【0101】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,2-シクロ  
ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-シクロ  
ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-シクロ  
ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*cis*-ビニレン  
基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*trans*-ビ  
ニレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；アセチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；直結基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；メチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；エチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；トリメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；テトラメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；ペンタメチレン基

## 【0102】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；ヘキサメチレン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,2-フェニレン  
基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,3-フェニレン  
基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；メチル基、 $R^{13}$ ；1,4-フェニレン  
基

10

20

30

40

50



サンジイル基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；1，2 - シクロヘキ	
サンジイル基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；1，3 - シクロヘキ	
サンジイル基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；1，4 - シクロヘキ	
ン基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；c i s - ビニレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；t r a n s - ビニレ	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；アセチレン基	10
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；直結基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；メチレン基	
【0103】		
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；エチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；トリメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；テトラメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；ペンタメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；ヘキサメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；1，2 - フェニレン	20
基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；1，3 - フェニレン	
基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；1，4 - フェニレン	
基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；1，2 - シクロヘキ	
サンジイル基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；1，3 - シクロヘキ	
サンジイル基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；1，4 - シクロヘキ	
サンジイル基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；c i s - ビニレン基	30
【0104】		
ン基	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；t r a n s - ビニレ	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>11</sup> ；アリル基、R <sup>10</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；アセチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；直結基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；メチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；エチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；トリメチレン基	40
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；テトラメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；ペンタメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；メチル基、R <sup>13</sup> ；ヘキサメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；直結基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；メチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；エチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；トリメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；テトラメチレン基	
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；ペンタメチレン基	
【0105】		
	R <sup>9</sup> 、R <sup>10</sup> ；アリル基、R <sup>11</sup> 、R <sup>12</sup> ；エチル基、R <sup>13</sup> ；ヘキサメチレン基	50

- $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; 直結基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; メチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; エチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; トリメチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; テトラメチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; ペンタメチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; メチル基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチレン基 10  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; 直結基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; メチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; エチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; トリメチレン基  
**【 0 1 0 6 】**  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; テトラメチレン基  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; ペンタメチレン基 20  
 $R^9$  ; アリル基、 $R^{10}$  ; 水素基、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$  ; エチル基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチレン基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

- 【 0 1 0 7 】**  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 直結基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; メチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; エチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; トリメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; テトラメチレン基 30  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; ペンタメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 2 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 3 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 4 - フェニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 2 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 3 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; 1, 4 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; c i s - ビニレン基  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; t r a n s - ビニレン基 40  
**【 0 1 0 8 】**  
 $R^9 \sim R^{12}$  ; アリル基、 $R^{13}$  ; アセチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 直結基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; メチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; エチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; トリメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; テトラメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; ペンタメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; ヘキサメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$  ; アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$  ; 水素基、 $R^{13}$  ; 1, 2 - フェニレン基 50

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-フェニレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-フェニレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,2-シクロヘキサ  
 ンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-シクロヘキサ  
 ンジイル基

【0109】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-シクロヘキサ  
 ンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*c i s*-ビニレン基 10  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*t r a n s*-ビニレン  
 基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；アリル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；アセチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；直結基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；メチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；エチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；トリメチレン基  
 $R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；テトラメチレン  
 基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；ペンタメチレン 20  
 基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；ヘキサメチレン  
 基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,2-フェニ  
 レン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-フェニ  
 レン基

【0110】

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-フェニ  
 レン基 30

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,2-シクロ  
 ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,3-シクロ  
 ヘキサンジイル基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；1,4-シクロ  
 ヘキサンジイル基

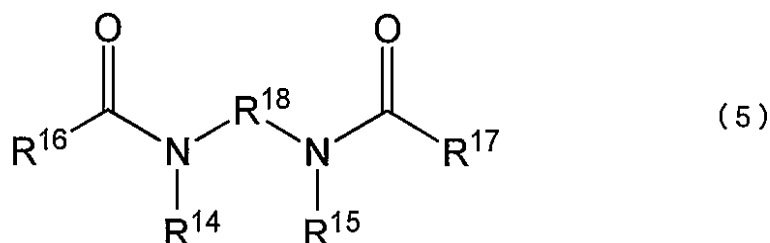
$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*c i s*-ビニレ  
 ン基

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；*t r a n s*-ビ  
 ニレン基 40

$R^9$ 、 $R^{11}$ ；プロパルギル基、 $R^{10}$ 、 $R^{12}$ ；水素基、 $R^{13}$ ；アセチレン基  
 4. ジアミンのジカルボン酸アミド

【0111】

## 【化 7】



## 【0112】

10

R<sup>14</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【0113】

R<sup>15</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基などが挙げられる。

R<sup>16</sup>及びR<sup>17</sup>としては、水素基、メチル基、エチル基、トリフルオロメチル基などが挙げられる。

20

R<sup>18</sup>としては、メチレン、エチレン、トリメチレン、テトラメチレンなどが挙げられる。

## 【0114】

R<sup>14</sup>～R<sup>18</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、R<sup>14</sup>が、アリル基又はプロパルギル基であるものが望ましく、以下の例が挙げられる。

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；水素基、R<sup>18</sup>；メチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；水素基、R<sup>18</sup>；エチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；水素基、R<sup>18</sup>；トリメチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；水素基、R<sup>18</sup>；テトラメチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；メチル基、R<sup>18</sup>；メチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；メチル基、R<sup>18</sup>；エチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；メチル基、R<sup>18</sup>；トリメチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；メチル基、R<sup>18</sup>；テトラメチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；エチル基、R<sup>18</sup>；メチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；エチル基、R<sup>18</sup>；エチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；エチル基、R<sup>18</sup>；トリメチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；エチル基、R<sup>18</sup>；テトラメチレン  
 R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；トリフルオロメチル基、R<sup>18</sup>；メチ

30

レン

40

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；トリフルオロメチル基、R<sup>18</sup>；エチレン

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；トリフルオロメチル基、R<sup>18</sup>；トリメチレン

## 【0115】

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；アリル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；トリフルオロメチル基、R<sup>18</sup>；テトラメチレン

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；プロパルギル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；水素基、R<sup>18</sup>；メチレン

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；プロパルギル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；水素基、R<sup>18</sup>；エチレン

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>；プロパルギル基、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>；水素基、R<sup>18</sup>；トリメチレン

50

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；水素基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；メチレン  
 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；エチレン  
 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；メチレン  
 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；エチレン  
 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；メチレン

# 【0116】

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；エチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；プロパルギル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

# 【0117】

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；水素基、 $R^{18}$ ；メチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；水素基、 $R^{18}$ ；エチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；水素基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；水素基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；メチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；エチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；メチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；メチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；エチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；エチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；メチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；エチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

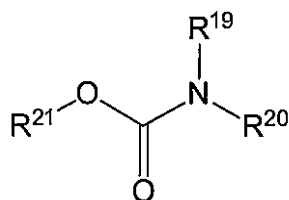
$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；トリメチレン

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ ；アリル基、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{18}$ ；テトラメチレン

# 5．鎖状カルバミン酸エステル

# 【0118】

## 【化 8】



(6)

## 【0119】

R<sup>19</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis-2-ブテニル基、trans-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

## 【0120】

R<sup>20</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis-2-ブテニル基、trans-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

## 【0121】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

R<sup>21</sup>としては、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、2,2,2-トリフルオロエチル基、アリル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシエチル、エトキシエチル、2-シアノエチル基、2-シアノ-1-(シアノメチル)エチルなどが挙げられる。

30

## 【0122】

R<sup>19</sup> ~ R<sup>21</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点からR<sup>19</sup>が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の具体例が挙げられる。

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; アリル基、R<sup>21</sup> ; メチル基

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; アリル基、R<sup>21</sup> ; エチル基

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; アリル基、R<sup>21</sup> ; シクロヘキシル基

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; アリル基、R<sup>21</sup> ; フェニル基

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; アリル基、R<sup>21</sup> ; 2,2,2-トリフルオロエチル基

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; アリル基、R<sup>21</sup> ; 2-シアノエチル基

40

R<sup>19</sup> ; プロパルギル基、R<sup>20</sup> ; プロパルギル基、R<sup>21</sup> ; メチル基

R<sup>19</sup> ; プロパルギル基、R<sup>20</sup> ; プロパルギル基、R<sup>21</sup> ; エチル基

R<sup>19</sup> ; プロパルギル基、R<sup>20</sup> ; プロパルギル基、R<sup>21</sup> ; シクロヘキシル基

R<sup>19</sup> ; プロパルギル基、R<sup>20</sup> ; プロパルギル基、R<sup>21</sup> ; フェニル基

R<sup>19</sup> ; プロパルギル基、R<sup>20</sup> ; プロパルギル基、R<sup>21</sup> ; 2,2,2-トリフル

オロエチル基

R<sup>19</sup> ; プロパルギル基、R<sup>20</sup> ; プロパルギル基、R<sup>21</sup> ; 2-シアノエチル基

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; 水素基、R<sup>21</sup> ; メチル基

R<sup>19</sup> ; アリル基、R<sup>20</sup> ; 水素基、R<sup>21</sup> ; エチル基

## 【0123】

50

$R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; フェニル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; メチル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; エチル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; フェニル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基

10

$R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2 - シアノエチル基  
 好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

## 【0124】

$R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; アリル基、 $R^{21}$  ; メチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; アリル基、 $R^{21}$  ; エチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; アリル基、 $R^{21}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; アリル基、 $R^{21}$  ; フェニル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; アリル基、 $R^{21}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; アリル基、 $R^{21}$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; メチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; エチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; フェニル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{19}$  ; アリル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; メチル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; エチル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; フェニル基  
 $R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基

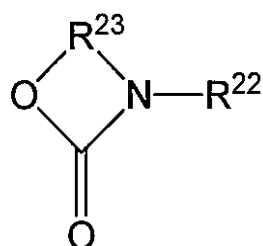
20

30

$R^{19}$  ; プロパルギル基、 $R^{20}$  ; 水素基、 $R^{21}$  ; 2 - シアノエチル基  
 6. 環状カルバミン酸エステル

## 【0125】

## 【化9】



(7)

40

## 【0126】

$R^{22}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis* - 2 - ブテニル基、*trans* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

50

## 【 0 1 2 7 】

$R^{23}$ としては、エチレン基、トリメチレン基、1 - メチルトリメチレン基、2 - メルトリメチレン基、3 - メチルトリメチレン基、2, 2 - ジメチルトリメチレン基、テトラメチレン基、1 - メチルトetraメチレン基、4 - メチルトetraメチレン基、ペンタメチレン基などが挙げられる。

$R^{22}$  及び  $R^{23}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性向上の観点から  $R^{22}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものである。

## 【 0 1 2 8 】

$R^{22}$  がアリル基であるものとして、N - アリル - 2 - オキサゾリドン、N - アリル - 1, 3 - オキサジン - 2 - オン、また  $R^{23}$  がプロパルギル基であるものとして、N - プロパルギル - 2 - オキサゾリドン、N - プロパルギル - 1, 3 - オキサジン - 2 - オンが挙げられる。

10

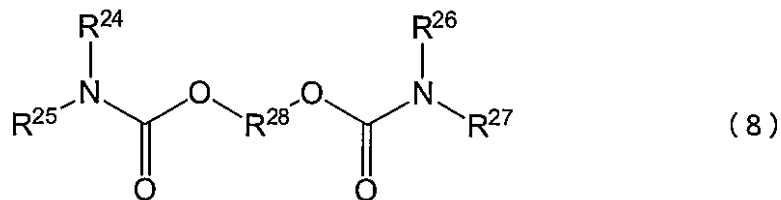
好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、N - アリル - 2 - オキサゾリドン、N - アリル - 1, 3 - オキサジン - 2 - オンが挙げられる。

## 【 0 1 2 9 】

7. ジカーバメート

## 【 0 1 3 0 】

## 【 化 1 0 】



20

## 【 0 1 3 1 】

$R^{24}$ としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

30

## 【 0 1 3 2 】

$R^{25} \sim R^{27}$ としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【 0 1 3 3 】

40

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{28}$ としては、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ヘプタメチレン基、オクタメチレン基、ノナメチレン基、デカメチレン基、ビニレン基、アセチレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - フェニレン基、1, 1' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、1, 2 - シクロヘキサンジイル基、1, 3 - シクロヘキサンジイル基、1, 4 - シクロヘキサンジイル基などが挙げられる。

50



## 【 0 1 3 4 】

$R^{24} \sim R^{28}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、 $R^{24}$  がアリル基又はプロパルギル基であるものが好ましい。

$R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; メチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; エチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; トリメチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; テトラメチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; ペンタメチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; ヘキサメチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; 1, 2 - フェニレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; 1, 3 - フェニレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; 1, 4 - フェニレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; 1, 2 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; 1, 3 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; アリル基、 $R^{28}$  ; 1, 4 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; メチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; エチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; トリメチレン基

10

## 【 0 1 3 5 】

$R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; テトラメチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; ペンタメチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; ヘキサメチレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; 1, 2 - フェニレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; 1, 3 - フェニレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; 1, 4 - フェニレン基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; 1, 2 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; 1, 3 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24} \sim R^{27}$  ; プロパルギル基、 $R^{28}$  ; 1, 4 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; メチレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; エチレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; トリメチレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; テトラメチレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; ペンタメチレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; ヘキサメチレン基

20

30

## 【 0 1 3 6 】

$R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; 1, 2 - フェニレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; 1, 3 - フェニレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; 1, 4 - フェニレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; 1, 2 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; 1, 3 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; 1, 4 - シクロヘキサンジイル基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; メチレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; エチレン基  
 $R^{24}$ 、 $R^{26}$  ; プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$  ; 水素基、 $R^{28}$  ; トリメチレン基

40

50

基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；テトラメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ペンタメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ヘキサメチレン基

## 【0137】

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-フェニレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-フェニレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-フェニレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-シクロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-シクロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-シクロヘキサンジイル基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

## 【0138】

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；メチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；エチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；トリメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；テトラメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；ペンタメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；ヘキサメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,2-フェニレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,3-フェニレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,4-フェニレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,2-シクロヘキサンジイル基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,3-シクロヘキサンジイル基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,4-シクロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；メチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；エチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；トリメチレン基

## 【0139】

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；テトラメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ペンタメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ヘキサメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-フェニレン基

基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-フェニレン基

基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-フェニレン基

基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-シクロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-シクロヘキサ  
ンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-シクロヘキサ  
ンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；メチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；エチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；トリメチレン  
基

【0140】

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；テトラメチレ  
ン基 10

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ペンタメチレ  
ン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ヘキサメチレ  
ン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-フェ  
ニレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-フェ  
ニレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-フェ  
ニレン基 20

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-シク  
ロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-シク  
ロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；プロパルギル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-シク  
ロヘキサンジイル基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

【0141】

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；メチレン基 30

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；エチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；トリメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；テトラメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；ペンタメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；ヘキサメチレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,2-フェニレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,3-フェニレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,4-フェニレン基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,2-シクロヘキサンジイル基

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,3-シクロヘキサンジイル基 40

$R^{24} \sim R^{27}$ ；アリル基、 $R^{28}$ ；1,4-シクロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；メチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；エチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；トリメチレン基

【0142】

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；テトラメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ペンタメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；ヘキサメチレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-フェニレン  
基 50

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-フェニレン基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-フェニレン基

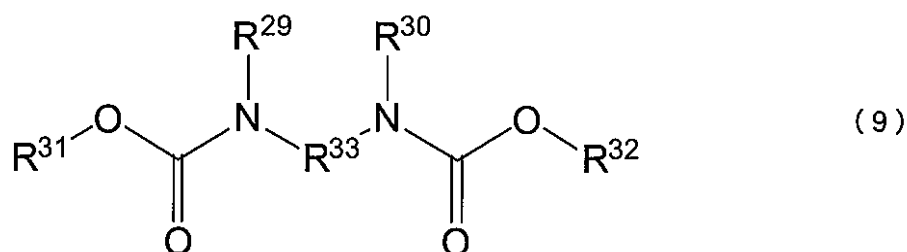
$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,2-シクロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,3-シクロヘキサンジイル基

$R^{24}$ 、 $R^{26}$ ；アリル基、 $R^{25}$ 、 $R^{27}$ ；水素基、 $R^{28}$ ；1,4-シクロヘキサンジイル基

【0143】

【化11】



【0144】

$R^{29}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0145】

$R^{30}$ としては、アリル基、プロパルギル基、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基などが挙げられる。

$R^{31}$ 及び $R^{32}$ としては、メチル基、エチル基、2,2,2-トリフルオロエチル基などが挙げられる。

$R^{33}$ としては、メチレン、エチレン、トリメチレン、テトラメチレンなどが挙げられる。

【0146】

$R^{29} \sim R^{33}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、 $R^{29}$ が、アリル基又はプロパルギル基であるものが望ましく、以下の例が挙げられる。

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

## 【0147】

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；プロパルギル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

## 【0148】

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；メチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；メチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；エチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；トリメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

## 【0149】

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；エチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；エチレン基

$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基

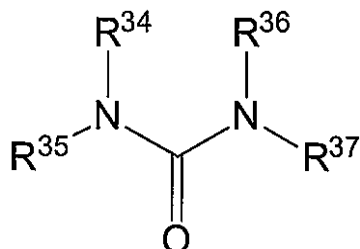
$R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；トリメチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；トリメチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；メチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；エチル基、 $R^{33}$ ；テトラメチレン基  
 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ ；アリル基、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基、  
 $R^{33}$ ；テトラメチレン基

8. 尿素

【0150】

【化12】

10



(10)

【0151】

$R^{34}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

【0152】

$R^{35} \sim R^{37}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

30

【0153】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{34} \sim R^{37}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、 $R^{34}$ がアリル基又はプロパルギル基であるものが望ましく、以下の例が挙げられる。

【0154】

40

$R^{34} \sim R^{37}$ ；アリル基

$R^{34} \sim R^{37}$ ；プロパルギル基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；アリル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；水素基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；水素基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；アリル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；アリル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；アリル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基

$R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基

50

$R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；アリル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基  
 $R^{34}$ ；アリル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；プロパルギル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基  
 $R^{34}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；アリル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基

## 【0155】

$R^{34}$ ；アリル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；プロパルギル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基  
 $R^{34}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；アリル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基  
 $R^{34}$ ；アリル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；プロパルギル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基  
 $R^{34}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基

10

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

## 【0156】

$R^{34} \sim R^{37}$ ；アリル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；アリル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；水素基  
 $R^{34}$ 、 $R^{36}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ 、 $R^{37}$ ；水素基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；アリル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基  
 $R^{34}$ ；アリル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基  
 $R^{34}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；メチル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；アリル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基  
 $R^{34}$ ；アリル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基  
 $R^{34}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；エチル基  
 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ ；アリル基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基  
 $R^{34}$ ；アリル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基  
 $R^{34}$ ；プロパルギル基、 $R^{35}$ ；水素基、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ ；プロピル基

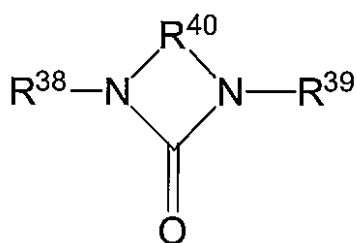
20

## 9．環状尿素

## 【0157】

30

## 【化13】



(11)

