

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)(11) 공개번호 10-2025-0026887
(43) 공개일자 2025년02월25일

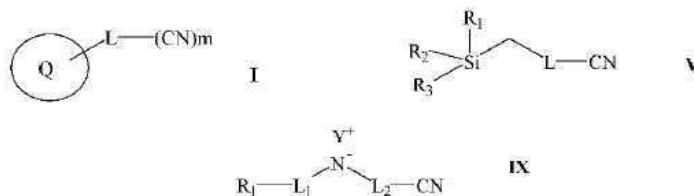
- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01M 10/0567 (2010.01) C07C 255/35 (2006.01)
H01M 10/0525 (2010.01) H01M 10/42 (2014.01)
- (52) CPC특허분류
H01M 10/0567 (2013.01)
C07C 255/35 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2025-7005075(분할)
- (22) 출원일자(국제) 2019년10월03일
심사청구일자 없음
- (62) 원출원 특허 10-2021-7008795
원출원일자(국제) 2019년10월03일
심사청구일자 2022년09월05일
- (85) 번역문제출일자 2025년02월17일
- (86) 국제출원번호 PCT/CA2019/051415
- (87) 국제공개번호 WO 2020/069619
국제공개일자 2020년04월09일
- (30) 우선권주장
62/741,275 2018년10월04일 미국(US)
- (71) 출원인
하이드로-퀘벡
캐나다 에치2제트 1에이4 퀘벡 몬트리올 불바르
르네레베스크 웨스트 75
가부시키가이샤 무라타 세이사쿠쇼
일본국 교토후 나가오카교시 히가시코타리 1초메
10반 1고
- (72) 발명자
말렛, 샤르롯뜨
캐나다, 아쉬2엘 3에스1 퀘벡, 몽레알, 뤼 드 멘
타나, 4065
호송, 실비안느
캐나다, 제0익스 2제0 퀘벡, 썩-아텔프, 랑 썩-떼
밀리, 481
자그립, 까림
캐나다, 지4엔 1페8 퀘벡, 룡거일, 뤼 마르셀르
페롱, 2006
- (74) 대리인
특허법인오리진

전체 청구항 수 : 총 30 항

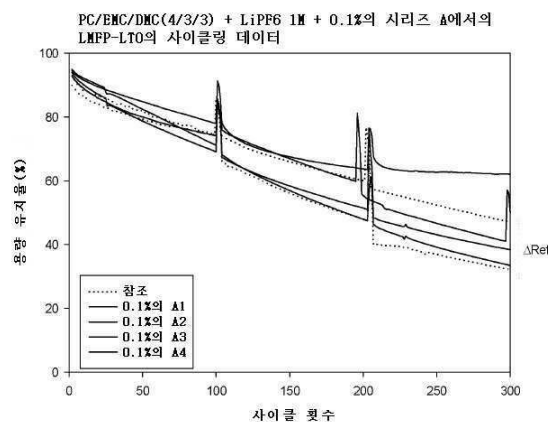
(54) 발명의 명칭 Li-이온 배터리에서의 전해질용의 첨가제

(57) 요약

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법. 해당 방법은 배터리의 전해질과 관련하여 하기에 제시된 일반식 I, V 또는 IX의 나이트릴계 소형 유기 화합물을 포함한다:



대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01M 10/0525 (2013.01)

H01M 10/4235 (2013.01)

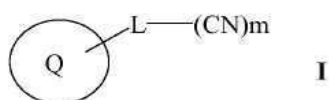
Y02E 60/10 (2020.08)

명세서

청구범위

청구항 1

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 I을 갖는, 방법:



식 중,

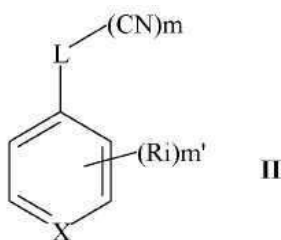
Q는 5 내지 12-원 고리 또는 이환식 고리이고, 선택적으로 상기 고리는 동일 또는 상이하고 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 1개 이상의 헤테로원자를 포함하고; 바람직하게는 Q는 5 내지 10-, 또는 5- 또는 6-원 고리 또는 이환식 고리이고;

L은 존재하거나 또는 존재하지 않고, 알킬, 알켄 및 알킨기 중 1개 이상을 포함하는 링커이고; 그리고

m은 1 내지 10, 또는 1 내지 6, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

청구항 2

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 II를 갖는, 방법:



식 중,

X는 C 또는 N이고;

L은 존재하거나 또는 존재하지 않고 알킬, 알켄 및 알킨기 중 하나 이상을 포함하는 링커이고;

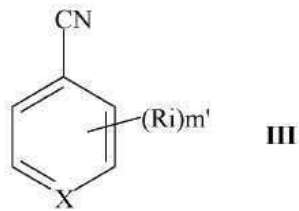
Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고;

m은 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이고; 그리고

m'은 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

청구항 3

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 III을 갖는, 방법:



식 중,

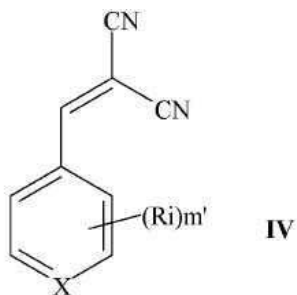
X는 C 또는 N이고;

Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 그리고

m'은 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

청구항 4

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **IV**를 갖는, 방법:



식 중,

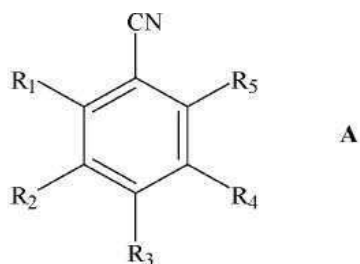
X는 C 또는 N이고;

Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 그리고

m'은 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

청구항 5

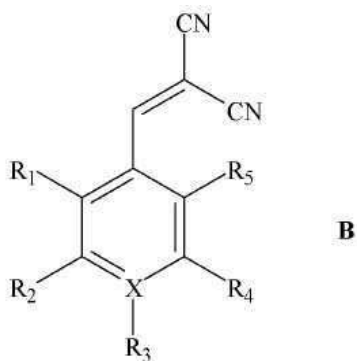
Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **A**를 갖는, 방법:



식 중, R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH_2 , 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO_2 , SO_2 , COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 6

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **B**를 갖는, 방법:



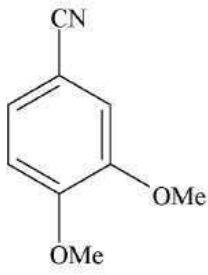
식 중,

X는 C이고 R_5 는 H이거나; 또는 X는 N이고; 그리고

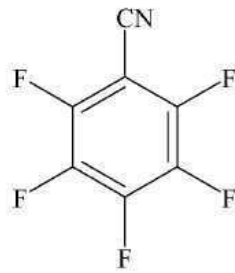
R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH_2 , 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO_2 , SO_2 , COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 7