## 【0158】

$R^{38}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

40

## 【0159】

$R^{39}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、ブ

50

ロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0160】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{40}$  としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1 - メチルトリメチレン基、2 - メチルトリメチレン基、3 - メチルトリメチレン基、2, 2 - ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

10

【0161】

$R^{38} \sim R^{40}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、 $R^{38}$  がアリル基又はプロパルギル基であるものが望ましく、以下のような例が挙げられる。

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；アリル基、 $R^{40}$ ；エチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；プロパルギル基、 $R^{40}$ ；エチレン基

$R^{38}$ ；アリル基、 $R^{39}$ ；水素基、 $R^{40}$ ；エチレン基

$R^{38}$ ；プロパルギル基、 $R^{39}$ ；水素基、 $R^{40}$ ；エチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；アリル基、 $R^{40}$ ；トリメチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；プロパルギル基、 $R^{40}$ ；トリメチレン基

$R^{38}$ ；アリル基、 $R^{39}$ ；水素基、 $R^{40}$ ；トリメチレン基

20

$R^{38}$ ；プロパルギル基、 $R^{39}$ ；水素基、 $R^{40}$ ；トリメチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；アリル基、 $R^{40}$ ；2, 2 - ジメチルトリメチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；プロパルギル基、 $R^{40}$ ；2, 2 - ジメチルトリメチレン基

$R^{38}$ ；アリル基、 $R^{39}$ ；水素基、 $R^{40}$ ；2, 2 - ジメチルトリメチレン基

$R^{38}$ ；プロパルギル基、 $R^{39}$ ；水素基、 $R^{40}$ ；2, 2 - ジメチルトリメチレン

基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0162】

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；アリル基、 $R^{40}$ ；エチレン基

30

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；プロパルギル基、 $R^{40}$ ；エチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；アリル基、 $R^{40}$ ；トリメチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；プロパルギル基、 $R^{40}$ ；トリメチレン基

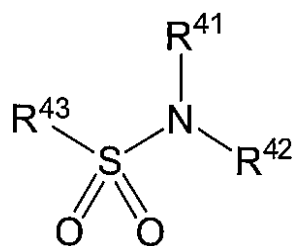
$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；アリル基、 $R^{40}$ ；2, 2 - ジメチルトリメチレン基

$R^{38}$ 、 $R^{39}$ ；プロパルギル基、 $R^{40}$ ；2, 2 - ジメチルトリメチレン基

10. スルホンアミド

【0163】

【化14】



(12)

40

【0164】

$R^{41}$  としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オ

50



クチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0165】

$R^{42}$ としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

【0166】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{43}$ としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、t - ブチル基、シクロヘキシル基、トリフルオロメチル基、2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、ペンタフルオロエチル基、ヘプタフルオロプロピル基、ビニル基、アリル基、フェニル基、ノナフルオロブチル基、4 - トリル基、3 - トリル基、2 - トリル基などが挙げられる。

20

【0167】

$R^{41} \sim R^{43}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から  $R^{41}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものが好ましい。具体例として以下のものが挙げられる。

$R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；メチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；エチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；シクロヘキシル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；トリフルオロメチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；ビニル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；アリル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；フェニル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；4 - トリル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；メチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；エチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；シクロヘキシル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；トリフルオロメチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；ビニル基

30

【0168】

$R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；アリル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；フェニル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；プロパルギル基、 $R^{43}$ ；4 - トリル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；メチル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；エチル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；シクロヘキシル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；トリフルオロメチル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；ビニル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；アリル基  
 $R^{41}$ ；アリル基、 $R^{42}$ ；水素基、 $R^{43}$ ；フェニル基

40

50

$R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; 4 - トリル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; メチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; エチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; 2 , 2 , 2 - トリフルオロエチル基

ル基

$R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; ビニル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; アリル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; フェニル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; 4 - トリル基

10

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【 0 1 6 9 】

$R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; メチル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; エチル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; 2 , 2 , 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; ビニル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; アリル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; フェニル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; 4 - トリル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; メチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; エチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; 2 , 2 , 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; ビニル基

20

【 0 1 7 0 】

$R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; アリル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; フェニル基  
 $R^{4\ 1}$  ; アリル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; 4 - トリル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; メチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; エチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; 2 , 2 , 2 - トリフルオロエチル基

30

ル基

$R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; ビニル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; アリル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; フェニル基  
 $R^{4\ 1}$  ; プロパルギル基、 $R^{4\ 2}$  ; 水素基、 $R^{4\ 3}$  ; 4 - トリル基

40

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

【 0 1 7 1 】

$R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; メチル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; エチル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; トリフルオロメチル基  
 $R^{4\ 1}$  、 $R^{4\ 2}$  ; アリル基、 $R^{4\ 3}$  ; 2 , 2 , 2 - トリフルオロエチル基

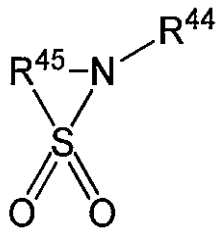
50

$R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；ビニル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；アリル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；フェニル基  
 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ ；アリル基、 $R^{43}$ ；4-トリル基

# 11. スルタム

【0172】

【化15】



(13)

10

【0173】

$R^{44}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

【0174】

$R^{45}$ としては、エチレン基、トリメチレン基、1-メチルトリメチレン基、2-メチルトリメチレン基、3-メチルトリメチレン基、2,2-ジメチルトリメチレン基、テトラメチレン基、1-メチルテトラメチレン基、4-メチルテトラメチレン基、ペンタメチレン基などが挙げられる。

$R^{44}$ 及び $R^{45}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から $R^{44}$ が、アリル基又はプロパルギル基であるものが好ましく、以下の例が挙げられる。

【0175】

$R^{44}$ ；アリル基、 $R^{45}$ ；トリメチレン基  
 $R^{44}$ ；アリル基、 $R^{45}$ ；テトラメチレン基  
 $R^{44}$ ；アリル基、 $R^{45}$ ；ペンタメチレン基  
 $R^{44}$ ；プロパルギル基、 $R^{45}$ ；トリメチレン基  
 $R^{44}$ ；プロパルギル基、 $R^{45}$ ；テトラメチレン基  
 $R^{44}$ ；プロパルギル基、 $R^{45}$ ；ペンタメチレン基

30

より好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0176】

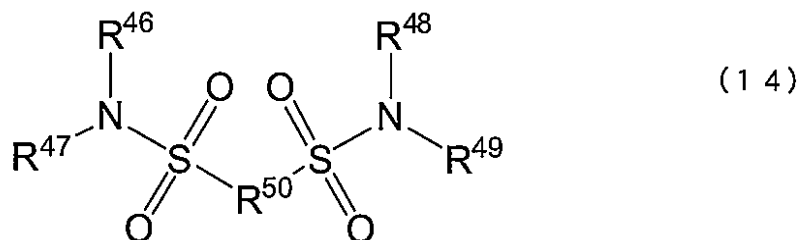
$R^{44}$ ；アリル基、 $R^{45}$ ；トリメチレン基  
 $R^{44}$ ；アリル基、 $R^{45}$ ；テトラメチレン基  
 $R^{44}$ ；プロパルギル基、 $R^{45}$ ；トリメチレン基  
 $R^{44}$ ；プロパルギル基、 $R^{45}$ ；テトラメチレン基

40

# 12. ジスルホン酸アミド

【0177】

## 【化 16】



## 【0178】

R<sup>46</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

## 【0179】

R<sup>47</sup>~R<sup>49</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

## 【0180】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

R<sup>50</sup>としては、直結基、メチレン基、エチレン基、トリメチレン基、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ヘプタメチレン基、オクタメチレン基、ノナメチレン基、デカメチレン基、ピニレン基、アセチレン基、1,2-フェニレン基、1,3-フェニレン基、1,4-フェニレン基、4,4'-ビフェニレン基、1,2-シクロヘキサンジイル基、1,3-シクロヘキサンジイル基、1,4-シクロヘキサンジイル基などが挙げられる。

30

## 【0181】

R<sup>46</sup>~R<sup>50</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点からR<sup>46</sup>が、アリル基又はプロパルギル基であるものが好ましく、以下の具体例が挙げられる。

- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；アリル基、R<sup>50</sup>；直結基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；アリル基、R<sup>50</sup>；メチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；アリル基、R<sup>50</sup>；エチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；アリル基、R<sup>50</sup>；トリメチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；アリル基、R<sup>50</sup>；テトラメチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；アリル基、R<sup>50</sup>；ペンタメチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；アリル基、R<sup>50</sup>；ヘキサメチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；プロパルギル基、R<sup>50</sup>；直結基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；プロパルギル基、R<sup>50</sup>；メチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；プロパルギル基、R<sup>50</sup>；エチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；プロパルギル基、R<sup>50</sup>；トリメチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；プロパルギル基、R<sup>50</sup>；テトラメチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；プロパルギル基、R<sup>50</sup>；ペンタメチレン基
- R<sup>46</sup>~R<sup>49</sup>；プロパルギル基、R<sup>50</sup>；ヘキサメチレン基

40

50

R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；直結基	
【0182】	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；メチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；エチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；トリメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；テトラメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；ペンタメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；ヘキサメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；プロパルギル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；直結基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；プロパルギル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；メチレン基	10
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；プロパルギル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；エチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；プロパルギル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；トリメチレン基	
基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；プロパルギル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；テトラメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；プロパルギル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；ペンタメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；プロパルギル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；ヘキサメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；メチル基、R <sup>50</sup> ；直結基	20
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；メチル基、R <sup>50</sup> ；メチレン基	
【0183】	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；メチル基、R <sup>50</sup> ；エチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；メチル基、R <sup>50</sup> ；トリメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；メチル基、R <sup>50</sup> ；テトラメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；メチル基、R <sup>50</sup> ；ペンタメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；メチル基、R <sup>50</sup> ；ヘキサメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；エチル基、R <sup>50</sup> ；直結基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；エチル基、R <sup>50</sup> ；メチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；エチル基、R <sup>50</sup> ；エチレン基	30
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；エチル基、R <sup>50</sup> ；トリメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；エチル基、R <sup>50</sup> ；テトラメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；エチル基、R <sup>50</sup> ；ペンタメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；エチル基、R <sup>50</sup> ；ヘキサメチレン基	
好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。	
【0184】	
R <sup>46</sup> ～R <sup>49</sup> ；アリル基、R <sup>50</sup> ；直結基	
R <sup>46</sup> ～R <sup>49</sup> ；アリル基、R <sup>50</sup> ；メチレン基	
R <sup>46</sup> ～R <sup>49</sup> ；アリル基、R <sup>50</sup> ；エチレン基	40
R <sup>46</sup> ～R <sup>49</sup> ；アリル基、R <sup>50</sup> ；トリメチレン基	
R <sup>46</sup> ～R <sup>49</sup> ；アリル基、R <sup>50</sup> ；テトラメチレン基	
R <sup>46</sup> ～R <sup>49</sup> ；アリル基、R <sup>50</sup> ；ペンタメチレン基	
R <sup>46</sup> ～R <sup>49</sup> ；アリル基、R <sup>50</sup> ；ヘキサメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；直結基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；メチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；エチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；トリメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；テトラメチレン基	
R <sup>46</sup> 、R <sup>48</sup> ；アリル基、R <sup>47</sup> 、R <sup>49</sup> ；水素基、R <sup>50</sup> ；ペンタメチレン基	50

$R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；アリル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；ヘキサメチレン基  
 $R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；プロパルギル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；直結基

## 【0185】

$R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；プロパルギル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；メチレン基  
 $R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；プロパルギル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；エチレン基  
 $R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；プロパルギル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；トリメチレン基

$R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；プロパルギル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；テトラメチレン基

$R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；プロパルギル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；ペンタメチレン基 10

$R^{46}$ 、 $R^{48}$ ；プロパルギル基、 $R^{47}$ 、 $R^{49}$ ；水素基、 $R^{50}$ ；ヘキサメチレン基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

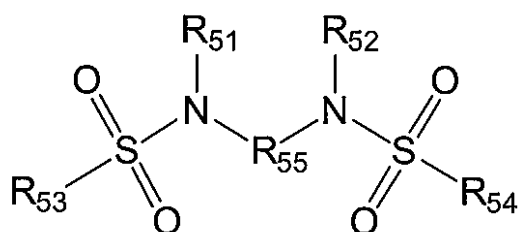
## 【0186】

$R^{46} \sim R^{49}$ ；アリル基、 $R^{50}$ ；直結基  
 $R^{46} \sim R^{49}$ ；アリル基、 $R^{50}$ ；メチレン基  
 $R^{46} \sim R^{49}$ ；アリル基、 $R^{50}$ ；エチレン基  
 $R^{46} \sim R^{49}$ ；アリル基、 $R^{50}$ ；トリメチレン基  
 $R^{46} \sim R^{49}$ ；アリル基、 $R^{50}$ ；テトラメチレン基  
 $R^{46} \sim R^{49}$ ；アリル基、 $R^{50}$ ；ペンタメチレン基  
 $R^{46} \sim R^{49}$ ；アリル基、 $R^{50}$ ；ヘキサメチレン基

20

## 【0187】

## 【化17】



(15)

30

## 【0188】

$R^{51}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【0189】

$R^{52}$ としては、アリル基、プロパルギル基、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基などが挙げられる。 40

$R^{53}$ 及び $R^{54}$ としては、メチル基、エチル基、トリフルオロメチル基などが挙げられる。

$R^{55}$ としては、メチレン、エチレン、トリメチレン、テトラメチレンなどが挙げられる。

## 【0190】

$R^{51} \sim R^{55}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、 $R^{51}$ が、アリル基又はプロパルギル基であるものが望ましく、以下の例が挙げられる。

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；メチレン  
 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；エチレン

50

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；トリメチレン  
 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；テトラメチレン  
 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；メチレン  
 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；エチレン  
 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；トリメチレン  
 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；テトラメチレン  
 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；メチ

レン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；エチ

レン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；トリ

メチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；テト

ラメチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；メチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；エチレン

【0191】

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；トリメチレ

ン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；テトラメチ

レン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；メチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；エチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；トリメチレ

ン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；テトラメチ

レン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$

；メチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$

；エチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$

；トリメチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；プロパルギル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$

；テトラメチレン

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、  
 以下のものが挙げられる。

【0192】

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；メチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；エチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；トリメチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；メチル基、 $R^{55}$ ；テトラメチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；メチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；エチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；トリメチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；エチル基、 $R^{55}$ ；テトラメチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；メチ

レン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；エチ

レン

10

20

30

40

50

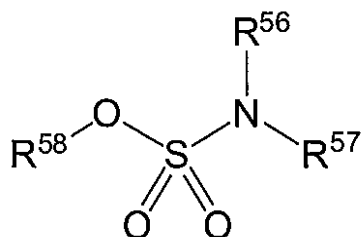
$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；トリメチレン

$R^{51}$ 、 $R^{52}$ ；アリル基、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ ；トリフルオロメチル基、 $R^{55}$ ；テトラメチレン

### 13．スルファミン酸エステル

【0193】

【化18】



(16)

10

【0194】

$R^{56}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

【0195】

$R^{57}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0196】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

30

$R^{58}$ としては、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、2,2,2-トリフルオロエチル基、アリル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシエチル、エトキシエチル、2-シアノエチル基、2-シアノ-1-(シアノメチル)エチルなどが挙げられる。

【0197】

$R^{56} \sim R^{58}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から $R^{56}$ が、アリル基又はプロパルギル基であるものである。以下に具体例を挙げる。

$R^{56}$ ；アリル基、 $R^{57}$ ；アリル基、 $R^{58}$ ；メチル基

$R^{56}$ ；アリル基、 $R^{57}$ ；アリル基、 $R^{58}$ ；エチル基

$R^{56}$ ；アリル基、 $R^{57}$ ；アリル基、 $R^{58}$ ；シクロヘキシル基

$R^{56}$ ；アリル基、 $R^{57}$ ；アリル基、 $R^{58}$ ；フェニル基

$R^{56}$ ；アリル基、 $R^{57}$ ；アリル基、 $R^{58}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基

$R^{56}$ ；アリル基、 $R^{57}$ ；アリル基、 $R^{58}$ ；2-シアノエチル基

$R^{56}$ ；プロパルギル基、 $R^{57}$ ；プロパルギル基、 $R^{58}$ ；メチル基

$R^{56}$ ；プロパルギル基、 $R^{57}$ ；プロパルギル基、 $R^{58}$ ；エチル基

40

50



R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 8</sup> ; シクロヘキシル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 8</sup> ; フェニル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 8</sup> ; 2, 2, 2 - トリフル

オロエチル基

R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 8</sup> ; 2 - シアノエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; メチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; エチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; シクロヘキシル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; フェニル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2 - シアノエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; メチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; エチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; シクロヘキシル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; フェニル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチ

ル基

R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2 - シアノエチル基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、  
 以下のものが挙げられる。

【0198】

R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; メチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; エチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; シクロヘキシル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; フェニル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; 2 - シアノエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; メチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; エチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; シクロヘキシル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; フェニル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2 - シアノエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; メチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; エチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; シクロヘキシル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; フェニル基  
 R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチ

ル基

R<sup>5 6</sup> ; プロパルギル基、R<sup>5 7</sup> ; 水素基、R<sup>5 8</sup> ; 2 - シアノエチル基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

【0199】

R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; メチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; エチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; シクロヘキシル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; フェニル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 R<sup>5 6</sup> ; アリル基、R<sup>5 7</sup> ; アリル基、R<sup>5 8</sup> ; 2 - シアノエチル基

14. 環状スルファミン酸エステル

【0200】

10

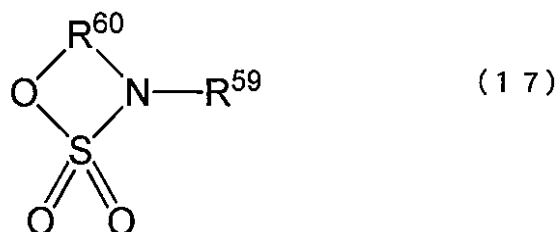
20

30

40

50

## 【化 19】



## 【0201】

R<sup>59</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis-2-ブテニル基、trans-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

## 【0202】

R<sup>60</sup>としては、エチレン基、トリメチレン基、1-メチルトリメチレン基、2-メチルトリメチレン基、3-メチルトリメチレン基、2,2-ジメチルトリメチレン基、テトラメチレン基、1-メチルテトラメチレン基、4-メチルテトラメチレン基、ペンタメチレン基などが挙げられる。

20

R<sup>59</sup> ~ R<sup>60</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性向上の観点からR<sup>59</sup>が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下に具体例を挙げる。

## 【0203】

R<sup>59</sup> ; アリル基、R<sup>60</sup> ; エチレン基  
 R<sup>59</sup> ; アリル基、R<sup>60</sup> ; トリメチレン基  
 R<sup>59</sup> ; アリル基、R<sup>60</sup> ; テトラメチレン基  
 R<sup>59</sup> ; プロパルギル基、R<sup>60</sup> ; エチレン基  
 R<sup>59</sup> ; プロパルギル基、R<sup>60</sup> ; トリメチレン基  
 R<sup>59</sup> ; プロパルギル基、R<sup>60</sup> ; テトラメチレン基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

30

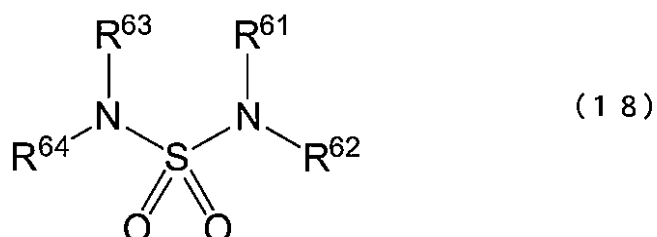
## 【0204】

R<sup>59</sup> ; アリル基、R<sup>60</sup> ; エチレン基  
 R<sup>59</sup> ; アリル基、R<sup>60</sup> ; トリメチレン基  
 R<sup>59</sup> ; プロパルギル基、R<sup>60</sup> ; エチレン基  
 R<sup>59</sup> ; プロパルギル基、R<sup>60</sup> ; トリメチレン基

## 15. スルファミド

## 【0205】

## 【化 20】



40

## 【0206】

R<sup>61</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis-2-ブテニル基、trans-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基

50

、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

#### 【0207】

$R^{62} \sim R^{64}$  としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられこの中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

#### 【0208】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{61} \sim R^{64}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、 $R^{61}$  がアリル基又はプロパルギル基であるものが望ましく、以下の例が挙げられる。

#### 【0209】

$R^{61} \sim R^{64}$  ; アリル基

20

$R^{61} \sim R^{64}$  ; プロパルギル基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; アリル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; 水素基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; 水素基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; アリル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; アリル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; エチル基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; エチル基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; アリル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; プロピル基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; プロピル基

$R^{61}$ 、 $R^{62}$  ; アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

30

$R^{61}$  ; アリル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

$R^{61}$ 、 $R^{62}$  ; プロパルギル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

$R^{61}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

$R^{61}$ 、 $R^{62}$  ; アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; エチル基

$R^{61}$  ; アリル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; エチル基

$R^{61}$ 、 $R^{62}$  ; プロパルギル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; エチル基

$R^{61}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; エチル基

$R^{61}$ 、 $R^{62}$  ; アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; プロピル基

$R^{61}$  ; アリル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; プロピル基

$R^{61}$ 、 $R^{62}$  ; プロパルギル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; プロピル基

40

$R^{61}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; プロピル基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

#### 【0210】

$R^{61} \sim R^{64}$  ; アリル基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; アリル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; 水素基

$R^{61}$ 、 $R^{63}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$ 、 $R^{64}$  ; 水素基

$R^{61}$ 、 $R^{62}$  ; アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

$R^{61}$  ; アリル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

$R^{61}$  ; プロパルギル基、 $R^{62}$  ; 水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$  ; メチル基

50

$R^{61}$ 、 $R^{62}$ ；アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；エチル基  
 $R^{61}$ ；アリル基、 $R^{62}$ ；水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；エチル基  
 $R^{61}$ ；プロパルギル基、 $R^{62}$ ；水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；エチル基  
 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ ；アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；プロピル基  
 $R^{61}$ ；アリル基、 $R^{62}$ ；水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；プロピル基  
 $R^{61}$ ；プロパルギル基、 $R^{62}$ ；水素基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；プロピル基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

【0211】

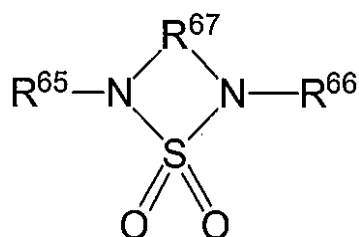
$R^{61} \sim R^{64}$ ；アリル基  
 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ ；アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；メチル基  
 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ ；アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；エチル基  
 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ ；アリル基、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ ；プロピル基

10

16．環状スルファミド

【0212】

【化21】



(19)

20

【0213】

$R^{65}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0214】

30

$R^{66}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられこの中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0215】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

40

$R^{67}$ としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1-メチルトリメチレン基、2-メチルトリメチレン基、3-メチルトリメチレン基、2,2-ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

【0216】

$R^{65} \sim R^{67}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から、 $R^{65}$ がアリル基又はプロパルギル基であるものが望ましく、以下の具体例が挙げられる。

$R^{65}$ 、 $R^{66}$ ；アリル基、 $R^{67}$ ；エチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$ ；プロパルギル基、 $R^{67}$ ；エチレン基  
 $R^{65}$ ；アリル基、 $R^{66}$ ；水素基、 $R^{67}$ ；エチレン基

50

$R^{65}$  ; プロパルギル基、 $R^{66}$  ; 水素基、 $R^{67}$  ; エチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; アリル基、 $R^{67}$  ; トリメチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; プロパルギル基、 $R^{67}$  ; トリメチレン基  
 $R^{65}$  ; アリル基、 $R^{66}$  ; 水素基、 $R^{67}$  ; トリメチレン基  
 $R^{65}$  ; プロパルギル基、 $R^{66}$  ; 水素基、 $R^{67}$  ; トリメチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; アリル基、 $R^{67}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; プロパルギル基、 $R^{67}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基  
 $R^{65}$  ; アリル基、 $R^{66}$  ; 水素基、 $R^{67}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基  
 $R^{65}$  ; プロパルギル基、 $R^{66}$  ; 水素基、 $R^{67}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン

基

10

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

## 【0217】

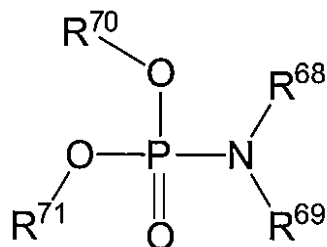
$R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; アリル基、 $R^{67}$  ; エチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; プロパルギル基、 $R^{67}$  ; エチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; アリル基、 $R^{67}$  ; トリメチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; プロパルギル基、 $R^{67}$  ; トリメチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; アリル基、 $R^{67}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基  
 $R^{65}$ 、 $R^{66}$  ; プロパルギル基、 $R^{67}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基

17. リン酸モノアミド

20

## 【0218】

## 【化22】



(20)

30

## 【0219】

$R^{68}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis* - 2 - ブテニル基、*trans* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【0220】

$R^{69}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis* - 2 - ブテニル基、*trans* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

40

## 【0221】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{70}$ 、 $R^{71}$  としては、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基

50

、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、2, 2, 2-トリフルオロエチル基、アリル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシエチル、エトキシエチル、2-シアノエチル基などが挙げられる。

#### 【0222】

$R^{68} \sim R^{71}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から  $R^{68}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の具体例が挙げられる。

- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2-トリフルオロエチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2-シアノエチル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; プロパルギル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; プロパルギル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; プロパルギル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; プロパルギル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; プロパルギル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2-トリフルオロエチル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; プロパルギル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2-シアノエチル基

#### 【0223】

- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2-トリフルオロエチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2-シアノエチル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基
- $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2-トリフルオロエチル基

$R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2-シアノエチル基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

#### 【0224】

- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2-トリフルオロエチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2-シアノエチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基
- $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基

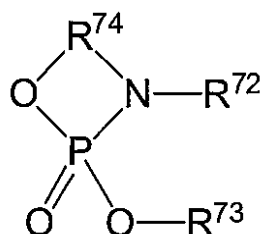
$R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2 - シアノエチル基  
 $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基  
 $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基  
 $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基  
 $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2 - トリフル  
 オロエチル基  
 $R^{68}$  ; プロパルギル基、 $R^{69}$  ; 水素基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2 - シアノエチル基  
 更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

## 【0225】

$R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; メチル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; エチル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; シクロヘキシル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; フェニル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロ  
 エチル基  
 $R^{68}$  ; アリル基、 $R^{69}$  ; アリル基、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$  ; 2 - シアノエチル基  
 18. 環状リン酸モノアミド

## 【0226】

## 【化23】



(21)

## 【0227】

$R^{72}$  としては、アリル基、プロパルギル基、cis - 2 - ブテニル基、trans - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【0228】

$R^{73}$  としては、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、t - ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、アリル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシエチル、エトキシエチル、2 - シアノエチル基、2 - シアノ - 1 - (シアノメチル) エチルなどが挙げられる。

## 【0229】

$R^{74}$  としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1 - メチルトリメチレン基、2 - メチルトリメチレン基、3 - メチルトリメチレン基、2, 2 - ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

$R^{72} \sim R^{74}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から  $R^{72}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

## 【 0 2 3 0 】

$R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基  
 $R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基  
 $R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; トリメチレン基  
 $R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; トリメチレン基  
 $R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基  
 $R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; トリメチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; トリメチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; 2, 2 - ジメチルトリメチレン基

10

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

## 【 0 2 3 1 】

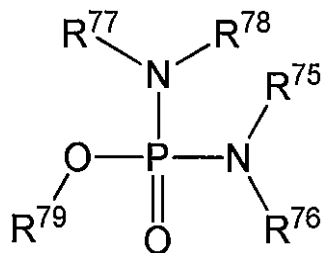
$R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基  
 $R^{72}$  ; アリル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; メチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基  
 $R^{72}$  ; プロパルギル基、 $R^{73}$  ; エチル基、 $R^{74}$  ; エチレン基

20

19. リン酸ジアミド

## 【 0 2 3 2 】

## 【 化 2 4 】



(22)

30

## 【 0 2 3 3 】

$R^{75}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis* - 2 - ブテニル基、*trans* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

40

## 【 0 2 3 4 】

$R^{76} \sim R^{78}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis* - 2 - ブテニル基、*trans* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【 0 2 3 5 】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、

50



シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{79}$ としては、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、アリル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシエチル、エトキシエチル、2 - シアノエチル基などが挙げられる。

【0236】

$R^{75} \sim R^{79}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から  $R^{75}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下に具体例を示す。

$R^{75} \sim R^{78}$  ; アリル基、 $R^{79}$  ; メチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; アリル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; メチル基

$R^{75} \sim R^{78}$  ; プロパルギル基、 $R^{79}$  ; メチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; プロパルギル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; メチル基

$R^{75} \sim R^{78}$  ; アリル基、 $R^{79}$  ; エチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; アリル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; エチル基

$R^{75} \sim R^{78}$  ; プロパルギル基、 $R^{79}$  ; エチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; プロパルギル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; エチル基

$R^{75} \sim R^{78}$  ; アリル基、 $R^{79}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; アリル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基

$R^{75} \sim R^{78}$  ; プロパルギル基、 $R^{79}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; プロパルギル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; 2, 2, 2 -

トリフルオロエチル基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0237】

$R^{75} \sim R^{78}$  ; アリル基、 $R^{79}$  ; メチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; アリル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; メチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; プロパルギル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; メチル基

$R^{75} \sim R^{78}$  ; アリル基、 $R^{79}$  ; エチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; アリル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; エチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; プロパルギル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; エチル基

$R^{75} \sim R^{78}$  ; アリル基、 $R^{79}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基

$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; アリル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基

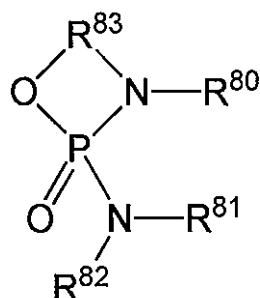
$R^{75}$ 、 $R^{77}$  ; プロパルギル基、 $R^{76}$ 、 $R^{78}$  ; 水素基、 $R^{79}$  ; 2, 2, 2 -

トリフルオロエチル基

20. 環状リン酸ジアミド

【0238】

【化25】



(23)

10

20

30

40

50

## 【 0 2 3 9 】

$R^{80}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*c i s* - 2 - ブテニル基、*t r a n s* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

## 【 0 2 4 0 】

$R^{81}$ 、 $R^{82}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*c i s* - 2 - ブテニル基、*t r a n s* - 2 - ブテニル基、3 - ブテニル基、2 - ブチニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基、5 - ヘキセニル基、5 - ヘキシニル基、7 - オクテニル基、7 - オクチニル基、9 - デセニル基、9 - デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3 - ブテニル基、3 - ブチニル基、4 - ペンテニル基、4 - ペンチニル基などの末端に炭素 - 炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

## 【 0 2 4 1 】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{83}$ としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1 - メチルトリメチレン基、2 - メチルトリメチレン基、3 - メチルトリメチレン基、2, 2 - ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

20

## 【 0 2 4 2 】

$R^{80} \sim R^{83}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から $R^{80}$ が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下に具体例を挙げる。

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; メチル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; プロパルギル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; メチル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; エチル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; プロパルギル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; エチル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; アリル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

30

$R^{80}$  ; プロパルギル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; アリル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; プロパルギル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; プロパルギル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; プロパルギル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$  ; アリル基、 $R^{82}$  ; 水素基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; プロパルギル基、 $R^{81}$  ; アリル基、 $R^{82}$  ; 水素基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$  ; プロパルギル基、 $R^{82}$  ; 水素基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; プロパルギル基、 $R^{81}$  ; プロパルギル基、 $R^{82}$  ; 水素基、 $R^{83}$  ; エチレン基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

40

## 【 0 2 4 3 】

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; メチル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

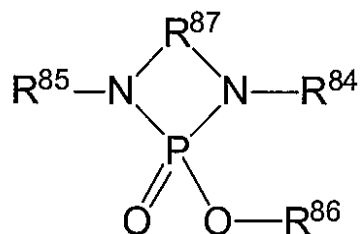
$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; エチル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  ; アリル基、 $R^{83}$  ; エチレン基

$R^{80}$  ; アリル基、 $R^{81}$  ; アリル基、 $R^{82}$  ; 水素基、 $R^{83}$  ; エチレン基

## 【 0 2 4 4 】

## 【化 2 6】



(24)

## 【0245】

R<sup>84</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

## 【0246】

R<sup>85</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

## 【0247】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

R<sup>86</sup>としては、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、2,2,2-トリフルオロエチル基、アリル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシエチル、エトキシエチル、2-シアノエチル基などが挙げられる。

30

## 【0248】

R<sup>87</sup>としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1-メチルトリメチレン基、2-メチルトリメチレン基、3-メチルトリメチレン基、2,2-ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

R<sup>84</sup>~R<sup>87</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点からR<sup>84</sup>が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下に具体例を挙げる。

## 【0249】

R<sup>84</sup>、R<sup>85</sup>；アリル基、R<sup>86</sup>；メチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

40

R<sup>84</sup>、R<sup>85</sup>；プロパルギル基、R<sup>86</sup>；メチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

R<sup>84</sup>；アリル基、R<sup>85</sup>；水素基、R<sup>86</sup>；メチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

R<sup>84</sup>；プロパルギル基、R<sup>85</sup>；水素基、R<sup>86</sup>；メチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

R<sup>84</sup>、R<sup>85</sup>；アリル基、R<sup>86</sup>；エチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

R<sup>84</sup>、R<sup>85</sup>；プロパルギル基、R<sup>86</sup>；エチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

R<sup>84</sup>；アリル基、R<sup>85</sup>；水素基、R<sup>86</sup>；エチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

R<sup>84</sup>；プロパルギル基、R<sup>85</sup>；水素基、R<sup>86</sup>；エチル基、R<sup>87</sup>；エチレン基

R<sup>84</sup>、R<sup>85</sup>；アリル基、R<sup>86</sup>；2,2,2-トリフルオロエチル基、R<sup>87</sup>；

エチレン基

R<sup>84</sup>、R<sup>85</sup>；プロパルギル基、R<sup>86</sup>；2,2,2-トリフルオロエチル基、R

50

$R^{87}$  ; エチレン基

$R^{84}$  ; アリル基、 $R^{85}$  ; 水素基、 $R^{86}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

$R^{84}$  ; プロパルギル基、 $R^{85}$  ; 水素基、 $R^{86}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0250】

$R^{84}$ 、 $R^{85}$  ; アリル基、 $R^{86}$  ; メチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

$R^{84}$  ; アリル基、 $R^{85}$  ; 水素基、 $R^{86}$  ; メチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

$R^{84}$ 、 $R^{85}$  ; アリル基、 $R^{86}$  ; エチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

$R^{84}$  ; アリル基、 $R^{85}$  ; 水素基、 $R^{86}$  ; エチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

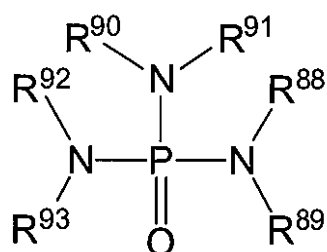
$R^{84}$ 、 $R^{85}$  ; アリル基、 $R^{86}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

$R^{84}$  ; アリル基、 $R^{85}$  ; 水素基、 $R^{86}$  ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{87}$  ; エチレン基

21. リン酸トリアミド

【0251】

【化27】



(25)

【0252】

$R^{88}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0253】

$R^{89} \sim R^{93}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0254】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{88} \sim R^{93}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から  $R^{88}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

【0255】

$R^{88} \sim R^{93}$  ; アリル基

- $R^{88}$ 、 $R^{90}$ 、 $R^{92}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ 、 $R^{93}$ ；水素基  
 $R^{88} \sim R^{93}$ ；プロパルギル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ 、 $R^{92}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ 、 $R^{93}$ ；水素基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；アリル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ ；アリル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88} \sim R^{91}$ ；アリル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；プロパルギル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88} \sim R^{91}$ ；プロパルギル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 ル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；アリル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ ；アリル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88} \sim R^{91}$ ；アリル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；プロパルギル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88} \sim R^{91}$ ；プロパルギル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；エチル基  
 チル基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0256】

- $R^{88} \sim R^{93}$ ；アリル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ 、 $R^{92}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ 、 $R^{93}$ ；水素基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ 、 $R^{92}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ 、 $R^{93}$ ；水素基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；アリル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ ；アリル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88} \sim R^{91}$ ；アリル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 ル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；アリル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ ；アリル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88} \sim R^{91}$ ；アリル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；プロパルギル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；エチル基  
 チル基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

【0257】

- $R^{88} \sim R^{93}$ ；アリル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ 、 $R^{92}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ 、 $R^{93}$ ；水素基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；アリル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ ；アリル基、 $R^{89}$ ；水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88} \sim R^{91}$ ；アリル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{90}$ ；アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$ ；水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ ；メチル基  
 $R^{88}$ 、 $R^{89}$ ；アリル基、 $R^{90} \sim R^{93}$ ；エチル基

$R^{88}$  ; アリル基、 $R^{89}$  ; 水素基、 $R^{90} \sim R^{93}$  ; エチル基

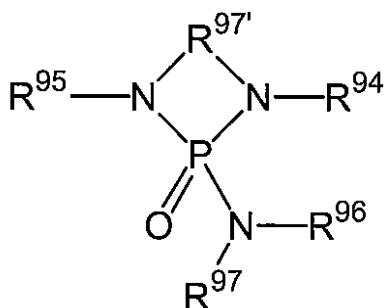
$R^{88} \sim R^{91}$  ; アリル基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$  ; エチル基

$R^{88}$ 、 $R^{90}$  ; アリル基、 $R^{89}$ 、 $R^{91}$  ; 水素基、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$  ; エチル基

## 22. 環状リン酸トリアミド

【0258】

【化28】



(26)

10

【0259】

$R^{94}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

【0260】

$R^{95} \sim R^{97}$  としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0261】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

30

$R^{97'}$  としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1-メチルトリメチレン基、2-メチルトリメチレン基、3-メチルトリメチレン基、2,2-ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

【0262】

$R^{94} \sim R^{97'}$  の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から  $R^{94}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