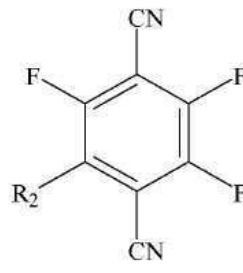
Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 **A1**, **A2**, **A3** 또는 **A4**인, 방법:



A1

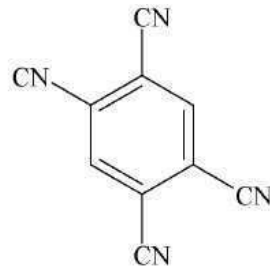


A2



A3

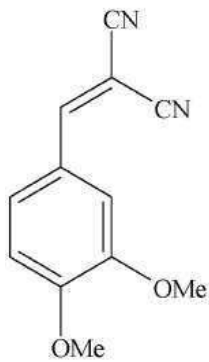
또는



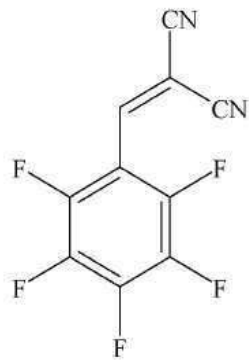
A4

청구항 8

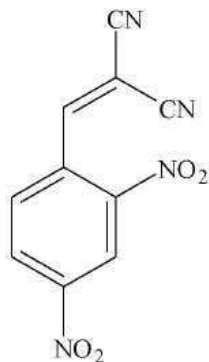
Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7 또는 B8인, 방법:



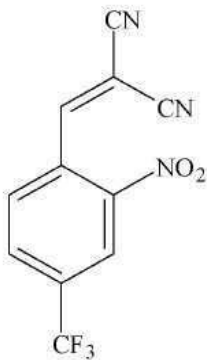
B1



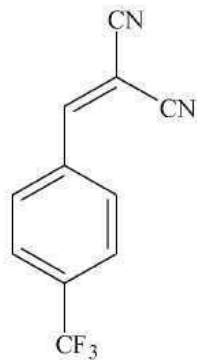
B2



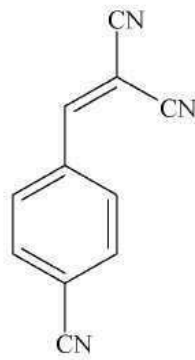
B3



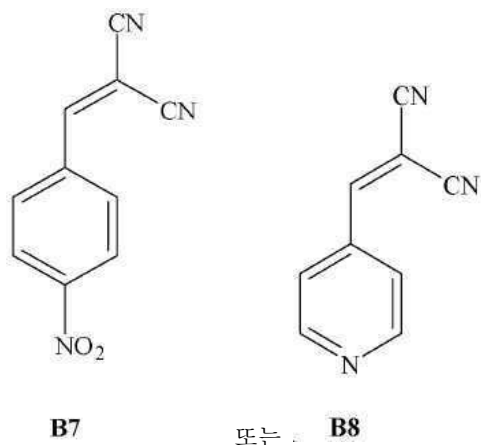
B4



B5

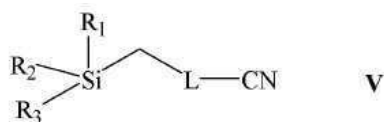


B6



청구항 9

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **V**를 갖는, 방법:



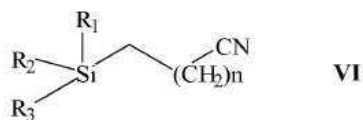
식 중,

L은 존재하거나 또는 존재하지 않고 알킬, 알켄 및 알킨기 중 하나 이상을 포함하는 링커이고; 그리고

R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로 알킬기; 바람직하게는 C1 내지 C6 또는 C1 내지 C3 알킬기이고; R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나는 CH₃이거나, 또는 R₁ 내지 R₃의 각각은 CH₃이다.

청구항 10

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **VI**을 갖는, 방법:



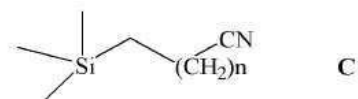
식 중,

n은 0 내지 6, 또는 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 0 내지 2의 정수이고; 바람직하게는 n은 0 내지 3의 정수이고; 더 바람직하게는 n은 0 또는 1이고; 그리고

R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로 알킬기; 바람직하게는 C1 내지 C6 또는 C1 내지 C3 알킬기이고; R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나는 CH₃이거나, 또는 R₁ 내지 R₃의 각각은 CH₃이다.

청구항 11

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **C**을 갖는, 방법:

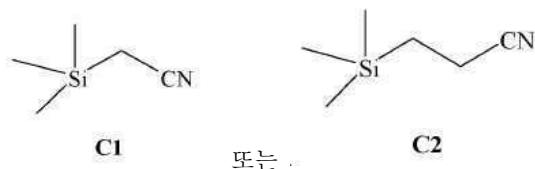


식 중, n은 0 내지 6, 또는 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 0 내지 2의 정수이고; 바람직하게는

n은 0 내지 3의 정수이고; 더 바람직하게는 n은 0 또는 1이다.

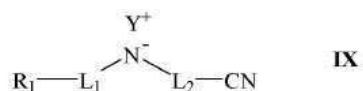
청구항 12

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 **C1** 또는 **C2**인, 방법:



청구항 13

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 하기 일반식 **IX**를 갖는, 방법:



식 중,

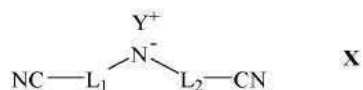
R_1 은 CN 또는 CH_3 이고;

L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 존재하거나 또는 존재하지 않고 각각 독립적으로 알킬, 알켄 및/또는 알킨기를 포함하는 링커이고; 그리고

Y는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y는 Na이다.

청구항 14

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 하기 일반식 **X**를 갖는, 방법:



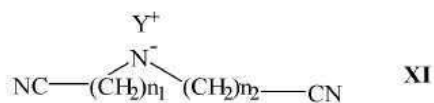
식 중,

L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 존재하거나 또는 존재하지 않고 각각 독립적으로 알킬, 알켄 및 알킨기 중 하나 이상을 포함하는 링커이고; 그리고

Y는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y는 Na이다.

청구항 15

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 하기 일반식 **XI**을 갖는, 방법:



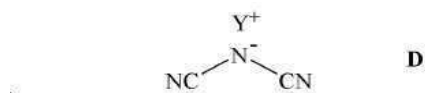
식 중,

n_1 및 n_2 는 각각 독립적으로 0 내지 10, 또는 0 내지 6, 또는 0 내지 3의 정수이고; 바람직하게는 n_1 및 n_2 중 적어도 하나는 0이거나, 또는 n_1 및 n_2 는 둘 다 0이고; 그리고

Y는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y는 Na이다.