40

$R^{94}$ 、 $R^{95}$  ; アリル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$  ; メチル基、 $R^{97'}$  ; エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$  ; プロパルギル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$  ; メチル基、 $R^{97'}$  ; エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$  ; アリル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$  ; エチル基、 $R^{97'}$  ; エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$  ; プロパルギル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$  ; エチル基、 $R^{97'}$  ; エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$  ; アリル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$  ; アリル基、 $R^{97'}$  ; エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$  ; プロパルギル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$  ; アリル基、 $R^{97'}$  ; エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$  ; アリル基、 $R^{96}$  ; アリル基、 $R^{97}$  ; 水素基、 $R^{97'}$  ; エチレン基

50

ン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$ ；プロパルギル基、 $R^{96}$ ；アリル基、 $R^{97}$ ；水素基、 $R^{97'}$ ；  
エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$ ；アリル基、 $R^{96}$ ；プロパルギル基、 $R^{97}$ ；水素基、 $R^{97'}$ ；  
エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$ ；プロパルギル基、 $R^{96}$ ；プロパルギル基、 $R^{97}$ ；水素基、 $R^{97'}$ ；  
エチレン基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、  
以下のものが挙げられる。

【0263】

$R^{94}$ 、 $R^{95}$ ；アリル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$ ；メチル基、 $R^{97'}$ ；エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$ ；アリル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$ ；エチル基、 $R^{97'}$ ；エチレン基

$R^{94}$ 、 $R^{95}$ ；アリル基、 $R^{96}$ 、 $R^{97}$ ；アリル基、 $R^{97'}$ ；エチレン基

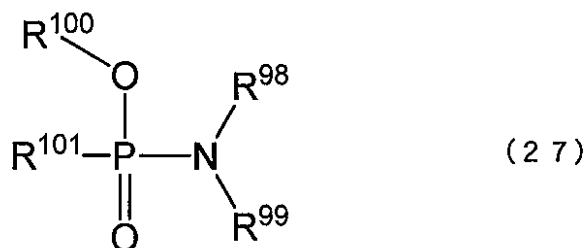
$R^{94}$ 、 $R^{95}$ ；アリル基、 $R^{96}$ ；アリル基、 $R^{97}$ ；水素基、 $R^{97'}$ ；エチレ

ン基

23．ホスホン酸モノアミド

【0264】

【化29】



【0265】

$R^{98}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0266】

$R^{99}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0267】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{100}$ としては、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、2,2,2-トリフルオロエチル基、アリル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシエチル、エトキシエチル、2-シアノエチル基などが挙げられる。

10

20

30

40

50

## 【 0 2 6 8 】

R<sup>1 0 1</sup>としては、水素基、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、t - ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、シクロヘキシル基、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ヘプタフルオロプロピル基、ビニル基、アリル基、1 - プロペニル基、イソプロペニル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシメチル、エトキシメチル、アセチルメチル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基などが挙げられる。

## 【 0 2 6 9 】

R<sup>9 8</sup> ~ R<sup>1 0 1</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点からR<sup>9 8</sup>が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；エチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>；アリル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>；アリル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；エチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>；アリル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>；アリル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>；アリル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；プロパルギル基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基

## 【 0 2 7 0 】

R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；プロパルギル基、R<sup>1 0 0</sup>；エチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；プロパルギル基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；プロパルギル基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；プロパルギル基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>；プロパルギル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>；プロパルギル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；エチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>；プロパルギル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>；プロパルギル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；メチル基  
 R<sup>9 8</sup>；プロパルギル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、R<sup>1 0 1</sup>；エチル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；フェニル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；エチル基、R<sup>1 0 1</sup>；フェニル基

## 【 0 2 7 1 】

R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；フェニル基  
 R<sup>9 8</sup>、R<sup>9 9</sup>；アリル基、R<sup>1 0 0</sup>；エチル基、R<sup>1 0 1</sup>；フェニル基  
 R<sup>9 8</sup>；アリル基、R<sup>9 9</sup>；水素基、R<sup>1 0 0</sup>；メチル基、R<sup>1 0 1</sup>；フェニル基



- $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 ル基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 ル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基 10  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 【0272】  
 $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; プロパルギル基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基 20  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; ビニル基  
 基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; フェニル基  
 ル基  
 好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。  
 【0273】  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; エチル基 30  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ; アリル基、 $R^{100}$ ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{101}$ ; エチル基  
 $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; エチル基  
 $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 、 $R^{101}$ ; メチル基  
 $R^{98}$ ; アリル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基 40  
 、 $R^{101}$ ; エチル基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; エチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; メチル基、 $R^{101}$ ; エチル基  
 基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、 $R^{101}$ ; メチル基  
 $R^{98}$ ; プロパルギル基、 $R^{99}$ ; 水素基、 $R^{100}$ ; 2, 2, 2 - トリフルオロエチル基 50

チル基、 $R^{101}$ ；エチル基

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基  
 $R^{98}$ ；プロパルギル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基

ル基

$R^{98}$ ；プロパルギル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基 10

ル基

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；ビニル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；ビニル基  
 $R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；ビニル基  
 $R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；ビニル基  
 $R^{98}$ ；プロパルギル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；ビニル基

基

$R^{98}$ ；プロパルギル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基 20

ル基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

【0274】

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；メチル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；メチル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；エチル基  
 $R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基、 $R^{101}$

1；メチル基

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基、 $R^{101}$

1；エチル基

$R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；メチル基

$R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；メチル基

$R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；エチル基

$R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基

、 $R^{101}$ ；メチル基

$R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；2,2,2-トリフルオロエチル基

、 $R^{101}$ ；エチル基

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基

$R^{98}$ 、 $R^{99}$ ；アリル基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基

$R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；メチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基

$R^{98}$ ；アリル基、 $R^{99}$ ；水素基、 $R^{100}$ ；エチル基、 $R^{101}$ ；フェニル基

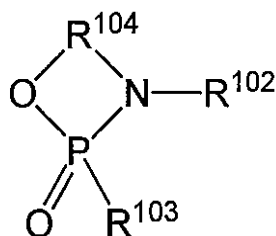
24．環状ホスホン酸モノアミド

【0275】

30

40

【化 3 0】



(28)

【0276】

10

R<sup>102</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【0277】

R<sup>103</sup>としては、水素基、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、シクロヘキシル基、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ヘプタフルオロプロピル基、ビニル基、アリル基、1-プロペニル基、イソプロペニル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシメチル、エトキシメチル、アセチルメチル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基などが挙げられる。

20

【0278】

R<sup>104</sup>としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1-メチルトリメチレン基、2-メチルトリメチレン基、3-メチルトリメチレン基、2,2-ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

R<sup>102</sup> ~ R<sup>104</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性向上の観点から R<sup>102</sup> がアリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

30

【0279】

R<sup>102</sup> ; アリル基、R<sup>103</sup> ; メチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; アリル基、R<sup>103</sup> ; エチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; アリル基、R<sup>103</sup> ; フェニル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; アリル基、R<sup>103</sup> ; ビニル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; プロパルギル基、R<sup>103</sup> ; メチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; プロパルギル基、R<sup>103</sup> ; エチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; プロパルギル基、R<sup>103</sup> ; フェニル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; プロパルギル基、R<sup>103</sup> ; ビニル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基

40

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0280】

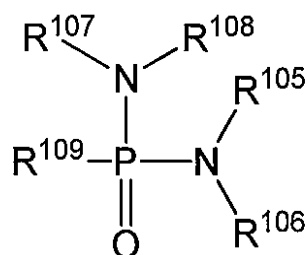
R<sup>102</sup> ; アリル基、R<sup>103</sup> ; メチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; アリル基、R<sup>103</sup> ; エチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; アリル基、R<sup>103</sup> ; フェニル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; プロパルギル基、R<sup>103</sup> ; メチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; プロパルギル基、R<sup>103</sup> ; エチル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基  
 R<sup>102</sup> ; プロパルギル基、R<sup>103</sup> ; フェニル基、R<sup>104</sup> ; エチレン基

25. ホスホン酸ジアミド

50

【 0 2 8 1 】

【 化 3 1 】



(29)

10

【 0 2 8 2 】

$R^{105}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

【 0 2 8 3 】

$R^{106} \sim R^{108}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

【 0 2 8 4 】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{109}$ としては、水素基、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、シクロヘキシル基、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ヘプタフルオロプロピル基、ビニル基、アリル基、1-プロペニル基、イソプロペニル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシメチル、エトキシメチル、アセチルメチル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基などが挙げられる。

30

【 0 2 8 5 】

$R^{105} \sim R^{109}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性向上の観点から  $R^{105}$  が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

40

$R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; メチル基

$R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; メチル基

$R^{105} \sim R^{108}$  ; プロパルギル基、 $R^{109}$  ; メチル基

$R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; メチル基

$R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; エチル基

$R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; エチル基

$R^{105} \sim R^{108}$  ; プロパルギル基、 $R^{109}$  ; エチル基

$R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; エチル基

50

$R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; フェニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; フェニル基  
 $R^{105} \sim R^{108}$  ; プロパルギル基、 $R^{109}$  ; フェニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; フェニル基  
 $R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; ビニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; ビニル基  
 $R^{105} \sim R^{108}$  ; プロパルギル基、 $R^{109}$  ; ビニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; ビニル基

好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

【0286】

$R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; メチル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; メチル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; メチル基  
 $R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; エチル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; エチル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; エチル基

$R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; フェニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; フェニル基

$R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; フェニル基  
 $R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; ビニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; ビニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; プロパルギル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; ビニル基

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

【0287】

$R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; メチル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; メチル基  
 $R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; エチル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; エチル基  
 $R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; フェニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; フェニル基

$R^{105} \sim R^{108}$  ; アリル基、 $R^{109}$  ; ビニル基  
 $R^{105}$ 、 $R^{107}$  ; アリル基、 $R^{106}$ 、 $R^{108}$  ; 水素基、 $R^{109}$  ; ビニル基

26. 環状ホスホン酸ジアミド

【0288】

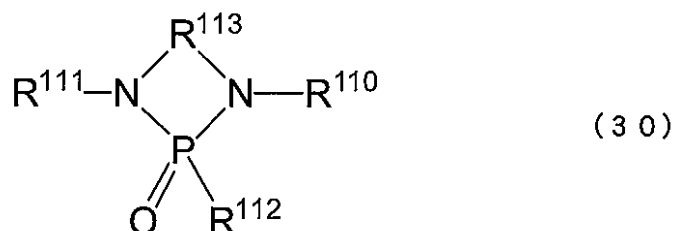
10

20

30

40

## 【化 3 2】



## 【0289】

R<sup>110</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis-2-ブテニル基、trans-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

10

## 【0290】

R<sup>111</sup>としては、アリル基、プロパルギル基、cis-2-ブテニル基、trans-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

## 【0291】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

R<sup>112</sup>としては、水素基、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、シクロヘキシル基、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ヘプタフルオロプロピル基、ビニル基、アリル基、1-プロペニル基、イソプロペニル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシメチル、エトキシメチル、アセチルメチル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基などが挙げられる。

30

## 【0292】

R<sup>113</sup>としては、エチレン基、プロピレン基、トリメチレン基、1-メチルトリメチレン基、2-メチルトリメチレン基、3-メチルトリメチレン基、2,2-ジメチルトリメチレン基などが挙げられる。

R<sup>110</sup> ~ R<sup>113</sup>の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から R<sup>110</sup> が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

40

## 【0293】

R<sup>110</sup>、R<sup>111</sup>；アリル基、R<sup>112</sup>；メチル基、R<sup>113</sup>；エチレン基

R<sup>110</sup>、R<sup>111</sup>；アリル基、R<sup>112</sup>；エチル基、R<sup>113</sup>；エチレン基

R<sup>110</sup>、R<sup>111</sup>；アリル基、R<sup>112</sup>；フェニル基、R<sup>113</sup>；エチレン基

R<sup>110</sup>、R<sup>111</sup>；アリル基、R<sup>112</sup>；ビニル基、R<sup>113</sup>；エチレン基

R<sup>110</sup>、R<sup>111</sup>；プロパルギル基、R<sup>112</sup>；メチル基、R<sup>113</sup>；エチレン基

R<sup>110</sup>、R<sup>111</sup>；プロパルギル基、R<sup>112</sup>；エチル基、R<sup>113</sup>；エチレン基

R<sup>110</sup>、R<sup>111</sup>；プロパルギル基、R<sup>112</sup>；フェニル基、R<sup>113</sup>；エチレン

基

50

$R^{110}$ 、 $R^{111}$ ；プロパルギル基、 $R^{112}$ ；ビニル基、 $R^{113}$ ；エチレン基  
好ましくは、高温保存時におけるガス発生の抑制、電池の充放電特性向上の観点から、  
以下のものが挙げられる。

【0294】

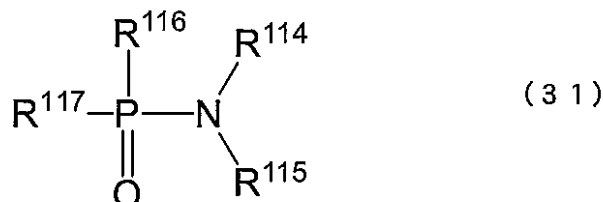
$R^{110}$ 、 $R^{111}$ ；アリル基、 $R^{112}$ ；メチル基、 $R^{113}$ ；エチレン基  
 $R^{110}$ 、 $R^{111}$ ；アリル基、 $R^{112}$ ；エチル基、 $R^{113}$ ；エチレン基  
 $R^{110}$ 、 $R^{111}$ ；アリル基、 $R^{112}$ ；フェニル基、 $R^{113}$ ；エチレン基  
 $R^{110}$ 、 $R^{111}$ ；アリル基、 $R^{112}$ ；ビニル基、 $R^{113}$ ；エチレン基

27. ホスフィン酸アミド

【0295】

10

【化33】



【0296】

$R^{114}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

20

【0297】

$R^{115}$ としては、アリル基、プロパルギル基、*cis*-2-ブテニル基、*trans*-2-ブテニル基、3-ブテニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキセニル基、5-ヘキシニル基、7-オクテニル基、7-オクチニル基、9-デセニル基、9-デシニル基などが挙げられ、この中で、アリル基、プロパルギル基、3-ブテニル基、3-ブチニル基、4-ペンテニル基、4-ペンチニル基などの末端に炭素-炭素不飽和結合をもつものが電池特性の点から好ましい。

30

【0298】

また、その他の置換基として、水素基、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基、2-メトキシエチル基、2-エトキシエチル基などが挙げられる。

$R^{116}$ 、 $R^{117}$ としては、水素基、メチル、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、シクロヘキシル基、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ヘプタフルオロプロピル基、ビニル基、アリル基、1-プロペニル基、イソプロペニル基、フェニル基、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられ、またヘテロ原子を含んだ置換基としては、メトキシメチル、エトキシメチル、アセチルメチル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基などが挙げられる。

40

【0299】

$R^{114} \sim R^{117}$ の中で好ましい組み合わせは、電池特性の観点から $R^{114}$ が、アリル基又はプロパルギル基であるものであり、以下の例が挙げられる。

$R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基

$R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基

50

$R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；プロパルギル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；プロパルギル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；フェニル基  
 $R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；フェニル基  
 $R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；プロパルギル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；フェニル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；フェニル基

10

好ましくは、高温保存時におけるガス発生抑制、電池の充放電特性向上の観点から、以下のものが挙げられる。

## 【0300】

$R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；フェニル基  
 $R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；フェニル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；フェニル基

20

更に好ましくは、以下のものが挙げられる。

## 【0301】

$R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；メチル基  
 $R^{114}$ 、 $R^{115}$ ；アリル基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ ；アリル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基  
 $R^{114}$ ；プロパルギル基、 $R^{115}$ ；水素基、 $R^{116}$ 、 $R^{117}$ ；エチル基

30

前記一般式(1)で表される化合物の含有量は特に限定されるものではないが、非水系電解液に対し、0.001質量%以上、10質量%以下が好ましい。0.01質量%以上であることが更に好ましく、特に0.1質量%以上が好ましい。一方、5質量%以下が更に好ましく、3質量%以下が特に好ましい。前記一般式(1)で表される化合物の含有量が上記範囲にあることにより、本発明の効果が発現しやすくなり、また、抵抗増加による電池特性の悪化を抑制する。

## 【0302】

尚、前記一般式(1)で化合物は、1種であっても、複数種を併用してもよいが、複数種を併用する場合、上記含有量は、複数種の合計量を表す。

前記一般式(1)で表される化合物を含有する電解液を用いた場合、高温保存時のガス発生量が減少し、電池特性も向上する。その詳細な機構は明らかになっていないが、前記一般式(1)で表される化合物は、炭素-炭素不飽和結合を有するアミド化合物であり、アミド基の部位で正極表面に吸着し、炭素-炭素不飽和結合部分で重合反応をして、正極を保護する機能を発現すると推察される。従って、このどちらかが欠けると、本発明のような効果が得られない。また、炭素-炭素不飽和結合は、アミド基に隣接するとその影響により反応性が低下すると推察されるので、ビニル基のような炭素-炭素不飽和結合は好ましくない。また、炭素-炭素不飽和結合は、重合反応の起きやすさから置換基の末端にあることが望ましい。

40

## 【0303】

[1-3. 一般式(1)で表される化合物と併用することが好適な化合物群]

50



本発明では、前記一般式(1)で表される化合物に加えて、特定の化合物を電解液中に含有させることによって、更に効果を向上させることが出来る。本発明に係る非水系電解液は、本発明の効果を損ねない範囲で、炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート化合物、フッ素原子を有する環状カーボネート化合物、モノフルオロリン酸塩、ジフルオロリン酸塩、ニトリル化合物及びイソシアナト化合物からなる群から選ばれる少なくとも一種の化合物や従来公知の過充電防止剤などの種々の他の化合物を助剤として含有していてもよい。

#### 【0304】

これらの中でも、炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート化合物、フッ素原子を有する環状カーボネート化合物、モノフルオロリン酸塩及びジフルオロリン酸塩からなる群より選ばれる少なくとも一種の化合物を含有する場合、負極に安定な皮膜を形成するため、サイクル特性や高温保存後の電池特性が向上することがあり、好ましい。

(炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート化合物)

炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート化合物としては、例えば、ビニレンカーボネート、メチルビニレンカーボネート、エチルビニレンカーボネート、1,2-ジメチルビニレンカーボネート、1,2-ジエチルビニレンカーボネート、フルオロビニレンカーボネート、トリフルオロメチルビニレンカーボネート等のビニレンカーボネート化合物；ビニルエチレンカーボネート、1-メチル-2-ビニルエチレンカーボネート、1-エチル-2-ビニルエチレンカーボネート、1-n-プロピル-2-ビニルエチレンカーボネート、1-メチル-2-ビニルエチレンカーボネート、1,1-ジビニルエチレンカーボネート、1,2-ジビニルエチレンカーボネート等のビニルエチレンカーボネート化合物；1,1-ジメチル-2-メチレンエチレンカーボネート、1,1-ジエチル-2-メチレンエチレンカーボネート等のメチレンエチレンカーボネート化合物等が挙げられる。

#### 【0305】

これらのうち、ビニレンカーボネート、ビニルエチレンカーボネート、1,2-ジビニルエチレンカーボネートがサイクル特性や高温保存後の容量維持特性向上の点から好ましく、中でもビニレンカーボネート又はビニルエチレンカーボネートがより好ましく、特にビニレンカーボネートが好ましい。これらは単独で用いても、2種以上を併用してもよい。