청구항 16

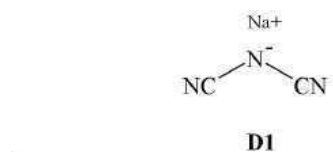
Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 하기 일반식 **D**를 갖는, 방법:



식 중, Y는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y는 Na이다.

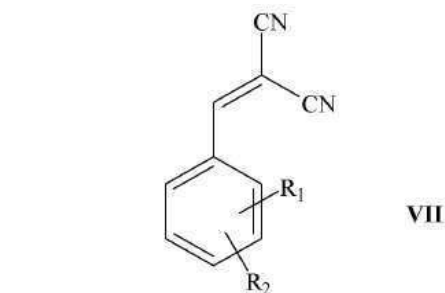
청구항 17

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 하기 일반식 **D1**을 갖는, 방법:



청구항 18

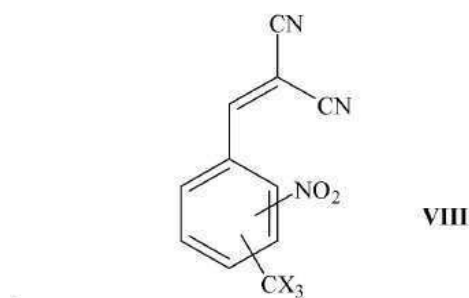
하기에 제시된 하기 일반식 **VII**을 갖는 화합물:



식 중, R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH_2 , 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO_2 , SO_2 , COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 19

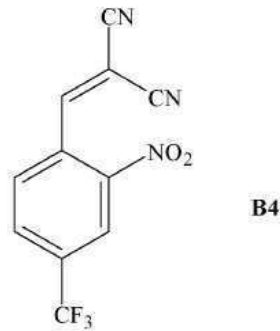
하기에 제시된 하기 일반식 **VIII**을 갖는, 화합물:



식 중, X는 할로젠 원자이고; 바람직하게는 X는 F이다.

청구항 20

하기에 제시된 화학식 B4의 화합물:

**청구항 21**

Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 상기 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 제18항 내지 제20항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같은 것인, 방법.

청구항 22

제1항 내지 제17항 및 제21항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 나이트릴계 유기 화합물은 상기 전해질에 첨가되고; 선택적으로 상기 첨가제(나이트릴계 유기 화합물)의 양은 약 0.01 내지 약 5.0 중량%, 또는 약 0.01 내지 약 3.0 중량%, 또는 약 0.01 내지 약 1.0 중량%, 또는 약 0.05 내지 약 1.0 중량%, 또는 약 0.1 내지 약 1.0 중량%, 약 0.1 내지 약 0.8 중량%, 또는 약 0.1 내지 약 0.5 중량%, 또는 약 0.1 내지 약 0.3 중량%이거나, 0.1 중량%이거나, 또는 0.5 중량%인, 방법.

청구항 23

제1항 내지 제17항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같은 I, II, III, IV, A, B, A1, A2, A3, A4, B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, V, VI, C, C1, C2, IX, X, XI, D 및 D1로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물을 포함하는 전해질.

청구항 24

제18항 내지 제20항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같은 화합물을 포함하는 전해질.

청구항 25

제23항 또는 제24항에 정의된 바와 같은 전해질을 포함하는 배터리.

청구항 26

Li-이온 배터리에 사용하기 위한 전해질용의 첨가제로서, 제1항 내지 제17항 중 어느 한 항의 I, II, III, IV, A, B, A1, A2, A3, A4, B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, V, VI, C, C1, C2, IX, X, XI, D 및 D1로부터 선택된 화합물을 포함하는, 첨가제.

청구항 27

Li-이온 배터리에 사용하기 위한 전해질용의 첨가제로서, 제18항 내지 제20항 중 어느 한 항에 정의된 바와 같은 화합물을 포함하는, 첨가제.

청구항 28

제1항 내지 제27항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 Li-이온 배터리는 캐소드가 리튬-함유 물질을 포함하는 배터리인, 방법, 전해질, 배터리 또는 첨가제.

청구항 29

제1항 내지 제27항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 Li-이온 배터리는, 캐소드가 올리빈(olivine), 리튬 옥사이드, 니켈 망간 코발트 옥사이드(NMC)를 포함하는 리튬 코발트 옥사이드(LCO), 리튬 망간 옥사이드(LMO), 리튬 니켈 옥사이드(LNO) 등을 포함하는 배터리인, 방법, 전해질, 배터리 또는 첨가제.

청구항 30

제28항 또는 제30항에 있어서, 상기 배터리의 성능(용량, 가역성)이 향상되는, 방법, 전해질, 배터리 또는 첨가제.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 일반적으로 Li-이온 배터리의 첨가제에 관한 것이다. 더욱 구체적으로, 본 발명은 Li-이온 배터리에서 전해질과 관련하여 사용하기 위한 나이트릴계 첨가제에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] Li-이온 배터리는 에너지 공급원으로서 광범위하게 사용되고, 그 수요는 증가하고 있다. 전형적으로, 이러한 배터리는 음극 또는 애노드, 양극 또는 캐소드, 및 두 이격된 전극 사이에 제공되는 전해질을 포함한다. 전해질은 유기 분자 또는 중합체를 포함할 수 있고, 일반적으로 또한 리튬염, 예컨대, LiPF₆, LiTFSI 또는 LiFSI를 포함한다. 또한, 전해질은 선형 카보네이트, 예컨대, 다이메틸 카보네이트(DMC), 디에틸 카보네이트(DEC), 에틸메틸 카보네이트(EMC) 또는 환식 카보네이트, 예컨대, 에틸렌 카보네이트(EC), 프로필렌 카보네이트(PC) 및 부틸렌 카보네이트(BC)를 포함할 수 있다.

[0003] 전해질의 속성 및 조성물에 관련되고 Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 것을 목적으로 하는 각종 연구가 당업계에 보고되어 있다. 예를 들어, 1개 이상의 나이트릴기를 포함하는 첨가제의 사용이 보고되어 있다 [1 내지 3]. 실제로, 나이트릴기를 포함하는 유기 화합물은 양호한 전기화학적 성질 및 고전압 및 온도에서의 안정성을 제공하는 것이 당업계에 공지되어 있다.

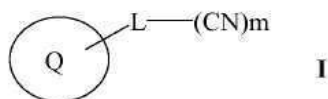
[0004] Li-이온 배터리의 성능 및 안정성을 향상시키는 방법에 대한 요구가 여전히 있다. 특히, 전해질 내 첨가제로서 사용하기 위한 나이트릴계 유기 화합물에 대한 요구가 있다.