#### 【0306】

2種類以上を併用する場合は、ビニレンカーボネートとビニルエチレンカーボネートとを併用することが好ましい。

炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート化合物を含有する場合、非水系電解液中におけるその割合は、通常0.01質量%以上、好ましくは0.1質量%以上、特に好ましくは0.3質量%以上、また、通常10質量%以下、好ましくは8質量%以下、特に好ましくは6質量%以下である。炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート化合物の含有量が上記範囲にあることにより、電池のサイクル特性や高温保存後の容量維持特性を向上させるという効果を十分に発揮し、また、高温保存時のガス発生量の増大を抑制する。

#### 【0307】

(フッ素原子を有する環状カーボネート化合物)

フッ素原子を有する環状カーボネート化合物としては、例えば、フルオロエチレンカーボネート、1,2-ジフルオロエチレンカーボネート、1,1-ジフルオロエチレンカーボネート、1,1,2-トリフルオロエチレンカーボネート、テトラフルオロエチレンカーボネート、1-フルオロ-2-メチルエチレンカーボネート、1-フルオロ-1-メチルエチレンカーボネート、1,2-ジフルオロ-1-メチルエチレンカーボネート、1,1,2-トリフルオロ-2-メチルエチレンカーボネート、トリフルオロメチルエチレンカーボネート等が挙げられる。これらのうち、フルオロエチレンカーボネート、1,2-ジフルオロエチレンカーボネート、1-フルオロ-2-メチルエチレンカーボネートがサ

イクル特性向上や高温保存特性向上の点から好ましい。これらは単独で用いても、2種類以上を併用してもよい。

#### 【0308】

非水系電解液がフッ素原子を有する環状カーボネート化合物を含有する場合、非水系電解液中におけるその割合は、通常、0.001質量%以上、好ましくは0.1質量%以上、より好ましくは0.3質量%以上、特に好ましくは0.5質量%以上であり、通常、10質量%以下、好ましくは5質量%以下、より好ましくは4質量%以下、特に好ましくは3質量%以下である。ただし、フルオロエチレンカーボネートは〔1-2.非水溶媒〕の項で説明したように、溶媒として用いてもよく、その場合は上記の含有量に限定されない。

10

#### 【0309】

(モノフルオロリン酸塩およびジフルオロリン酸塩)

モノフルオロリン酸塩およびジフルオロリン酸塩のカウンターカチオンとしては特に限定はないが、リチウム、ナトリウム、カリウム、マグネシウム、カルシウム、及び、 $R^{118}R^{119}R^{120}R^{121}$  (式中、 $R^{118} \sim R^{121}$ は、各々独立に、水素原子又は炭素数1~12の有機基を表す。)で表されるアンモニウム等が例として挙げられる。

#### 【0310】

上記アンモニウムの $R^{118} \sim R^{121}$ で表わされる炭素数1~12の有機基としては特に限定はないが、例えば、ハロゲン原子で置換されていてもよいアルキル基、ハロゲン原子又はアルキル基で置換されていてもよいシクロアルキル基、ハロゲン原子又はアルキル基で置換されていてもよいアリール基、置換基を有していてもよい窒素原子含有複素環基等が挙げられる。中でも $R^{118} \sim R^{121}$ として、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、又は窒素原子含有複素環基等が好ましい。

20

#### 【0311】

モノフルオロリン酸塩およびジフルオロリン酸塩の具体例としては、モノフルオロリン酸リチウム、モノフルオロリン酸ナトリウム、モノフルオロリン酸カリウム、モノフルオロリン酸テトラメチルアンモニウム、モノフルオロリン酸テトラエチルアンモニウム、ジフルオロリン酸リチウム、ジフルオロリン酸ナトリウム、ジフルオロリン酸カリウム、ジフルオロリン酸テトラメチルアンモニウム、ジフルオロリン酸テトラエチルアンモニウム等が挙げられ、モノフルオロリン酸リチウム、ジフルオロリン酸リチウムが好ましく、ジフルオロリン酸リチウムがより好ましい。これらは単独で用いても、2種類以上を併用してもよい。

30

#### 【0312】

非水系電解液がモノフルオロリン酸塩および/またはジフルオロリン酸塩を含有する場合、非水系電解液中におけるその割合は、通常、0.001質量%以上、好ましくは0.01質量%以上、特に好ましくは0.1質量%以上、最も好ましくは0.2質量%以上であり、通常5質量%以下、好ましくは3質量%以下、特に好ましくは2質量%以下である。

#### 【0313】

なお、モノフルオロリン酸塩及びジフルオロリン酸塩は、非水系電解液として実際に二次電池作製に供すると、その電池を解体して再び非水系電解液を抜き出した場合、非水系電解液中のそれらフルオロリン酸塩の含有量が著しく低下している場合が多い。従って、電池から抜き出した非水系電解液から、少なくとも1種のモノフルオロリン酸塩及び/又はジフルオロリン酸塩が検出できるものは、その検出量に関わらず、非水系電解液中にこれらフルオロリン酸塩を本発明で規定する所定割合で含む非水系電解液であるとみなされる。

40

#### 【0314】

(ニトリル化合物)

ニトリル化合物としては、アセトニトリル、プロピオニトリル、ブチロニトリル、バレ

50

ロニトリル、ヘキサニトリル、ヘプタニトリル、オクタニトリル、ノナンニトリル、デカンニトリル、ドデカンニトリル（ラウロニトリル）、トリデカンニトリル、テトラデカンニトリル（ミリストニトリル）、ヘキサデカンニトリル、ペンタデカンニトリル、ヘプタデカンニトリル、オクタデカンニトリル（ステアロニトリル）、ノナデカンニトリル、イコサンニトリル等のモノニトリル；マロノニトリル、スクシノニトリル、グルタロニトリル、アジボニトリル、ピメロニトリル、スベロニトリル、アゼラニトリル、セバコニトリル、ウンデカンジニトリル、ドデカンジニトリル、メチルマロノニトリル、エチルマロノニトリル、イソプロピルマロノニトリル、*tert*-ブチルマロノニトリル、メチルスクシノニトリル、2, 2-ジメチルスクシノニトリル、2, 3-ジメチルスクシノニトリル、トリメチルスクシノニトリル、テトラメチルスクシノニトリル、3, 3'-オキシジプロピオニトリル、3, 3'-チオジプロピオニトリル、3, 3'-(エチレンジオキシ)ジプロピオニトリル、3, 3'-(エチレンジチオ)ジプロピオニトリル、1, 2, 3-プロパントリカルボニトリル、1, 3, 5-ペンタントリカルボニトリル、1, 2, 3-トリス(2-シアノエトキシ)プロパン、トリス(2-シアノエチル)アミン、3, 9-ビス(2-シアノエチル)-2, 4, 8, 10-テトラオキサスピロ[5, 5]ウンデカン等のジニトリルが挙げられ、これらの中でも、ラウロニトリル、スクシノニトリル、グルタロニトリル、アジボニトリル、ピメロニトリル、スベロニトリルが好ましい。

#### 【0315】

これらは単独で用いても、2種類以上を併用してもよい。

非水系電解液がニトリル化合物を含有する場合、非水系電解液中におけるその割合は、通常、0.001質量%以上、好ましくは0.01質量%以上、特に好ましくは0.1質量%以上、最も好ましくは0.2質量%以上であり、通常10質量%以下、好ましくは5質量%以下、特に好ましくは2質量%以下である。ニトリル化合物の含有量が上記範囲にあることにより、助剤の効果が発現し、高負荷放電特性等の電池の特性の低下を抑制し、高温保存後の容量維持特性やサイクル特性を向上させる点で好ましい。

#### 【0316】

(イソシアナト化合物)

イソシアナト化合物としては、1-イソシアナトエタン、1-イソシアナトプロパン、1-イソシアナトブタン、1-イソシアナトペンタン、1-イソシアナトヘキサン、1-イソシアナトヘプタン、1-イソシアナトオクタン、1-イソシアナトノナン、1-イソシアナトデカン、1, 4-ジイソシアナトブタン、1, 5-ジイソシアナトペンタン、1, 6-ジイソシアナトヘキサン、1, 7-ジイソシアナトヘプタン、1, 8-ジイソシアナトオクタン、1, 9-ジイソシアナトノナン、1, 10-ジイソシアナトデカン、1, 3-ジイソシアナトプロペン、1, 4-ジイソシアナト-2-ブテン、1, 4-ジイソシアナト-2-フルオロブタン、1, 4-ジイソシアナト-2, 3-ジフルオロブタン、1, 5-ジイソシアナト-2-ペンテン、1, 5-ジイソシアナト-2-メチルペンタン、1, 6-ジイソシアナト-2-ヘキセン、1, 6-ジイソシアナト-3-ヘキセン、1, 6-ジイソシアナト-3-フルオロヘキサン、1, 6-ジイソシアナト-3, 4-ジフルオロヘキサン、トルエンジイソシアナト、キシレンジイソシアナト、トリレンジイソシアナト、1, 2-ビス(イソシアナトメチル)シクロヘキサン、1, 3-ビス(イソシアナトメチル)シクロヘキサン、1, 4-ビス(イソシアナトメチル)シクロヘキサン、1, 2-ジイソシアナトシクロヘキサン、1, 3-ジイソシアナトシクロヘキサン、1, 4-ジイソシアナトシクロヘキサン、ジシクロヘキシルメタン-1, 1'-ジイソシアナト、ジシクロヘキシルメタン-2, 2'-ジイソシアナト、ジシクロヘキシルメタン-3, 3'-ジイソシアナト、ジシクロヘキシルメタン-4, 4'-ジイソシアナト、イソホロンジイソシアナト、1, 6, 11-トリイソシアナトウンデカン、4-イソシアナトメチル-1, 8-オクタメチレンジイソシアナト、1, 3, 5-トリイソシアナトメチルベンゼン、ビスクロ[2.2.1]ヘプタン-2, 5-ジイルビス(メチル=イソシアナト)、ビスクロ[2.2.1]ヘプタン-2, 6-ジイルビス(メチル=イソシアナト)等のイソシアナト化合物が挙げられる。

## 【0317】

これらは単独で用いても、2種類以上を併用してもよい。

非水系電解液がイソシアナト化合物を含有する場合、非水系電解液中におけるその割合は、通常、0.001質量%以上、好ましくは0.01質量%以上、特に好ましくは0.1質量%以上、最も好ましくは0.2質量%以上であり、通常5質量%以下、好ましくは3質量%以下、特に好ましくは1質量%以下である。イソシアナト化合物の含有量が上記範囲にあることにより、助剤の効果が発現し、高負荷放電特性等の電池の特性の低下を抑制し、高温保存後の容量維持特性やサイクル特性を向上させる点で好ましい。

## 【0318】

〔1-4. その他の添加剤〕

本発明の非水系電解液は、本発明の効果を著しく損なわない範囲において、各種の添加剤を含有していても良い。添加剤としては、従来公知のものを任意に用いることができる。尚、添加剤は、1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用してもよい。

## 【0319】

添加剤の例としては、過充電防止剤や、高温保存後の容量維持特性やサイクル特性を改善するための助剤などが挙げられる。

過充電防止剤の具体例としては、ビフェニル、2-メチルビフェニル、2-エチルビフェニル等のアルキルビフェニル、ターフェニル、ターフェニルの部分水素化体、シクロペンチルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン、シス-1-プロピル-4-フェニルシクロヘキサン、トランス-1-プロピル-4-フェニルシクロヘキサン、シス-1-ブチル-4-フェニルシクロヘキサン、トランス-1-ブチル-4-フェニルシクロヘキサン、t-ブチルベンゼン、t-アミルベンゼン、ジフェニルエーテル、ジベンゾフラン、メチルフェニルカーボネート、エチルフェニルカーボネート、ジフェニルカーボネート、トリフェニルホスフェート、トリス(2-t-ブチルフェニル)ホスフェート、トリス(3-t-ブチルフェニル)ホスフェート、トリス(4-t-ブチルフェニル)ホスフェート、トリス(2-t-アミルフェニル)ホスフェート、トリス(3-t-アミルフェニル)ホスフェート、トリス(4-t-アミルフェニル)ホスフェート、トリス(2-シクロヘキシルフェニル)ホスフェート、トリス(3-シクロヘキシルフェニル)ホスフェート、トリス(4-シクロヘキシルフェニル)ホスフェート等の芳香族化合物；2-フルオロビフェニル、3-フルオロビフェニル、4-フルオロビフェニル、4,4'-ジフルオロビフェニル、2,4-ジフルオロビフェニル、o-シクロヘキシルフルオロベンゼン、p-シクロヘキシルフルオロベンゼン等の上記芳香族化合物の部分フッ素化物；2,4-ジフルオロアニソール、2,5-ジフルオロアニソール、2,6-ジフルオロアニソール、3,5-ジフルオロアニソール等の含フッ素アニソール化合物等が挙げられる。

## 【0320】

これらの中でもビフェニル、2-メチルビフェニル等のアルキルビフェニル、ターフェニル、ターフェニルの部分水素化体、シクロペンチルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン、シス-1-プロピル-4-フェニルシクロヘキサン、トランス-1-プロピル-4-フェニルシクロヘキサン、シス-1-ブチル-4-フェニルシクロヘキサン、トランス-1-ブチル-4-フェニルシクロヘキサン、t-ブチルベンゼン、t-アミルベンゼン、ジフェニルエーテル、ジベンゾフラン、メチルフェニルカーボネート、ジフェニルカーボネート、トリフェニルホスフェート、トリス(4-t-ブチルフェニル)ホスフェート、トリス(4-シクロヘキシルフェニル)ホスフェート等の芳香族化合物；2-フルオロビフェニル、3-フルオロビフェニル、4-フルオロビフェニル、4,4'-ジフルオロビフェニル、o-シクロヘキシルフルオロベンゼン、p-シクロヘキシルフルオロベンゼン等の上記芳香族化合物の部分フッ素化物が好ましく、ターフェニルの部分水素化体、シクロペンチルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン、シス-1-プロピル-4-フェニルシクロヘキサン、トランス-1-プロピル-4-フェニルシクロヘキサン、シス-1-ブチル-4-フェニルシクロヘキサン、トランス-1-ブチル-4-フェニルシクロヘキサン、t

10

20

30

40

50

- ブチルベンゼン、*t*-アミルベンゼン、メチルフェニルカーボネート、ジフェニルカーボネート、トリフェニルホスフェート、トリス(4-*t*-ブチルフェニル)ホスフェート、トリス(4-シクロヘキシルフェニル)ホスフェート、*o*-シクロヘキシルフルオロベンゼン、*p*-シクロヘキシルフルオロベンゼンがより好ましく、ターフェニルの部分水素化体及びシクロヘキシルベンゼンが特に好ましい。

#### 【0321】

これらは2種以上併用してもよい。2種以上併用する場合は、特に、ターフェニルの部分水素化体やシクロヘキシルベンゼンと*t*-ブチルベンゼンや*t*-アミルベンゼンとの組み合わせや、ピフェニル、アルキルピフェニル、ターフェニル、ターフェニルの部分水素化体、シクロヘキシルベンゼン、*t*-ブチルベンゼン、*t*-アミルベンゼン等の酸素を含有しない芳香族化合物から選ばれるものと、ジフェニルエーテル、ジベンゾフラン等の含酸素芳香族化合物から選ばれるものとを併用するのが過充電防止特性と高温保存特性のバランスの点から好ましい。

10

#### 【0322】

非水系電解液中におけるこれらの過充電防止剤の含有割合は、通常0.1質量%以上、好ましくは0.2質量%以上、より好ましくは0.3質量%以上、特に好ましくは0.5質量%以上、また、通常5質量%以下、好ましくは3質量%以下、より好ましくは2質量%以下である。濃度が上記範囲にあることにより、所望する過充電防止剤の効果が発現しやすくなり、また、高温保存特性等の電池の特性の低下を抑制する。非水系電解液に過充電防止剤を含有させることによって、過充電による非水系電解液二次電池の破裂・発火を抑制することができ、非水系電解液二次電池の安全性が向上するので好ましい。

20

#### 【0323】

高温保存後の容量維持特性やサイクル特性を改善するための助剤の具体例としては、コハク酸無水物、マレイン酸無水物、フタル酸無水物、シトラコン酸無水物等の酸無水物；エリスリタンカーボネート、スピロ-ビス-ジメチレンカーボネート等のカーボネート化合物；エチレンサルファイト、1,3-プロパンスルトン、1,3-プロペンスルトン、1,4-ブタンスルトン、メタンスルホン酸メチル、ブスルファン、スルホラン、スルホレン、ジメチルスルホン、ジフェニルスルホン、ジピニルスルホン、メチルフェニルスルホン、ジエチルジスルフィド、ジブチルジスルフィド、N,N-ジメチルメタンスルホンアミド、N,N-ジエチルメタンスルホンアミド等の含硫黄化合物；1-メチル-2-ピロリジノン、1-メチル-2-ピペリドン、3-メチル-2-オキサゾリジノン、1,3-ジメチル-2-イミダゾリジノン、N-メチルスクシイミド等の含窒素化合物；ヘプタン、オクタン、シクロヘプタン等の炭化水素化合物；フルオロベンゼン、ジフルオロベンゼン、ベンゾトリフルオライド等の含フッ素芳香族化合物；などが挙げられる。

30

#### 【0324】

なお、これらの助剤は、1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用してもよい。

本発明の非水系電解液が高温保存後の容量維持特性やサイクル特性を改善するための助剤を含有する場合、その濃度は本発明の効果を著しく損なわない限り任意であるが、非水系電解液全体に対して通常0.1質量%以上、5質量%以下の範囲とすることが好ましい。

40

#### 【0325】

他の助剤としては、エリスリタンカーボネート、スピロ-ビス-ジメチレンカーボネート、メトキシエチル-メチルカーボネート、メトキシエチル-エチルカーボネート、エトキシエチル-メチルカーボネート、エトキシエチル-エチルカーボネート等のカーボネート化合物；無水コハク酸、無水グルタル酸、無水マレイン酸、無水イタコン酸、無水シトラコン酸、無水グルタコン酸、無水ジグリコール酸、シクロヘキサジカルボン酸無水物、シクロペンタンテトラカルボン酸二無水物及びフェニルコハク酸無水物等のカルボン酸無水物；コハク酸ジメチル、コハク酸ジエチル、コハク酸ジアリル、マレイン酸ジメチル、マレイン酸ジエチル、マレイン酸ジアリル、マレイン酸ジプロピル、マレイン酸ジブチ