발명의 내용

[0005] 본 발명자들은 Li-이온 배터리에서 전해질과 관련하여 사용하기 위한 첨가제를 설계하고 제조하였다. 본 발명의 첨가제는 적어도 1개의 나이트릴기를 포함하는 본 명세서에 기재된 바와 같은 유기 화합물이다. 유기 화합물은 전해질뿐만 아니라 배터리의 기타 성분과도 양립 가능(compatible)하다.

[0006] 따라서, 본 발명은 이의 양상에 따라서 하기를 제공한다:

[0007] (1) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 I을 갖는다:



[0008]

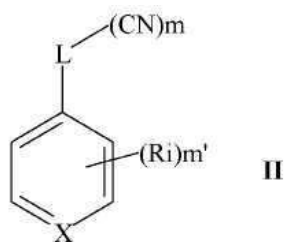
[0009] 식 중,

[0010] Q는 5 내지 12-원 고리 또는 이환식 고리이고, 선택적으로 고리는 동일 또는 상이하고 N, O 및 S로 이루어진 군으로부터 선택된 1개 이상의 헤테로원자를 포함하고; 바람직하게는 Q는 5 내지 10-, 또는 5-, 또는 6-원 고리 또는 이환식 고리이고;

[0011] L은 존재하거나 또는 존재하지 않고, 알킬, 알켄 및 알킨기 중 1개 이상을 포함하는 링커이고; 그리고

[0012] m은 1 내지 10, 또는 1 내지 6, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

[0013] (2) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 II를 갖는다:



[0014]

[0015] 식 중,

[0016] X는 C 또는 N이고;

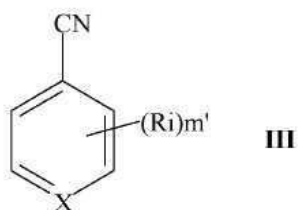
[0017] L은 존재하거나 또는 존재하지 않고 알킬, 알켄 및 알킨기 중 하나 이상을 포함하는 링커이고;

[0018] Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[0019] m은 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이고; 그리고

[0020] m'은 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

[0021] (3) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 III을 갖는다:



[0022]

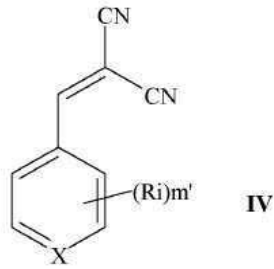
[0023] 식 중,

[0024] X는 C 또는 N이고;

[0025] Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 그리고

[0026] m'은 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

[0027] (4) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 IV를 갖는다:



[0028]

[0029]

[0030]

[0031]

[0032]

[0033]

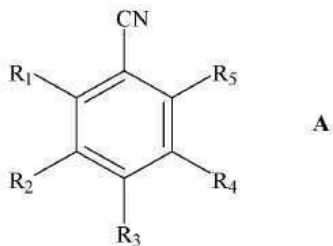
식 중,

X는 C 또는 N이고;

Ri는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 그리고

m'은 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 1 내지 5, 또는 1 내지 4, 또는 1 내지 3의 정수이다.

(5) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 A를 갖는다:



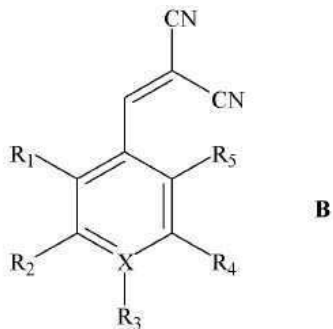
[0034]

[0035]

[0036]

식 중, R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택된다.

(6) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 B를 갖는다:



[0037]

[0038]

[0039]

[0040]

식 중,

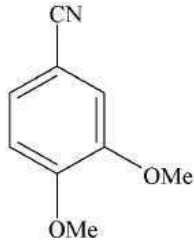
X는 C이고 R₃은 H이거나; 또는 X는 N이고; 그리고

R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH,

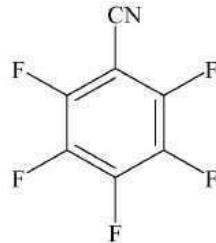
SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 R₁ 내지 R₅는 각각 독립적으로 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0041]

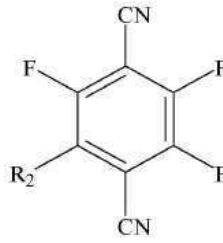
(7) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 **A1**, **A2**, **A3** 또는 **A4**이다:



A1



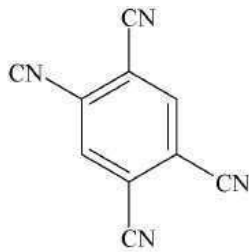
A2



A3

[0042]

또는

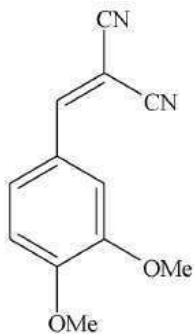


A4

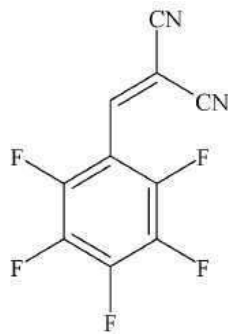
[0043]

[0044]

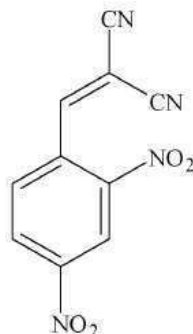
(8) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기 **B1**, **B2**, **B3**, **B4**, **B5**, **B6**, **B7** 또는 **B8**이다:



B1

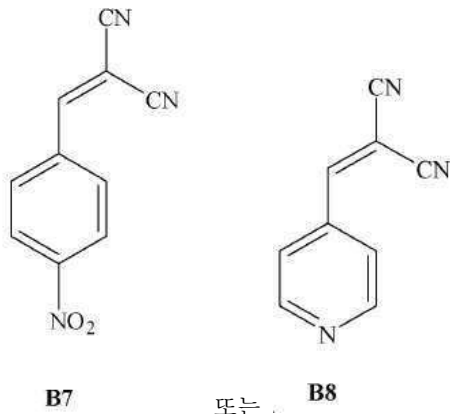
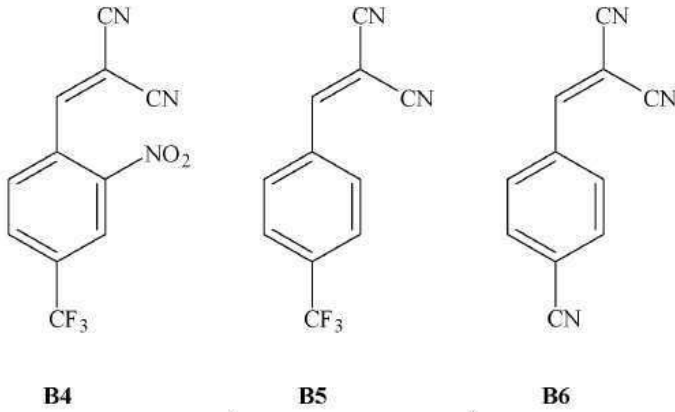


B2

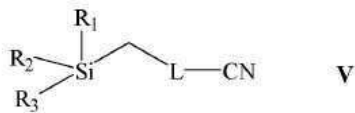


B3

[0045]



(9) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **V**를 갖는다:

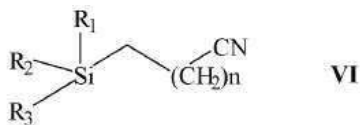


식 중,

L은 존재하거나 또는 존재하지 않고 알킬, 알켄 및 알킨기 중 하나 이상을 포함하는 링커이고; 그리고

R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로 알킬기; 바람직하게는 C1 내지 C6 또는 C1 내지 C3 알킬기이고; 더 바람직하게는 R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나는 CH₃이거나, 또는 R₁ 내지 R₃의 각각은 CH₃이다.

(10) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **VI**을 갖는다:



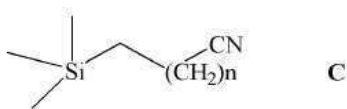
식 중,

n은 0 내지 6, 또는 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 0 내지 2의 정수이고; 바람직하게는 n은 0 내지 3의 정수이고; 더 바람직하게는 n은 0 또는 1이고; 그리고

R₁ 내지 R₃은 각각 독립적으로 알킬기; 바람직하게는 C1 내지 C6 또는 C1 내지 C3 알킬기이고; R₁ 내지 R₃ 중 적어도 하나는 CH₃이거나, 또는 R₁ 내지 R₃의 각각은 CH₃이다.

(11) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기

화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **C** 를 갖는다:



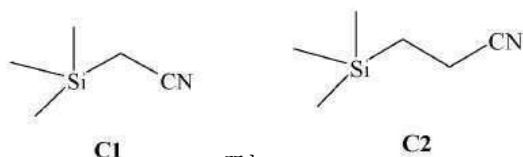
[0059]

[0060]

식 중, n 은 0 내지 6, 또는 0 내지 5, 또는 0 내지 4, 또는 0 내지 3, 또는 0 내지 2의 정수이고; 바람직하게는 n 은 0 내지 3의 정수이고; 더 바람직하게는 n 은 0 또는 1이다.

[0061]

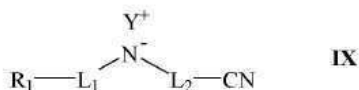
(12) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 **C1** 또는 **C2**이다:



[0062]

[0063]

(13) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **IX**를 갖는다:



[0064]

[0065]

식 중,

[0066]

R_1 은 CN 또는 CH_3 이고;

[0067]

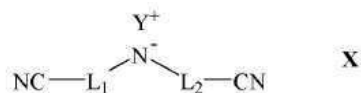
L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 존재하거나 또는 존재하지 않고 각각 독립적으로 알킬, 알켄 및/또는 알킨기를 포함하는 링커이고; 그리고

[0068]

Y 는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y 는 Na이다.

[0069]

(14) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **X**를 갖는다:



[0070]

[0071]

식 중,

[0072]

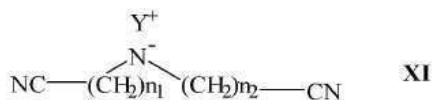
L_1 및 L_2 는 각각 독립적으로 존재하거나 또는 존재하지 않고 각각 독립적으로 알킬, 알켄 및 알킨기 중 하나 이상을 포함하는 링커이고; 그리고

[0073]

Y 는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y 는 Na이다.

[0074]

(15) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **XI**을 갖는다:



[0075]

[0076]

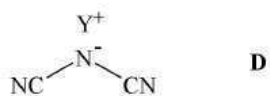
식 중,

[0077]

$n1$ 및 $n2$ 는 각각 독립적으로 0 내지 10, 또는 0 내지 6, 또는 0 내지 3의 정수이고; 바람직하게는 $n1$ 및 $n2$ 중 적어도 하나는 0이거나, 또는 $n1$ 및 $n2$ 는 둘 다 0이고; 그리고

[0078] Y는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y는 Na이다.

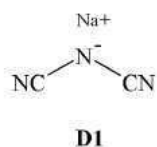
[0079] (16) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **D**를 갖는다:



[0080]

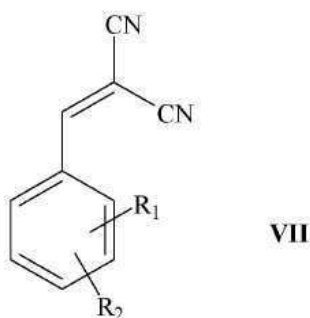
[0081] 식 중, Y는 Na, K 또는 Li이고; 바람직하게는 Y는 Na이다.

[0082] (17) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 하기에 제시된 일반식 **D1**을 갖는다:



[0083]

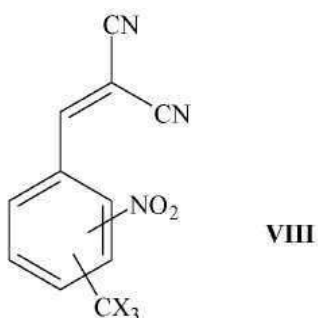
[0084] (18) 하기에 제시된 일반식 **VII**을 갖는 화합물:



[0085]

[0086] 식 중, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 H, 알킬, 사이클로알킬, 알켄, 알킨, 아릴 및 알킬아릴, 알콕시, 티오알콕시, OH, SH, NH₂, 할로젠 원자, 할로게노 알킬, 할로게노 알콕시, 할로게노 티오알콕시, 사이아노 알킬, 사이아노 알켄, 사이아노 알킨, CN, NO₂, SO₂, COOH 및 아실옥시카보닐로 이루어진 군으로부터 선택되고; 바람직하게는 H, 알킬옥시, 할로젠, 할로게노 알킬, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택되고; 더 바람직하게는 H, 할로젠, 나이트로 및 사이아노로 이루어진 군으로부터 선택된다.

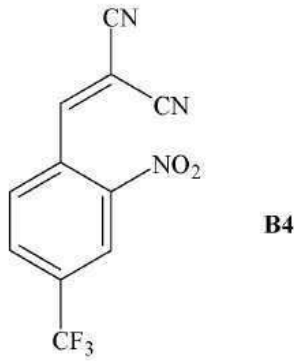
[0087] (19) 하기에 제시된 일반식 **VIII**을 갖는 화합물:



[0088]

[0089] 식 중, X는 할로젠 원자이고; 바람직하게는 X는 F이다.

[0090] (20) 하기에 제시된 **B4**를 갖는 화합물:



[0091]

[0092]

(21) Li-이온 배터리의 성능 및 안전성을 향상시키는 방법으로서, 배터리의 전해질과 관련하여 나이트릴계 유기 화합물을 이용하는 단계를 포함하되, 상기 화합물은 상기 (18) 내지 (20) 중 어느 하나에 정의된 바와 같다.