50

ル、マレイン酸ビス(トリフルオロメチル)、マレイン酸ビス(ペンタフルオロエチル)、マレイン酸ビス(2, 2, 2-トリフルオロエチル)等のジカルボン酸ジエステル化合物; 2, 4, 8, 10-テトラオキサスピロ[5.5]ウンデカン、3, 9-ジビニル-2, 4, 8, 10-テトラオキサスピロ[5.5]ウンデカン等のスピロ化合物; エチレンサルファイト、プロピレンサルファイト、1, 3-プロパンスルトン、1, 4-ブタンスルトン、1, 3-プロペンスルトン、1, 4-ブテンスルトン、メチルメタンスルホネート、エチルメタンスルホネート、メチル-メトキシメタンスルホネート、メチル-2-メトキシエタンスルホネート、ブスルファン、ジエチレングリコールジメタンスルホネート、1, 2-エタンジオールビス(2, 2, 2-トリフルオロエタンスルホネート)、1, 4-ブタンジオールビス(2, 2, 2-トリフルオロエタンスルホネート)、スルホラン、3-スルホレン、2-スルホレン、ジメチルスルホン、ジエチルスルホン、ジビニルスルホン、ジフェニルスルホン、ビス(メチルスルホニル)メタン、ビス(メチルスルホニル)エタン、ビス(エチルスルホニル)メタン、ビス(エチルスルホニル)エタン、ビス(ビニルスルホニル)メタン、ビス(ビニルスルホニル)エタン、N, N-ジメチルメタンスルホンアミド、N, N-ジエチルメタンスルホンアミド、N, N-ジメチルトリフルオロメタンスルホンアミド、N, N-ジエチルトリフルオロメタンスルホンアミド等の含硫黄化合物; 1-メチル-2-ピロリジノン、1-メチル-2-ピペリドン、3-メチル-2-オキサゾリジノン、1, 3-ジメチル-2-イミダゾリジノン及びN-メチルスクシイミド等の含窒素化合物; ヘプタン、オクタン、ノナン、デカン、シクロヘプタン、メチルシクロヘキサン、エチルシクロヘキサン、プロピルシクロヘキサン、n-ブチルシクロヘキサン、t-ブチルシクロヘキサン、ジシクロヘキシル等の炭化水素化合物; フルオロベンゼン、ジフルオロベンゼン、ペンタフルオロベンゼン、ヘキサフルオロベンゼン等のフッ化ベンゼン; 2-フルオロトルエン、3-フルオロトルエン、4-フルオロトルエン、ベンゾトリフルオライド等のフッ化トルエン; メチルジメチルホスフィネート、エチルジメチルホスフィネート、エチルジエチルホスフィネート、トリメチルホスホノフォルメート、トリエチルホスホノフォルメート、トリメチルホスホノアセテート、トリエチルホスホノアセテート、トリメチル-3-ホスホノプロピオネート、トリエチル-3-ホスホノプロピオネート等の含リン化合物等が挙げられる。

#### 【0326】

これらの中で、高温保存後の電池特性向上の点からエチレンサルファイト、1, 3-プロパンスルトン、1, 4-ブタンスルトン、1, 3-プロペンスルトン、1, 4-ブテンスルトン、ブスルファン、1, 4-ブタンジオールビス(2, 2, 2-トリフルオロエタンスルホネート)等の含硫黄化合物が好ましい。

これらは2種以上併用して用いてもよい。

#### 【0327】

非水系電解液中におけるこれらの助剤の含有割合は、特に制限はないが、通常0.01質量%以上、好ましくは0.1質量%以上、より好ましくは0.2質量%以上、また、通常8質量%以下、好ましくは5質量%以下、より好ましくは3質量%以下、特に好ましくは1質量%以下である。これらの助剤を添加することは、高温保存後の容量維持特性やサイクル特性を向上させる点で好ましい。この濃度が上記範囲にあることにより、助剤の効果が発現しやすくなり、また、高負荷放電特性等の電池の特性の低下を抑制する。

#### 【0328】

〔1-5.ゲル化剤〕

非水系電解液は、本発明のリチウム二次電池に用いる際、通常は液体状態で存在するが、例えば、これを高分子によってゲル化して、半固体状電解質にしてもよい。ゲル化に用いる高分子は任意であるが、例えばポリフッ化ビニリデン、ポリフッ化ビニリデンとヘキサフルオロプロピレンとの共重合体、ポリエチレンオキサライド、ポリアクリレート、ポリメタクリレートなどが挙げられる。なお、ゲル化に用いる高分子は1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

#### 【0329】

また、非水系電解液を半固体状電解質として用いる場合、半固体状電解質に占める非水系電解液の比率は、本発明の効果を著しく損なわない限り任意である。好適な範囲としては、半固体状電解質の総量に対する非水系電解液の比率が、通常30質量%以上、好ましくは50質量%以上、より好ましくは75質量%以上であり、また、通常99.95質量%以下、好ましくは99質量%以下、より好ましくは98質量%以下である。

#### 【0330】

非水系電解液の比率が大きすぎると、電解液の保持が困難となり液漏れが生じやすくなる虞があり、逆に少なすぎると充放電効率や容量の点で不十分となることがある。

##### 〔1-6. 非水系電解液の製造方法〕

本発明の非水系電解液は、上述した非水溶媒に、上述した電解質と、本発明の前記一般式(1)で表されるハロゲン含有リン酸エステル化合物と、好ましくは炭素-炭素不飽和結合を有する環状カーボネート、ハロゲン原子を有する環状カーボネート、モノフルオロリン酸塩、ジフルオロリン酸塩及びニトリル化合物からなる群から選ばれる少なくとも1つの化合物と、必要に応じて用いられるその他の助剤などを溶解させることにより、調製することができる。

#### 【0331】

尚、非水系電解液中に水が存在すると、水の電気分解、水とリチウム金属との反応、リチウム塩の加水分解などが起こる可能性があり、好ましくない。従って、非水系電解液の調製に際して、非水溶媒などの各成分は、予め脱水しておくのが好ましい。具体的には、その水分含有率が通常50ppm以下、中でも20ppm以下の値となるまで脱水しておくことが好ましい。脱水の手法は任意に選択することが可能であるが、例えば減圧下で加熱したり、モレキュラーシーブを通過させたりする等の手法が挙げられる。

#### 【0332】

##### 〔2. 非水系電解液二次電池〕

本発明の非水系電解液二次電池は、非水系電解液以外の構成については、従来公知の非水系電解液二次電池と同様であり、通常は、本発明の非水系電解液が含浸されている多孔膜(セパレータ)を介して正極と負極とが積層され、これらがケース(外装体)に収納された形態を有する。本発明の非水系電解液二次電池の形状は特に制限されるものではなく、円筒型、角形、ラミネート型、コイン型、大型等の何れであってもよい。

#### 【0333】

##### 〔2-1. 非水系電解液〕

非水系電解液としては、上述の本発明の非水系電解液を用いる。なお、本発明の趣旨を逸脱しない範囲において、本発明の非水系電解液に対し、その他の非水系電解液を混合して用いることも可能である。

##### 〔2-2. 負極〕

本発明の非水系電解液二次電池に用いられる負極を構成する負極活物質としては、電気化学的にリチウムイオンを吸蔵・放出可能なものであれば、特に制限はない。その具体例としては、炭素質材料、合金系材料、リチウム含有金属複合酸化物材料等が挙げられる。

#### 【0334】

##### (炭素質材料負極)

炭素質材料負極(以下「炭素負極」と称す場合がある。)の負極活物質として用いられる炭素質材料としては、以下の(1)~(4)から選ばれるものが、初期不可逆容量、高電流密度充放電特性のバランスが良く好ましい。また、(1)~(4)の炭素質材料は1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

#### 【0335】

##### (1)天然黒鉛

(2)人造炭素質物質又は人造黒鉛質物質を400から3200の範囲で1回以上熱処理した炭素質材料

(3)負極活物質層が少なくとも2種類以上の異なる結晶性を有する炭素質から成り立

10

20

30

40

50

ちかつ／又はその異なる結晶性の炭素質が接する界面を有している炭素質材料

(4) 負極活物質層が少なくとも2種類以上の異なる配向性を有する炭素質から成り立ちかつ／又はその異なる配向性の炭素質が接する界面を有している炭素質材料

上記(2)の人造炭素質物質又は人造黒鉛質物質の具体的な例としては、天然黒鉛、石炭系コークス、石油系コークス、石炭系ピッチ、石油系ピッチ、若しくはこれらピッチを酸化処理したもの、ニードルコークス、ピッチコークス若しくはこれらの一部黒鉛化した炭素材、ファーンズブラック、アセチレンブラック、ピッチ系炭素繊維等の有機物の熱分解物、炭化可能な有機物若しくはこれらの炭化物、又は炭化可能な有機物をベンゼン、トルエン、キシレン、キノリン、*n*-ヘキサン等の低分子有機溶媒に溶解させた溶液若しくはこれらの炭化物等が挙げられる。

10

#### 【0336】

なお、上記の炭化可能な有機物の具体的な例としては、軟ピッチから硬ピッチまでのコールタールピッチ、乾留液化油等の石炭系重質油、常圧残油、減圧残油の直流系重質油、原油、ナフサ等の熱分解時に副生するエチレンタール等分解系石油重質油、アセナフチレン、デカシクレン、アントラセン、フェナントレン等の芳香族炭化水素、フェナジンやアクリジン等の窒素原子含有複素環式化合物、チオフェン、ピチオフェン等の硫黄原子含有複素環式化合物、ビフェニル、テルフェニル等のポリフェニレン、ポリ塩化ビニル、ポリビニルアルコール、ポリビニルブチラール、これらのものの不溶化処理品、含窒素性のポリアクリロニトリル、ポリピロール等の有機高分子、含硫黄性のポリチオフェン、ポリスチレン等の有機高分子、セルロース、リグニン、マンナン、ポリガラクトウロン酸、キトサン、サッカロースに代表される多糖類等の天然高分子、ポリフェニレンサルファイド、ポリフェニレンオキシド等の熱可塑性樹脂、フルフリルアルコール樹脂、フェノール-ホルムアルデヒド樹脂、イミド樹脂等の熱硬化性樹脂等が挙げられる。

20

#### 【0337】

炭素負極の製造は、本発明の効果を著しく制限しない限り、公知のいずれの方法をも用いることができる。例えば、負極活物質に、バインダー、溶媒、必要に応じて、増粘剤、導電材、充填材等を加えてスラリーとし、これを集電体に塗布、乾燥した後プレスすることによって形成することができる。

電池の非水系電解液注液工程直前の段階での片面あたりの負極活物質層の厚さは、通常15 $\mu$ m以上であり、20 $\mu$ m以上が好ましく、30 $\mu$ m以上が更に好ましく、また、通常150 $\mu$ m以下であり、120 $\mu$ m以下が好ましく、100 $\mu$ m以下が更に好ましい。負極活物質の厚さが、この範囲を上回ると、非水系電解液が集電体界面付近まで浸透しにくい、高電流密度充放電特性が低下する場合がある。またこの範囲を下回ると、負極活物質に対する集電体の体積比が増加し、電池の容量が減少する場合がある。また、負極活物質をロール成形してシート電極としてもよく、圧縮成形によりペレット電極としてもよい。

30

#### 【0338】

負極活物質を保持させる集電体としては、公知のものを任意に用いることができ、例えば、銅、ニッケル、ステンレス鋼、ニッケルメッキ鋼等の金属材料が挙げられるが、加工し易さとコストの点から特に銅が好ましい。

40

また、集電体の形状は、集電体が金属材料の場合は、例えば、金属箔、金属円柱、金属コイル、金属板、金属薄膜、エキスパンドメタル、パンチメタル、発泡メタル等が挙げられる。中でも、好ましくは金属薄膜、より好ましくは銅箔であり、更に好ましくは圧延法による圧延銅箔と、電解法による電解銅箔があり、どちらも集電体として用いることができる。

#### 【0339】

また、銅箔の厚さが25 $\mu$ mよりも薄い場合、純銅よりも強度の高い銅合金(リン青銅、チタン銅、コルソン合金、Cu-Cr-Zr合金等)を用いることができる。

圧延法により作製した銅箔からなる集電体は、銅結晶が圧延方向に並んでいるため、負極を密に丸めても、鋭角に丸めても割れにくく、小型の円筒状電池に好適に用いることが

50



できる。

【0340】

電解銅箔は、例えば、銅イオンが溶解された非水系電解液中に金属製のドラムを浸漬し、これを回転させながら電流を流すことにより、ドラムの表面に銅を析出させ、これを剥離して得られるものである。上記の圧延銅箔の表面に、電解法により銅を析出させていても良い。銅箔の片面又は両面には、粗面化処理や表面処理（例えば、厚さが数 nm ~ 1 μm 程度までのクロメート処理、Ti 等の下地処理等）がなされていても良い。

【0341】

金属薄膜の厚さは任意であるが、通常 1 μm 以上であり、3 μm 以上が好ましく、5 μm 以上が更に好ましく、また、通常 100 μm 以下であり、50 μm 以下が好ましく、30 μm 以下が更に好ましい。

10

金属薄膜の厚さが、1 μm より薄くなると、強度が低下するため塗布が困難となる場合がある。また、100 μm より厚くなると、捲回等の電極の形を変形させる場合がある。なお、金属薄膜は、メッシュ状でもよい。

【0342】

集電体と負極活物質層の厚さの比は特に限定されないが、「(非水系電解液注液直前の片面の負極活物質層厚さ)/(集電体の厚さ)」の値が、150 以下が好ましく、20 以下が更に好ましく、10 以下が特に好ましく、また、0.1 以上が好ましく、0.4 以上が更に好ましく、1 以上が特に好ましい。

集電体と負極活物質層の厚さの比が、上記範囲を上回ると、高電流密度充放電時に集電体がジュール熱による発熱を生じる場合がある。また、上記範囲を下回ると、負極活物質に対する集電体の体積比が増加し、電池の容量が減少する場合がある。

20

【0343】

負極活物質を電極化した際の電極構造は特に限定されないが、集電体上に存在している負極活物質の密度は、 $1 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以上が好ましく、 $1.2 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以上が更に好ましく、 $1.3 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以上が特に好ましく、また、 $2 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以下が好ましく、 $1.9 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以下がより好ましく、 $1.8 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以下が更に好ましい。集電体上に存在している負極活物質の密度が、上記範囲を上回ると、負極活物質粒子が破壊され、初期不可逆容量の増加や、集電体/負極活物質界面付近への非水系電解液の浸透性低下による高電流密度充放電特性悪化を招く場合がある。また、上記範囲を下回ると、負極活物質間の導電性が低下し、電池抵抗が増大し、単位容積当たりの容量が低下する場合がある。

30

【0344】

負極活物質を結着するバインダーとしては、非水系電解液や電極製造時に用いる溶媒に対して安定な材料であれば、特に制限されない。

具体例としては、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリエチレンテレフタレート、ポリメチルメタクリレート、芳香族ポリアミド、セルロース、ニトロセルロース等の樹脂系高分子；SBR（スチレン・ブタジエンゴム）、イソブレンゴム、ブタジエンゴム、フッ素ゴム、NBR（アクリロニトリル・ブタジエンゴム）、エチレン・プロピレンゴム等のゴム状高分子；スチレン・ブタジエン・スチレンブロック共重合体又はその水素添加物；EPDM（エチレン・プロピレン・ジエン三元共重合体）、スチレン・エチレン・ブタジエン・スチレン共重合体、スチレン・イソブレン・スチレンブロック共重合体又はその水素添加物等の熱可塑性エラストマー状高分子；シンジオタクチック-1,2-ポリブタジエン、ポリ酢酸ビニル、エチレン・酢酸ビニル共重合体、プロピレン・ - オレフィン共重合体等の軟質樹脂状高分子；ポリフッ化ビニリデン、ポリテトラフルオロエチレン、フッ素化ポリフッ化ビニリデン、ポリテトラフルオロエチレン・エチレン共重合体等のフッ素系高分子；アル・BR>Jリ金属イオン（特にリチウムイオン）のイオン伝導性を有する高分子組成物等が挙げられる。これらは、1種を単独で用いても、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

40

【0345】

50

スラリーを形成するための溶媒としては、負極活物質、バインダー（結着剤）、並びに必要なに応じて使用される増粘剤及び導電剤を溶解又は分散することが可能な溶媒であれば、その種類に特に制限はなく、水系溶媒と非水系溶媒のどちらを用いても良い。

水系溶媒の例としては水、アルコール等が挙げられ、非水系溶媒の例としてはN-メチルピロリドン（NMP）、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、酢酸メチル、アクリル酸メチル、ジエチルトリアミン、N,N-ジメチルアミノプロピルアミン、テトラヒドロフラン（THF）、トルエン、アセトン、ジエチルエーテル、ジメチルアセトアミド、ヘキサメチルホスファルアミド、ジメチルスルフォキシド、ベンゼン、キシレン、キノリン、ピリジン、メチルナフタレン、ヘキサン等が挙げられる。

10

#### 【0346】

特に水系溶媒を用いる場合、増粘剤に併せて分散剤等を含有させ、SBR等のラテックスを用いてスラリー化することが好ましい。なお、これらの溶媒は、1種を単独で用いても、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

負極活物質に対するバインダーの割合は、0.1質量%以上が好ましく、0.5質量%以上が更に好ましく、0.6質量%以上が特に好ましく、また、20質量%以下が好ましく、15質量%以下がより好ましく、10質量%以下が更に好ましく、8質量%以下が特に好ましい。負極活物質に対するバインダーの割合が、上記範囲を上回ると、バインダー量が電池容量に寄与しないバインダー割合が増加して、電池容量の低下を招く場合がある。また、上記範囲を下回ると、負極電極の強度低下を招く場合がある。

20

#### 【0347】

特に、SBRに代表されるゴム状高分子を主要成分に含有する場合には、負極活物質に対するバインダーの割合は、通常0.1質量%以上であり、0.5質量%以上が好ましく、0.6質量%以上が更に好ましく、また、通常5質量%以下であり、3質量%以下が好ましく、2質量%以下が更に好ましい。

また、ポリフッ化ビニリデンに代表されるフッ素系高分子を主要成分に含有する場合には負極活物質に対する割合は、通常1質量%以上であり、2質量%以上が好ましく、3質量%以上が更に好ましく、また、通常15質量%以下であり、10質量%以下が好ましく、8質量%以下が更に好ましい。

#### 【0348】

増粘剤は、通常、スラリーの粘度を調整するために使用される。増粘剤としては、特に制限はないが、具体的には、カルボキシメチルセルロース、メチルセルロース、ヒドロキシメチルセルロース、エチルセルロース、ポリビニルアルコール、酸化スターチ、リン酸化スターチ、カゼイン及びこれらの塩等が挙げられる。これらは、1種を単独で用いても、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

30

#### 【0349】

増粘剤を用いる場合、負極活物質に対する増粘剤の割合は、通常0.1質量%以上であり、0.5質量%以上が好ましく、0.6質量%以上が更に好ましく、また、通常5質量%以下であり、3質量%以下が好ましく、2質量%以下が更に好ましい。

負極活物質に対する増粘剤の割合が、上記範囲を下回ると、著しく塗布性が低下する場合がある。また、上記範囲を上回ると、負極活物質層に占める負極活物質の割合が低下し、電池の容量が低下する問題や負極活物質間の抵抗が増大する場合がある。

40

#### 【0350】

（合金系材料負極）

本発明の非水系電解液二次電池の負極は、金属イオンを吸蔵・放出しうる負極活物質として合金系材料、好ましくはSi、Sn及びPbからなる群より選ばれる少なくとも1種の元素を含有する負極（以下「合金系材料負極」と称する場合がある。）であってもよい。

合金系材料負極の負極活物質として用いられる合金系材料としては、リチウムを吸蔵・放出可能であれば、リチウム合金を形成する単体金属若しくは合金、またはそれらの酸化物・炭化物・窒化物・珪化物・硫化物・燐化物等の化合物のいずれであっても特に限定は

50

されないが、好ましくはリチウム合金を形成する単体金属又は合金であれば、周期表第 1 3 族又は 1 4 族の金属・半金属元素（即ち炭素を除く）を含む材料であることが好ましく、更には Si、Sn、若しくは Pb（これらを以下「特定金属元素」という場合がある。）の単体金属、又はこれら原子を含む合金・化合物である事が好ましい。

#### 【0351】

特定金属元素から選ばれる少なくとも 1 種の原子を有する負極活物質の例としては、何れか 1 種の特定金属元素の金属単体、2 種以上の特定金属元素からなる合金、1 種又は 2 種以上の特定金属元素とその他の 1 種又は 2 種以上の金属元素とからなる合金、及び、1 種又は 2 種以上の特定金属元素を含有する化合物が挙げられる。負極活物質としてこれらの金属単体、合金又は金属化合物を用いることで、電池の高容量化が可能である。