[0093]

(22) 상기 (1) 내지 (17) 및 (21) 중 어느 하나에 따른 방법에 있어서, 나이트릴계 유기 화합물은 전해질에 첨가되고; 선택적으로 첨가제(나이트릴계 유기 화합물)의 양은 약 0.01 내지 약 5.0 중량%, 또는 약 0.01 내지 약 3.0 중량%, 또는 약 0.01 내지 약 1.0 중량%, 또는 약 0.05 내지 약 1.0 중량%, 또는 약 0.1 내지 약 1.0 중량%, 약 0.1 내지 약 0.8 중량%, 또는 약 0.1 내지 약 0.5 중량%, 또는 약 0.1 내지 약 0.3 중량%이거나, 0.1 중량%이거나, 또는 0.5 중량%이다.

[0094]

(23) 상기 (1) 내지 (17)의 방법 중 어느 하나에 정의된 바와 같은 I, II, III, IV, A, B, A1, A2, A3, A4, B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, V, VI, C, C1, C2, IX, X, XI, D 및 D1로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물을 포함하는 전해질.

[0095]

(24) 상기 (18) 내지 (20) 중 어느 하나에 정의된 바와 같은 화합물을 포함하는 전해질.

[0096]

(25) 상기 (23) 또는 (24)에 정의된 바와 같은 전해질을 포함하는 배터리.

[0097]

(26) Li-이온 배터리에 사용하기 위한 전해질용의 첨가제로서, 상기 (1) 내지 (17) 중 어느 하나에 정의된 바와 같은 I, II, III, IV, A, B, A1, A2, A3, A4, B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, V, VI, C, C1, C2, IX, X, XI, D 및 D1로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물을 포함하는, 첨가제.

[0098]

(27) Li-이온 배터리에 사용하기 위한 전해질용의 첨가제로서, 상기 (18) 내지 (20) 중 어느 하나에 정의된 바와 같은 화합물을 포함하는, 첨가제.

[0099]

(28) (1) 내지 (27) 중 어느 하나에 정의된 바와 같은 방법, 전해질, 배터리 또는 첨가제에 있어서, Li-이온 배터리는 캐소드가 리튬-함유 물질을 포함하는 배터리이다.

[0100]

(29) (1) 내지 (27) 중 어느 하나에 정의된 바와 같은 방법, 전해질, 배터리 또는 첨가제에 있어서, Li-이온 배터리는, 캐소드가 올리빈(olivine), 리튬 옥사이드, 니켈 망간 코발트 옥사이드(NMC)를 포함하는 리튬 코발트 옥사이드(LCO), 리튬 망간 옥사이드(LMO), 리튬 니켈 옥사이드(LNO) 등을 포함하는 배터리이다.

[0101]

(30) 상기 (28) 또는 (30)에 따른 방법, 전해질, 배터리 또는 첨가제에 있어서, 배터리의 성능(용량, 가역성)이 향상된다.

[0102]

본 발명의 기타 목적, 이점 및 특징은, 첨부 도면을 참조하여 단지 예로서 부여되는 구체적인 실시형태의 이하의 비제한적인 설명을 읽으면 더욱 명백해질 것이다.

도면의 간단한 설명

[0103]

특허 또는 출원 파일은 컬러로 이루어진 적어도 하나의 도면을 포함한다. 컬러 도면(들)을 가진 본 특허 또는 특허 출원 공보의 사본은 요청 및 필요한 비용을 지불 시 특허청에서 제공될 것이다.

첨부 도면에 있어서:

도 1: 45°C에서 300 사이클 후의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.1 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 A의 화합물)) 대 참조(즉, 참조용 배터리)의 사이클링 데이터(Cycling data).

도 2: 45°C에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.1 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈

A의 화합물)) 대 참조의 정적 용량(0.05C).

도 3: 0 및 100 사이클에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.1 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 A의 화합물)) 대 참조의 나이퀴스트 플롯.

도 4: 45℃에서 300 사이클 후의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 B의 화합물)) 대 참조의 사이클링 데이터.

도 5: 45℃에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 B의 화합물)) 대 참조의 정적 용량(0.05C).

도 6: 0 및 200 사이클에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 B의 화합물)) 대 참조의 나이퀴스트 플롯.

도 7: 45℃에서 300 사이클 후의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 C의 화합물)) 대 참조의 사이클링 데이터.

도 8: 45℃에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 C의 화합물)) 대 참조의 정적 용량(0.05C).

도 9: 0 및 100 사이클에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 C의 화합물)) 대 참조의 나이퀴스트 플롯.

도 10: 45℃에서 100 사이클 후의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 D의 화합물)) 대 참조의 사이클링 데이터.

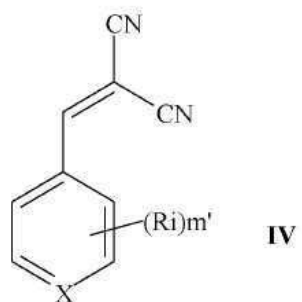
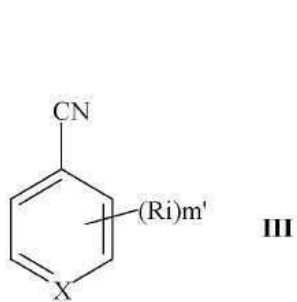
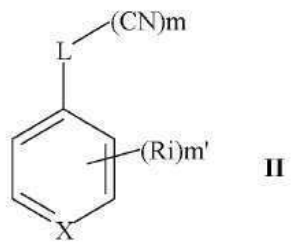
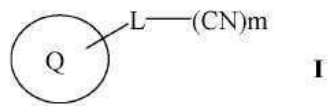
도 11: 45℃에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3) + 1M LiPF₆ + 0.5 중량%의 본 발명에 따른 첨가제(시리즈 D)) 대 참조의 정적 용량(0.05C).