10

#### 【0352】

1 種又は 2 種以上の特定金属元素を含有する化合物の例としては、1 種又は 2 種以上の特定金属元素を含有する炭化物、酸化物、窒化物、珪化物、硫化物、燐化物等の複合化合物が挙げられる。

また、これらの複合化合物が、金属単体、合金、又は非金属元素等の数種の元素と複雑に結合した化合物も例として挙げることができる。より具体的には、例えば Si や Sn では、これらの元素と負極として動作しない金属との合金を用いることができる。また例えば Sn では、Sn と Si、Sn、Pb 以外で負極として作用する金属と、更に負極として動作しない金属と、非金属元素との組み合わせで 5 ～ 6 種の元素を含むような複雑な化合物も用いることができる。

20

#### 【0353】

これらの負極活物質の中でも、電池にしたときに単位質量当りの容量が大きいことから、何れか 1 種の特定金属元素の金属単体、2 種以上の特定金属元素の合金、特定金属元素の酸化物や炭化物、窒化物等が好ましく、特に、Si 及び / 又は Sn の金属単体、合金、酸化物や炭化物、窒化物等が、単位質量当りの容量及び環境負荷の観点から好ましい。

また、金属単体又は合金を用いるよりは単位質量当りの容量には劣るものの、サイクル特性に優れることから、Si 及び / 又は Sn を含有する以下の化合物も好ましい。

#### 【0354】

・ Si 及び / 又は Sn と酸素との元素比が通常 0.5 以上であり、好ましくは 0.7 以上、更に好ましくは 0.9 以上、また、通常 1.5 以下であり、好ましくは 1.3 以下、更に好ましくは 1.1 以下の Si 及び / 又は Sn の酸化物。

30

・ Si 及び / 又は Sn と窒素との元素比が通常 0.5 以上であり、好ましくは 0.7 以上、更に好ましくは 0.9 以上、また、通常 1.5 以下であり、好ましくは 1.3 以下、更に好ましくは 1.1 以下の Si 及び / 又は Sn の窒化物。

#### 【0355】

・ Si 及び / 又は Sn と炭素との元素比が通常 0.5 以上であり、好ましくは 0.7 以上、更に好ましくは 0.9 以上、また、通常 1.5 以下であり、好ましくは 1.3 以下、更に好ましくは 1.1 以下の Si 及び / 又は Sn の炭化物。

なお、上述の負極活物質は、何れか 1 種を単独で用いてもよく、2 種以上を任意の組み合わせ及び / 又は比率で併用してもよい。

40

#### 【0356】

合金系材料負極は、公知のいずれの方法をも用いて製造することが可能である。具体的には、負極の製造方法としては、例えば、上述の負極活物質に結着剤や導電材等を加えたものをそのままロール成型してシート電極とする方法や、圧縮成形してペレット電極とする方法も挙げられるが、通常は負極用の集電体（以下「負極集電体」という場合がある。）上に塗布法、蒸着法、スパッタ法、メッキ法等の手法により、上述の負極活物質を含有する薄膜層（負極活物質層）を形成する方法が用いられる。この場合、上述の負極活物質に結着剤、増粘剤、導電材、溶媒等を加えてスラリー状とし、これを負極集電体に塗布、乾燥した後プレスして高密度化することにより、負極集電体上に負極活物質層を形成する。

50

## 【0357】

負極集電体の材質としては、銅、銅合金、ニッケル、ニッケル合金、ステンレス等が挙げられる。これらのうち、薄膜に加工し易いという点及びコストの点から、銅箔が好ましい。

負極集電体の厚さは、通常  $1\text{ }\mu\text{m}$  以上、好ましくは  $5\text{ }\mu\text{m}$  以上であり、通常  $100\text{ }\mu\text{m}$  以下、好ましくは  $50\text{ }\mu\text{m}$  以下である。負極集電体の厚さが厚過ぎると、電池全体の容量が低下し過ぎることがあり、逆に薄過ぎると取り扱いが困難になることがある。

## 【0358】

なお、集電体表面に形成される負極活物質層との結着効果を向上させるため、これら負極集電体の表面は、予め粗面化処理をしておくことが好ましい。表面の粗面化方法としては、ブラスト処理、粗面ロールによる圧延、研磨剤粒子を固着した研磨布紙、砥石、エメリパフ、鋼線などを備えたワイヤーブラシなどで集電体表面を研磨する機械的研磨法、電解研磨法、化学研磨法等が挙げられる。

10

## 【0359】

また、負極集電体の質量を低減させて電池の質量当たりのエネルギー密度を向上させるために、エキスパンドメタルやパンチングメタルのような穴あきタイプの負極集電体を使用することもできる。このタイプの負極集電体は、その開孔率を変更することで、質量も自在に変更可能である。また、このタイプの負極集電体の両面に負極活物質層を形成させた場合、この穴を通してのリベット効果により、負極活物質層の剥離が更に起こり難くなる。しかし、開孔率があまりに高くなった場合には、負極活物質層と負極集電体との接触面積が小さくなるため、かえって接着強度は低くなることがある。

20

## 【0360】

## 〔2-3. 正極〕

本発明の非水系電解液二次電池に使用される正極に含まれる正極活物質としては、電気化学的にリチウムイオンを吸蔵・放出可能なものであれば特に制限はないが、例えば、リチウムと少なくとも1種の遷移金属を含有する物質が好ましい。具体例としては、リチウム遷移金属複合酸化物、リチウム含有遷移金属リン酸化合物が挙げられる。

## 【0361】

リチウム遷移金属複合酸化物としては、 $\text{LiCoO}_2$  等のリチウム・コバルト複合酸化物、 $\text{LiNiO}_2$  等のリチウム・ニッケル複合酸化物、 $\text{LiMnO}_2$ 、 $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ 、 $\text{Li}_2\text{MnO}_4$  等のリチウム・マンガン複合酸化物、これらのリチウム遷移金属複合酸化物の主体となる遷移金属原子の一部をAl、Ti、V、Cr、Mn、Fe、Co、Li、Ni、Cu、Zn、Mg、Ga、Zr、Si等の他の金属で置換したもの等が挙げられる。

30

## 【0362】

置換されたものの具体例としては、例えば、 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_2$ 、 $\text{LiNi}_{0.85}\text{Co}_{0.1}\text{Al}_{0.05}\text{O}_2$ 、 $\text{LiNi}_{0.33}\text{Co}_{0.33}\text{Mn}_{0.33}\text{O}_2$ 、 $\text{LiMn}_{1.8}\text{Al}_{0.2}\text{O}_4$ 、 $\text{LiMn}_{1.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_4$  等が挙げられる。

リチウム含有遷移金属リン酸化合物としては、 $\text{LiFePO}_4$ 、 $\text{Li}_3\text{Fe}_2(\text{PO}_4)_3$ 、 $\text{LiFeP}_2\text{O}_7$ 、 $\text{Li}_2\text{FeP}_2\text{O}_7$  等のリン酸鉄類、 $\text{LiCoPO}_4$  等のリン酸コバルト類、 $\text{LiMnPO}_4$  等のリン酸マンガン類、これらのリチウム遷移金属リン酸化合物の主体となる遷移金属原子の一部をAl、Ti、V、Cr、Mn、Fe、Co、Li、Ni、Cu、Zn、Mg、Ga、Zr、Nb、Si等の他の金属で置換したもの等が挙げられる。

40

## 【0363】

更に、上述した遷移金属とリチウムとの複合酸化物の表面をAl、B、Ti、Zr、V、Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Zn、Mg、Ca、Ga等の金属の酸化物で被覆すると、高電圧における溶媒の酸化反応が抑制されて好ましい。なかでも $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{TiO}_2$ 、 $\text{ZrO}_2$ 、 $\text{MgO}$ は強度が高く、安定した被覆効果を発現させるため特に好ましい。

50

## 【0364】

なお、これらの正極活物質は、何れか1種を単独で用いても良く、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

正極活物質のタップ密度は、通常  $1.3 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以上であり、 $1.5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以上が好ましく、 $1.6 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以上が更に好ましく、 $1.7 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以上が特に好ましく、また、通常  $2.5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以下であり、 $2.4 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  以下が好ましい。

## 【0365】

タップ密度の高い金属複合酸化物粉体を用いることにより、高密度の正極活物質層を形成することができる。従って、正極活物質のタップ密度が上記範囲を下回ると、正極活物質層形成時に必要な分散媒量が増加すると共に、導電材や結着剤の必要量が増加し、正極活物質層への正極活物質の充填率が制約され、電池容量が制約される場合がある。また、タップ密度は一般に大きいほど好ましく特に上限はないが、上記範囲を上回ると、正極活物質層内における非水系電解液を媒体としたリチウムイオンの拡散が律速となり、負荷特性が低下しやすくなる場合がある。

10

## 【0366】

正極活物質のBET比表面積は、BET法を用いて測定した比表面積の値が、通常  $0.2 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  以上であり、 $0.3 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  以上が好ましく、 $0.4 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  以上が更に好ましく、また、通常  $4.0 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  以下であり、 $2.5 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  以下が好ましく、 $1.5 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  以下が更に好ましい。BET比表面積の値が、上記範囲を下回ると、電池性能が低下しやすくなる。また、上記範囲を上回ると、タップ密度が上がりにくくなり、正極活物質形成時の塗布性が低下する場合がある。

20

## 【0367】

正極活物質の製造法としては、本発明の要旨を超えない範囲で特には制限されないが、いくつかの方法が挙げられ、無機化合物の製造法として一般的な方法が用いられる。

以下に、本発明に使用される正極の構成及びその作製法について説明する。

正極は、正極活物質粒子と結着剤とを含有する正極活物質層を、集電体上に形成して作製される。

## 【0368】

正極活物質を用いる正極の製造は、公知の何れの方法でも作製することができる。すなわち、正極活物質と結着剤、並びに必要に応じて導電材及び/又は増粘剤等を乾式で混合してシート状にしたものを正極集電体に圧着するか、又はこれらの材料を液体媒体に溶解又は分散させてスラリーとして、これを正極集電体に塗布し、乾燥することにより、正極活物質層を集電体上に形成させることにより正極を得ることができる。

30

## 【0369】

正極活物質の正極活物質層中の含有量は、通常10質量%以上、好ましくは30質量%以上、特に好ましくは50質量%以上、また、通常99.9質量%以下、好ましくは99質量%以下である。正極活物質層中の正極活物質の含有量が、上記範囲を下回ると、電気容量が不十分となる場合がある。また、上記範囲を上回ると、正極の強度が不足する場合がある。なお、正極活物質粉体は1種を単独で用いても良く、異なる組成又は異なる粉体物性の2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

40

## 【0370】

導電材としては、公知の導電材を任意に用いることができる。具体例としては、銅、ニッケル等の金属材料；天然黒鉛、人造黒鉛等の黒鉛（グラファイト）；アセチレンブラック等のカーボンブラック；ニードルコークス等の無定形炭素等の炭素質材料等が挙げられる。これらは、1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用してもよい。

## 【0371】

導電材は、正極活物質層中に、通常0.01質量%以上、好ましくは0.1質量%以上、より好ましくは1質量%以上、また、通常50質量%以下、好ましくは30質量%以下

50

、より好ましくは15質量%以下含有するように用いられる。導電材の含有量が上記範囲よりも下回ると、導電性が不十分となる場合がある。また、上記範囲よりも上回ると、電池容量が低下する場合がある。

#### 【0372】

正極活物質層の製造に用いる結着剤は、非水系電解液や電極製造時に用いる溶媒に対して安定な材料であれば、特に限定されない。

塗布法による場合の結着剤は、電極製造時に用いる液体媒体に対して溶解又は分散される材料であれば良いが、具体例としては、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリエチレンテレフタレート、ポリメチルメタクリレート、芳香族ポリアミド、セルロース、ニトロセルロース等の樹脂系高分子；SBR（スチレン・ブタジエンゴム）、NBR（アクリロニトリル・ブタジエンゴム）、フッ素ゴム、イソpreneゴム、ブタジエンゴム、エチレン・プロピレンゴム等のゴム状高分子；スチレン・ブタジエン・スチレンブロック共重合体又はその水素添加物、EPDM（エチレン・プロピレン・ジエン三元共重合体）、スチレン・エチレン・ブタジエン・エチレン共重合体、スチレン・イソprene・スチレンブロック共重合体又はその水素添加物等の熱可塑性エラストマー状高分子；シンジオタクチック-1,2-ポリブタジエン、ポリ酢酸ビニル、エチレン・酢酸ビニル共重合体、プロピレン・  
-オレフィン共重合体等の軟質樹脂状高分子；ポリフッ化ビニリデン（PVdF）、ポリテトラフルオロエチレン、フッ素化ポリフッ化ビニリデン、ポリテトラフルオロエチレン・エチレン共重合体等のフッ素系高分子；アルカリ金属イオン（特にリチウムイオン）のイオン伝導性を有する高分子組成物等が挙げられる。なお、これらの物質は、1種を単独で用いても良く、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用しても良い。

#### 【0373】

正極活物質層中の結着剤の割合は、通常0.1質量%以上であり、1質量%以上が好ましく、3質量%以上が更に好ましく、また、通常80質量%以下であり、60質量%以下が好ましく、40質量%以下が更に好ましく、10質量%以下が特に好ましい。

結着剤の割合が、上記範囲を下回ると、正極活物質を十分保持できずに正極の機械的強度が不足し、サイクル特性等の電池性能を悪化させてしまう場合がある。また、上記範囲を上回ると、電池容量や導電性の低下につながる場合がある。

#### 【0374】

スラリーを形成するための液体媒体としては、正極活物質、導電剤、結着剤、及び必要に応じて使用される増粘剤を溶解又は分散することが可能な溶媒であれば、その種類に特に制限はなく、水系溶媒と非水溶媒のどちらを用いても良い。

水系溶媒の例としては、例えば、水、アルコールと水との混合溶媒等が挙げられる。非水溶媒の例としては、ヘキサン等の脂肪族炭化水素類；ベンゼン、トルエン、キシレン、メチルナフタレン等の芳香族炭化水素類；キノリン、ピリジン等の複素環化合物；アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン類；酢酸メチル、アクリル酸メチル等のエステル類；ジエチレントリアミン、N・N-ジメチルアミノプロピルアミン等のアミン類；ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン（THF）等のエーテル類；N-メチルピロリドン（NMP）、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド等のアミド類；ヘキサメチルホスファルアミド、ジメチルスルホキシド等の非プロトン性極性溶媒等を挙げることができる。なお、これらは、1種を単独で用いてもよく、また2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用してもよい。

#### 【0375】

スラリーを形成するための液体溶媒として水系溶媒を用いる場合、増粘剤と、スチレンブタジエンゴム（SBR）等のラテックスを用いてスラリー化することが好ましい。増粘剤は、通常、スラリーの粘度を調整するために使用される。

増粘剤としては、本発明の効果を著しく損なわない限り制限はないが、具体的には、カルボキシメチルセルロース、メチルセルロース、ヒドロキシメチルセルロース、エチルセルロース、ポリビニルアルコール、酸化スターチ、リン酸化スターチ、カゼイン又はこれらの塩等が挙げられる。これらは、1種を単独で用いても、2種以上を任意の組み合わせ

及び／又は比率で併用しても良い。

#### 【0376】

増粘剤を使用する場合、活物質に対する増粘剤の割合は、通常0.1質量%以上、好ましくは0.5質量%以上、より好ましくは0.6質量%以上、また、通常5質量%以下、好ましくは3質量%以下、より好ましくは2質量%以下が望ましい。上記範囲を下回ると著しく塗布性が低下する場合があります、また上記範囲を上回ると、正極活物質層に占める活物質の割合が低下し、電池の容量が低下する問題や正極活物質間の抵抗が増大する場合があります。

#### 【0377】

スラリーの塗布、乾燥によって得られた正極活物質層は、正極活物質の充填密度を上げるために、ハンドプレス、ローラープレス等により圧密化することが好ましい。正極活物質層の密度は、 $1 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 以上が好ましく、 $1.5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 以上が更に好ましく、 $2 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 以上が特に好ましく、また、 $4 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 以下が好ましく、 $3.5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 以下が更に好ましく、 $3 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 以下が特に好ましい。正極活物質層の密度が、上記範囲を上回ると集電体／活物質界面付近への非水系電解液の浸透性が低下し、特に高電流密度での充放電特性が低下する場合がある。また上記範囲を下回ると、活物質間の導電性が低下し、電池抵抗が増大する場合がある。

#### 【0378】

正極集電体の材質としては特に制限は無く、公知のものを任意に用いることができる。具体例としては、アルミニウム、ステンレス鋼、ニッケルメッキ、チタン、タンタル等の金属材料；カーボンクロス、カーボンペーパー等の炭素質材料が挙げられる。中でも金属材料、特にアルミニウムが好ましい。

集電体の形状としては、金属材料の場合、金属箔、金属円柱、金属コイル、金属板、金属薄膜、エキスパンドメタル、パンチメタル、発泡メタル等が挙げられ、炭素質材料の場合、炭素板、炭素薄膜、炭素円柱等が挙げられる。これらのうち、金属薄膜が好ましい。なお、薄膜は適宜メッシュ状に成型してもよい。

#### 【0379】

集電体の金属薄膜の厚さは任意であるが、通常 $1 \mu\text{m}$ 以上であり、 $3 \mu\text{m}$ 以上が好ましく、 $5 \mu\text{m}$ 以上が更に好ましく、また、通常 $1 \text{ mm}$ 以下であり、 $100 \mu\text{m}$ 以下が好ましく、 $50 \mu\text{m}$ 以下が更に好ましい。金属薄膜が、上記範囲よりも薄いと、集電体として必要な強度が不足する場合がある。また、薄膜が上記範囲よりも厚いと、取り扱い性が損なわれたり、電池全体の容量が低下する場合がある。

#### 【0380】

集電体と正極活物質層の厚さの比は特に限定されないが、（非水系電解液注液直前の片面の活物質層厚さ）／（集電体の厚さ）が通常150以下であり、20以下が好ましく、10以下が特に好ましく、また、通常0.1以上であり、0.4以上が好ましく、1以上が特に好ましい。集電体と正極活物質層の厚さの比が、上記範囲を上回ると、高電流密度充放電時に集電体がジュール熱による発熱を生じる場合がある。また、上記範囲を下回ると、正極活物質に対する集電体の体積比が増加し、電池の容量が減少する場合がある。

#### 【0381】

##### 〔2-4. セパレータ〕

正極と負極との間には、短絡を防止するために、通常はセパレータを介在させる。

セパレータの材料や形状については特に制限は無く、本発明の効果を著しく損なわない限り、公知のものを任意に採用することができる。中でも、本発明の非水系電解液に対し安定な材料で形成された、樹脂、ガラス繊維、無機物等が用いられ、保液性に優れた多孔性シート又は不織布状の形態の物等を用いるのが好ましい。

#### 【0382】

樹脂、ガラス繊維セパレータの材料としては、例えば、ポリエチレン、ポリプロピレン等のポリオレフィン、ポリテトラフルオロエチレン、ポリエーテルスルホン、ガラスフィルター等を用いることができる。中でも好ましくはガラスフィルター、ポリオレフィンで