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

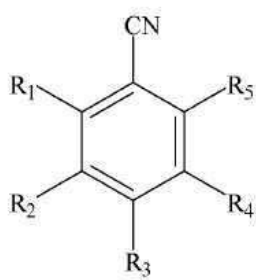
- [0104] 본 발명을 더욱 설명하기 전에, 본 발명이 이하에 설명되는 특정 실시형태로 제한되지 않고, 이들 실시형태의 변형이 이루어질 수 있고 이는 첨부된 청구범위의 범위 내에 들어가는 것임을 이해해야 한다. 이용되는 용어는 특정 실시형태를 설명하기 위한 것이며 제한하려는 의도가 아님을 또한 이해해야 한다. 대신에, 본 발명의 범위는 첨부된 청구범위에 의해 확립될 것이다.
- [0105] 본 명세서에서 사용되는 용어의 명확하면서도 일관된 이해를 제공하기 위하여, 다수의 정의가 이하에 제공된다. 또한, 달리 정의되지 않는 한, 본 명세서에서 사용되는 모든 기술적 및 과학적 용어는 본 개시내용이 속하는 기술분야에서 통상의 기술자에게 보통 이해되는 것과 동일한 의미를 갖는다.
- [0106] "단수 표현"의 단어의 사용은 청구범위 및/또는 명세서에서 용어 "포함하는"과 함께 사용될 경우 "하나"를 의미할 수 있지만, 이것은 또한 "하나 이상", "적어도 하나" 및 "하나 또는 하나 초과"의 의미와 일치한다. 마찬가지로, "다른"이라는 단어는 적어도 제2 또는 그 이상을 의미할 수 있다.
- [0107] 본 명세서 및 청구항(들)에서 사용되는 바와 같이, 단어 "포함하는(comprising)"(및 예컨대, "포함한다" 및 "포함하다"를 포함하는 임의의 형태), 갖는(및 예컨대, "갖는다" 및 "가진다"를 갖는 임의의 형태), "포함하는(including)"(및 예컨대, "포함한다" 및 "포함하다"를 포함하는 임의의 형태) 또는 "함유하는"(및 예컨대, "함유한다" 및 "함유하다"를 포함하는 임의의 형태)는 포괄적이거나 제약을 두지 않는 의미이며, 추가의, 인용되지 않은 요소 또는 공정 단계를 배제하지 않는다.
- [0108] 수치값 또는 백분율을 지칭할 때 본 명세서에서 사용되는 바와 같이 용어 "약"은 값 또는 백분율을 결정하는데 사용되는 방법으로 인한 변동, 통계학적 분산 및 인간의 오차를 포함한다. 또한, 본 출원에서의 각 수치 파라미터는 적어도 보고된 유효숫자의 수를 감안하여 통상의 반올림 수법을 적용해서 해석되어야 한다.
- [0109] 본 명세서에 사용되는 바와 같은 용어 "알킬" 또는 "알크"는, 달리 특정되지 않는 한, 1 내지 15개의 탄소 원자를 포함하는 직쇄 또는 분지쇄 포화 탄화수소로부터 유도된 1가기를 나타내고 메틸, 에틸, *n*- 및 *아이소*-프로필, *n*-, *sec*-, *아이소*- 및 *tert*-부틸, 네오펜틸 등으로 예시되고, 선택적으로 1, 2, 3개의 치환체,

또는 2개 이상의 탄소를 포함하는 알킬기의 경우에는, 4개의 치환체로 치환될 수 있다.

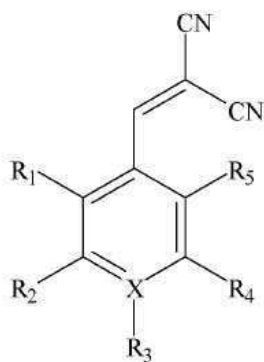
- [0110] 본 명세서에서 호환 가능하게 사용되는 바와 같은 용어 "알콕시" 또는 "알킬옥시"는, 산소 원자를 통해서 모 분자기에 부착된 알킬기를 나타낸다.
- [0111] 본 명세서에서 호환 가능하게 사용되는 바와 같은 용어 "알킬티오" 또는 "티오알콕시"는, 황 원자를 통해서 모 분자기에 부착된 알킬기를 나타낸다.
- [0112] 본 명세서에 사용되는 바와 같은 용어 "알킬렌"은, 직쇄 또는 분지쇄 포화 탄화수소로부터 2개의 수소 원자의 제거에 의해 유도된 포화 2가 탄화수소기를 나타내고, 메틸렌, 에틸렌, 아이소프로필렌 등으로 예시된다.
- [0113] 본 명세서에 사용되는 바와 같은 용어 "알켄일"은, 달리 특정되지 않는 한, 1개 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 함유하는, 2 내지 15개의 탄소, 예를 들어, 2 내지 6개의 탄소 원자 또는 2 내지 4개의 탄소 원자의 1가 직쇄 또는 분지쇄 기를 나타내고, 에틸일, 1-프로펜일, 2-프로펜일, 2-메틸-1-프로펜일, 1-부텐일, 2-부텐일 등으로 예시되며, 선택적으로 1, 2, 3 또는 4개의 치환체로 치환될 수 있다.
- [0114] 본 명세서에 사용되는 바와 같은 용어 "알킨일"은, 탄소-탄소 삼중 결합을 포함하는 2 내지 6개의 탄소 원자의 1가 직쇄 또는 분지쇄 기를 나타내고, 에틴일, 1-프로핀일 등으로 예시되며, 선택적으로 1, 2, 3 또는 4개의 치환체로 치환될 수 있다.
- [0115] 본 명세서에 사용되는 바와 같은 용어 "사이클로알킬"은, 달리 특정되지 않는 한, 3 내지 8개의 탄소 원자의 1가 포화 또는 불포화 비방향족 환식 탄화수소기를 나타내고, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 사이클로헵틸, 바이사이클로[2.2.1]헵틸 등으로 예시된다.
- [0116] 본 명세서에서 호환 가능하게 사용되는 바와 같은 용어 "할로젠" 또는 "할로"는 F, Cl, Br 및 I를 나타낸다.
- [0117] 본 명세서에 사용되는 바와 같은 용어 "헤테로원자"는, 산소, 황 또는 질소인 것으로 이해된다.
- [0118] 본 발명자들은 Li-이온 배터리 내 전해질과 관련하여 사용하기 위한 첨가제를 설계하고 제조하였다. 본 발명의 첨가제는 적어도 1개의 나이트릴기를 포함하는 하기 본 명세서에 기재된 바와 같은 유기 화합물이다. 또한, 유기 화합물은 전해질뿐만 아니라 배터리의 다른 성분과 양립 가능하다.
- [0119] 더욱 구체적으로, 전해질과 관련하여 사용하기 위한 본 발명의 첨가제는 이하에 묘사된 일반식 I-XI, A, B, C 및 D를 갖는 본 명세서에 기재된 바와 같은 나이트릴계 유기 화합물이다.