10

20

30

40

50

あり、更に好ましくはポリオレフィンである。これらの材料は1種を単独で用いてもよく、2種以上を任意の組み合わせ及び/又は比率で併用してもよい。

【0383】

上記セパレータの厚さは任意であるが、通常1  $\mu\text{m}$ 以上であり、5  $\mu\text{m}$ 以上が好ましく、10  $\mu\text{m}$ 以上が更に好ましく、また、通常50  $\mu\text{m}$ 以下であり、40  $\mu\text{m}$ 以下が好ましく、30  $\mu\text{m}$ 以下が更に好ましい。セパレータが、上記範囲より薄過ぎると、絶縁性や機械的強度が低下する場合がある。また、上記範囲より厚過ぎると、レート特性等の電池性能が低下する場合があるばかりでなく、非水系電解液二次電池全体としてのエネルギー密度が低下する場合がある。

【0384】

更に、セパレータとして多孔性シートや不織布等の多孔質のものをを用いる場合、セパレータの空孔率は任意であるが、通常20%以上であり、35%以上が好ましく、45%以上が更に好ましく、また、通常90%以下であり、85%以下が好ましく、75%以下が更に好ましい。空孔率が、上記範囲より小さ過ぎると、膜抵抗が大きくなってレート特性が悪化する傾向がある。また、上記範囲より大き過ぎると、セパレータの機械的強度が低下し、絶縁性が低下する傾向にある。

【0385】

また、セパレータの平均孔径も任意であるが、通常0.5  $\mu\text{m}$ 以下であり、0.2  $\mu\text{m}$ 以下が好ましく、また、通常0.05  $\mu\text{m}$ 以上である。平均孔径が、上記範囲を上回ると、短絡が生じ易くなる。また、上記範囲を下回ると、膜抵抗が大きくなりレート特性が低下する場合がある。

一方、無機物の材料としては、例えば、アルミナや二酸化珪素等の酸化物類、窒化アルミや窒化珪素等の窒化物類、硫酸バリウムや硫酸カルシウム等の硫酸塩類が用いられ、粒子形状又は繊維形状のものが用いられる。その形態としては、不織布、織布、微多孔性フィルム等の薄膜形状のものが用いられる。薄膜形状では、孔径が0.01~1  $\mu\text{m}$ 、厚さが5~50  $\mu\text{m}$ のものが好適に用いられる。前記の独立した薄膜形状以外に、樹脂性の結着剤を用いて前記無機物の粒子を含有する複合多孔層を正極及び/又は負極の表層に形成させてなるセパレータを用いることができる。例えば、正極の両面に、フッ素樹脂を結着剤として、90%粒径が1  $\mu\text{m}$ 未満のアルミナ粒子を含む多孔層を形成させることが挙げられる。

【実施例】

【0386】

以下、実施例及び比較例を挙げて本発明を更に具体的に説明するが、本発明は、その要旨を超えない限り、これらの実施例に限定されるものではない。

[実施例A]

<非水系電解液の調製>

[実施例1~4、比較例1]

乾燥アルゴン雰囲気下、環状カーボネートとしてエチレンカーボネート(以降、「EC」と称する)と、ジメチルカーボネートの混合物(容量比3:7)に、それぞれ十分に乾燥したLiPF<sub>6</sub>を1mol/Lとなるように加え、表-1で示す化合物の組み合わせで、表に記載の濃度となるように溶解して、実施例及び比較例の非水系電解液を調製した。

【0387】

[実施例5~11、14~24、比較例2~5、参考例12、13]

同様に、環状カーボネートとしてモノフルオロエチレンカーボネート(以降、「MFE」と称する)と、ジメチルカーボネートの混合物(容量比3:7)に、それぞれ十分に乾燥したLiPF<sub>6</sub>を1mol/Lとなるように加え、表-2及び表-3で示す化合物の組み合わせで、表に記載の濃度となるように溶解して、実施例及び比較例の非水系電解液を調製した。

【0388】

<正極の作製>



正極活物質としてのコバルト酸リチウム ( $\text{LiCoO}_2$ ) 97 質量%と、導電材としてのアセチレンブラック 1.5 質量%と、結着剤としてのポリフッ化ビニリデン ( $\text{PVdF}$ ) 1.5 質量%とを、N-メチルピロリドン溶媒中で混合して、スラリー化した。得られたスラリーを負極容量の90%の容量となるように、厚さ  $12\text{ }\mu\text{m}$  のアルミ箔の両面に塗布して乾燥し、プレス機で厚さ  $85\text{ }\mu\text{m}$  に圧延したものを、活物質が幅  $30\text{ mm}$ 、長さ  $40\text{ mm}$  となるように切り出して正極とした。作製した正極は摂氏  $80$  度において12時間減圧乾燥をして用いた。

#### 【0389】

##### <炭素負極の作製>

負極活物質として黒鉛粉末 98 質量部に、増粘剤、バインダーとしてそれぞれ、カルボキシメチルセルロースナトリウムの水性ディスパージョン (カルボキシメチルセルロースナトリウムの濃度 1 質量%) 1 質量部、及び、スチレン-ブタジエンゴムの水性ディスパージョン (スチレン-ブタジエンゴムの濃度 50 質量%) 1 質量部を加え、ディスパーザーで混合してスラリー化した。得られたスラリーを厚さ  $12\text{ }\mu\text{m}$  の銅箔の両面に塗布して乾燥し、プレス機で厚さ  $75\text{ }\mu\text{m}$  に圧延した。これを、活物質が幅  $30\text{ mm}$ 、長さ  $40\text{ mm}$  となるように切り出して負極とした。作製した負極は摂氏  $60$  度で12時間減圧乾燥して用いた。

#### 【0390】

##### <二次電池の作製>

上記の正極、負極、及びポリエチレン製のセパレータを、正極、セパレータ、負極、セパレータ、正極の順に積層して電池要素を作製した。この電池要素をアルミニウム (厚さ  $40\text{ }\mu\text{m}$ ) の両面を樹脂層で被覆したラミネートフィルムからなる袋内に正・負極の端子を突設させながら挿入した後、非水系電解液を袋内に  $0.6\text{ mL}$  注入し、真空封止を行ない、シート状電池を作製した。更に、電極間の密着性を高めるために、ガラス板でシート状電池を挟んで加圧した。

#### 【0391】

##### <電池の評価>

##### [4.33Vにおける高温保存試験]

上記シート状の電池を、 $25^\circ\text{C}$  において  $0.2\text{ C}$  に相当する定電流で充電終止電圧  $4.33\text{ V}$ 、放電終止電圧  $3\text{ V}$  で充放電を数サイクル行って安定させた。その後、 $4.33\text{ V}$  - 定電流 - 定電圧充電 ( $0.05\text{ C}$  カット) を行った後、 $85^\circ\text{C}$ 、1日間の条件で高温保存試験を行った。この高温保存の前後で、シート状電池をエタノール浴中に浸して、体積の変化から発生したガス量 (高温保存ガス量) を求めた。また、高温保存後の電池電圧と、残存した容量を測定した。

#### 【0392】

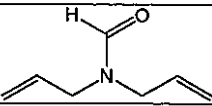
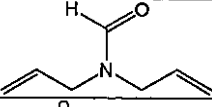
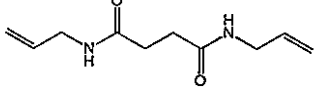
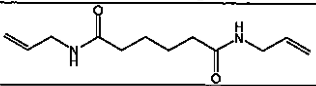
10

20

30

【表 1】

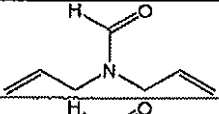
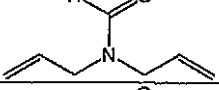
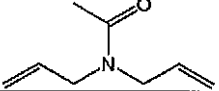
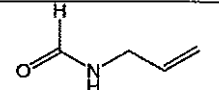
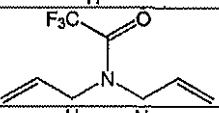
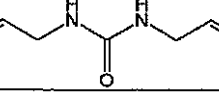
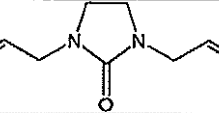
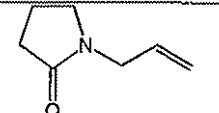
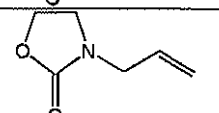
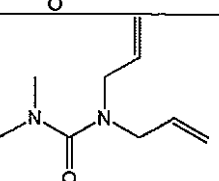
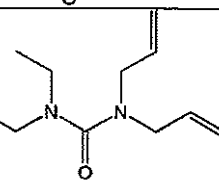
表-1 電解液の組成 (E C系)

	環状カーボネート	一般式(1)で表される化合物または比較の化合物		他の化合物	
		種類	濃度 (質量%)	種類	濃度 (質量%)
実施例-1	EC		0.5	ビニルカーボネート	2
実施例-2	EC		1.0	ビニルカーボネート	2
実施例-3	EC		0.5	ビニルカーボネート	2
実施例-4	EC		0.5	ビニルカーボネート	2
比較例-1	EC	—	—	ビニルカーボネート	2

【 0 3 9 3 】

【表 2】

表-2 電解液の組成 (MFEC系)

	環状カーボネート	一般式(1)で表される化合物または比較の化合物		他の化合物	
		種類	濃度 (質量%)	種類	濃度 (質量%)
実施例-5	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
実施例-6	MFEC		1.0	ビニルカーボネート	1
実施例-7	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
実施例-8	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
実施例-9	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
実施例-10	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
実施例-11	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
参考例-12	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
参考例-13	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
実施例-14	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1
実施例-15	MFEC		0.5	ビニルカーボネート	1

【0394】

10

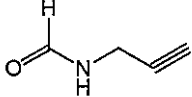
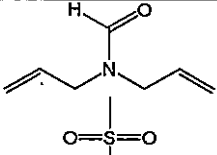
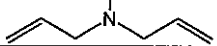
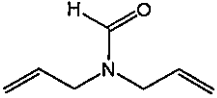
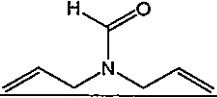
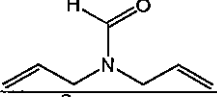
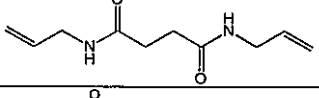
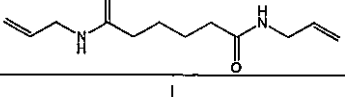
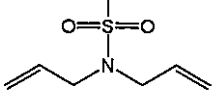
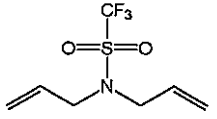
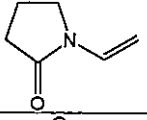
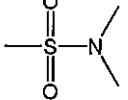
20

30

40

【表 3】

表-3 電解液の組成 (MFEC系)

	環状カーボネート	一般式(1)で表される化合物または比較の化合物		他の化合物	
		種類	濃度 (質量%)	種類	濃度 (質量%)
実施例-16	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	1
実施例-17	MFEC		0.3	ビニレンカーボネート	1
			0.2		
実施例-18	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	0.5
				アジポニトリル	1
実施例-19	MFEC		0.5	—	—
実施例-20	MFEC		0.5	アジポニトリル	1
実施例-21	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	1
実施例-22	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	1
実施例-23	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	1
				1,6-ジイソシアナトヘキサン	0.3
				アジポニトリル	1
実施例-24	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	1
				1,6-ジイソシアナトヘキサン	0.3
				アジポニトリル	1
比較例-2	MFEC	—	—	—	—
比較例-3	MFEC	—	—	ビニレンカーボネート	1
比較例-4	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	1
比較例-5	MFEC		0.5	ビニレンカーボネート	1

【 0 3 9 5 】

【表 4】

表-4 高温保存試験の結果 (EC系)

	高温保存ガス量 (ml)	高温保存後の電圧 (mV)	高温保存後の容量 (mAh/g)
実施例-1	0.34	4226	136
実施例-2	0.25	4235	137
実施例-3	0.25	4243	139
実施例-4	0.27	4238	138
比較例-1	0.40	4221	135

10

【0396】

【表 5】

表-5 高温保存試験の結果 (MFEC系)

	高温保存ガス量 (ml)	高温保存後の電圧 (mV)	高温保存後の容量 (mAh/g)
実施例-5	0.81	4243	135
実施例-6	0.62	4243	136
実施例-7	0.88	4236	131
実施例-8	0.72	4239	134
実施例-9	0.80	4240	131
実施例-10	0.53	4242	133
実施例-11	0.63	4244	133
参考例-12	0.88	4236	132
参考例-13	0.88	4236	131
実施例-14	0.93	4242	131
実施例-15	0.81	4244	131
実施例-16	0.74	4239	132
実施例-17	0.77	4238	136
実施例-18	0.63	4241	134
実施例-19	0.88	4239	133
実施例-20	0.63	4238	132
実施例-21	0.64	4238	132
実施例-22	0.52	4243	133
実施例-23	0.51	4243	136
実施例-24	0.59	4244	136
比較例-2	1.20	4232	128
比較例-3	0.99	4235	130
比較例-4	1.11	4219	124
比較例-5	0.99	4215	127

20

30

【0397】

40

[ 実施例 B ]

&lt; 非水系電解液の調製 &gt;

[ 実施例 25、比較例 6 ]

同様に、環状カーボネートとして EC、プロピレンカーボネートと、ジエチルカーボネートの混合物（容量比 1 : 5 : 4）に、それぞれ十分に乾燥した  $\text{LiPF}_6$  を 1 mol / L となるように加え、表 - 6 で示す化合物の組み合わせで、表記載の濃度となるように溶解して、実施例及び比較例の非水系電解液を調製した。

【0398】

&lt; 正極の作製 &gt;

正極活物質としてのコバルト酸リチウム ( $\text{LiCoO}_2$ ) 97 質量%と、導電材として

50

のアセチレンブラック 1.5 質量%と、結着剤としてのポリフッ化ビニリデン (PVdF) 1.5 質量%とを、N-メチルピロリドン溶媒中で混合して、スラリー化した。得られたスラリーを負極容量の 90%の容量となるように、厚さ 12  $\mu\text{m}$  のアルミ箔の両面に塗布して乾燥し、プレス機で厚さ 85  $\mu\text{m}$  に圧延したものを、活物質が幅 30 mm、長さ 40 mm となるように切り出して正極とした。作成した正極は摂氏 80 度において 12 時間減圧乾燥をして用いた。

#### 【0399】

##### <炭素負極の作製>

負極活物質として黒鉛粉末 98 質量部に、増粘剤、バインダーとしてそれぞれ、カルボキシメチルセルロースナトリウムの水性ディスパージョン (カルボキシメチルセルロースナトリウムの濃度 1 質量%) 1 質量部、及び、スチレン-ブタジエンゴムの水性ディスパージョン (スチレン-ブタジエンゴムの濃度 50 質量%) 1 質量部を加え、ディスパーザーで混合してスラリー化した。得られたスラリーを厚さ 12  $\mu\text{m}$  の銅箔の両面に塗布して乾燥し、プレス機で厚さ 75  $\mu\text{m}$  に圧延した。これを、活物質が幅 30 mm、長さ 40 mm となるように切り出して負極とした。作成した負極は摂氏 60 度で 12 時間減圧乾燥して用いた。

#### 【0400】

##### <二次電池の作製>

上記の正極、負極、及びポリエチレン製のセパレータを、正極、セパレータ、負極、セパレータ、正極の順に積層して電池要素を作製した。この電池要素をアルミニウム (厚さ 40  $\mu\text{m}$ ) の両面を樹脂層で被覆したラミネートフィルムからなる袋内に正・負極の端子を突設させながら挿入した後、非水系電解液を袋内に 0.6 mL 注入し、真空封止を行ない、シート状電池を作製した。更に、電極間の密着性を高めるために、ガラス板でシート状電池を挟んで加圧した。

#### 【0401】

##### <電池の評価>

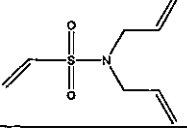
##### [4.2Vにおける高温保存試験]

上記シート状の電池を、25 において 0.2 C に相当する定電流で充電終止電圧 4.2 V、放電終止電圧 3 V で充放電を数サイクル行って安定させた。その後、4.2 V - 定電流 - 定電圧充電 (0.05 C カット) を行った後、80、3 日間の条件で高温保存試験を行った。この高温保存の前後で、シート状電池をエタノール浴中に浸して、体積の変化から発生したガス量 (高温保存ガス量) を求めた。また、高温保存後の電池電圧と、残存した容量を測定した。

#### 【0402】

##### 【表 6】

表-6 電解液の組成 (EC・PC系)

	環状カーボネート	一般式(1)で表される化合物 または比較の化合物		他の化合物	
		種類	濃度 (質量%)	種類	濃度 (質量%)
実施例-25	EC・PC		0.5	ビニルカーボネート ジフルオロリン酸リチウム	1.5 0.5
比較例-6	EC・PC	—		ビニルカーボネート ジフルオロリン酸リチウム	1.5 0.5

#### 【0403】

【表 7】

表-7 高温保存試験の結果（EC・PC系）

	高温保存ガス量 (ml)	高温保存後の電圧 (mV)	高温保存後の容量 (mAh/g)
実施例-25	0.10	4155	174
比較例-6	0.17	4154	170

## 【0404】

表-4、表-5及び表-7から明らかなように、実施例-1～25の電池は、正極保護効果により高温保存後のガス量が少なく、電圧及び容量が優れる。従って、本発明に係る非水系電解液を用いた電池は、電池の充電状態での高温保存時におけるガス発生が少なく、充放電特性、特に、高温保存の電圧及び容量に優れていることがわかる。

10

それに対して、比較例-1～3、6の電池は高温保存後のガス量が多く、電圧及び容量も低くなっている。また、比較例-4の電池では、炭素-炭素不飽和結合がアミド基に直接結合するアミド化合物を用いているので、本発明のアミド化合物よりも劣る。さらに、比較例-5の電池では、アミド基に炭素-炭素不飽和結合をもたないアミド化合物を用いているので、本発明のアミド化合物よりも劣る。

## 【0405】

本発明を詳細に、また特定の実施態様を参照して説明したが、本発明の精神と範囲を逸脱することなく様々な変更や修正を加えることができることは当業者にとって明らかである。

20

本出願は2011年2月22日出願の日本特許出願（特願2011-036427）に基づくものであり、その内容はここに参照として取り込まれる。

## 【産業上の利用可能性】

## 【0406】

本発明の非水系電解液によれば、非水系電解液二次電池の電解液の分解を抑制し、電池を高温環境下で使用した際にガス発生及び電池の劣化を抑制すると共に、高エネルギー密度の非水系電解液二次電池を製造することができる。従って、非水系電解液二次電池が用いられる電子機器等の各種の分野において好適に利用できる。

本発明の二次電池用非水系電解液や非水系電解液二次電池の用途は特に限定されず、公知の各種の用途に用いることが可能である。具体例としては、ノートパソコン、ペン入力パソコン、モバイルパソコン、電子ブックプレーヤー、携帯電話、携帯ファックス、携帯コピー、携帯プリンター、ヘッドフォンステレオ、ビデオムービー、液晶テレビ、ハンディークリーナー、ポータブルCD、ミニディスク、トランシーバー、電子手帳、電卓、メモリーカード、携帯テープレコーダー、ラジオ、バックアップ電源、モーター、自動車、バイク、原動機付自転車、自転車、照明器具、玩具、ゲーム機器、時計、電動工具、ストロボ、カメラ等を挙げることができる。

30

---

フロントページの続き

(56)参考文献 特開2007-172990(JP,A)  
特開2003-234127(JP,A)  
特開2004-296116(JP,A)  
特開2004-103433(JP,A)  
特開2004-259697(JP,A)  
特開平07-192758(JP,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H01M 10/052、10/0567