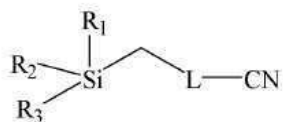
[0120]



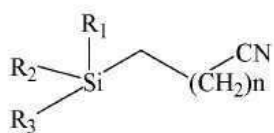
A



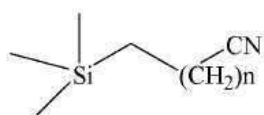
B



V

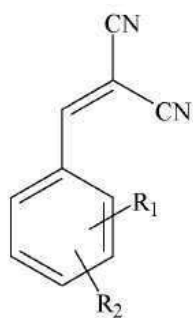


VI

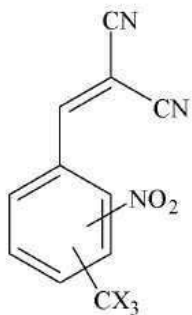


C

[0121]

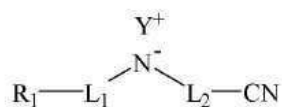


VII

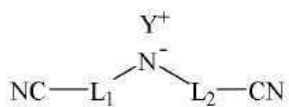


VIII

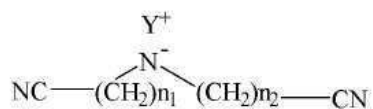
[0122]



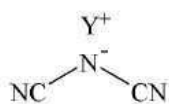
IX



X



XI



D

[0123]

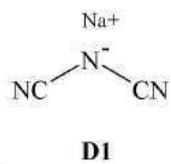
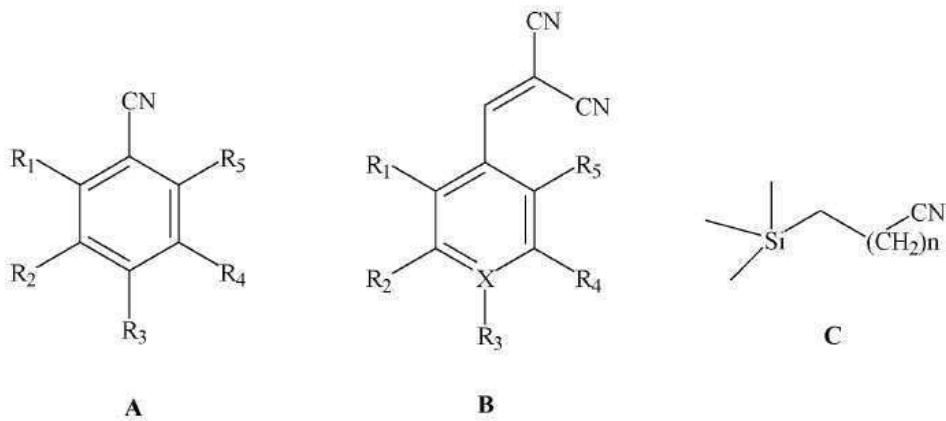
[0124]

이러한 유기 화합물은 하기 표 1에 정의된 화합물, 즉, 화합물 A1-A4, B1-B8, C1-C2 및 D1에 의해 예시된다.

표 1

본 발명에 따른 유기 화합물(시리즈 A, B, C 및 D)

		R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	X	n		사이클
A	A1	H	H	OMe	OMe	H			0.1%	300
	A2	F	F	F	F	F			0.1%	300
	A3	F	F	CN	F	F			0.1%	300
	A4	CN	H	CN	CN	H			0.1%	300
B	B1	H	H	OMe	OMe	H	C		0.5%	300
	B2	F	F	F	F	F	C		0.5%	200
	B3	H	H	NO ₂	H	NO ₂	C		0.5%	불량한 결과
	B4	H	H	CF ₃	H	NO ₂	C		0.5%	300
	B5	H	H	CF ₃	H	H	C		0.5%	300
	B6	H	H	CN	H	H	C		0.5%	300
	B7	H	H	NO ₂	H	H	C		0.5%	불량한 결과
	B8	H	H	H	H	H	N		0.5%	300
C	C1							0	0.5%	300
	C2							1	0.5%	300
D	D1								0.5%	300



본 발명은 이하의 비제한적인 예에 의해 더욱 상세히 설명된다.

Li-이온 전해질과 관련하여 첨가제로서 사용하기 위한 나이트릴계 유기 화합물

실시예 1 - 화합물의 제조를 위한 일반적인 절차. 15ml의 클로로폼 중 알데하이드(1eq.)의 용액에 몰로노다이아이트릴(1.5 eq.) 및 몇 방울의 트라이에틸아민을 첨가한다. 이 혼합물을 질소 하에 하룻밤 환류시킨다. 실온으로 되돌린 후, 다이클로로메탄을 첨가하고, 이 용액을 물로 2회 세척하고, MgSO₄ 위에서 건조시킨다. 용매 제거 후, 잔사를 크로마토그래피(실리카겔/다이클로로메탄)하여 고체를 제공한다.

[0130] 실시예 2 - 화합물 B1

[0131]

[0132] 밝은 황색 고체 (70%). NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 7.69 (d, 1H, $J = 4\text{Hz}$); 7.64 (s, 1H); 7.38 (dd, 1H, $J = 4\text{Hz}$, $J = 12\text{Hz}$); 6.95 (d, 1H, $J = 12\text{Hz}$); 3.99 (s, 3H); 3.93 (s, 3H).

[0133] 실시예 3 - 화합물 B2

[0134]

[0135] 황색 고체 (40%). NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 7.77 (s, 1H). NMR ^{19}F (400 MHz, CDCl_3) δ : -132.55 (s, 2H); -143.68 (s, 1H); -158.50 (s, 1H).

[0136] 실시예 4 - 화합물 B3

[0137]

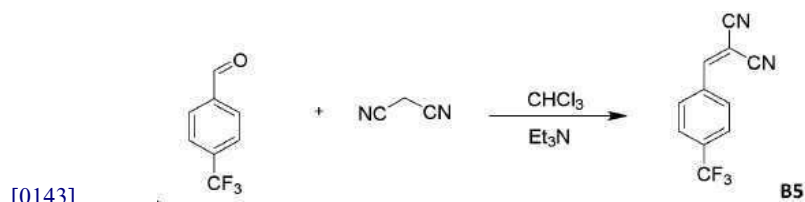
[0138] 백색 고체. NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 8.60 (d, 1H, $J = 4\text{Hz}$); 8.25 (dd, 1H, $J = 4\text{Hz}$, $J = 12\text{Hz}$); 8.18 (s, 1H); 8.15 (d, 1H, $J = 12\text{Hz}$).

[0139] 실시예 5 - 화합물 B4

[0140]

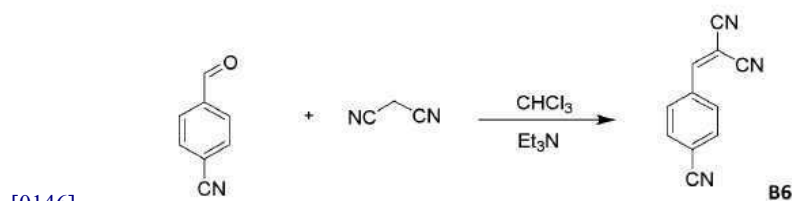
[0141] 밝은 황색 고체. NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 8.12 (d, 1H, $J = 4\text{Hz}$); 8.03 (s, 1H); 7.67 (dd, 1H, $J = 4\text{Hz}$, $J = 12\text{Hz}$). NMR ^{19}F (400 MHz, CDCl_3) δ : -63.65 (s, 3F).

[0142] 실시예 6 - 화합물 B5



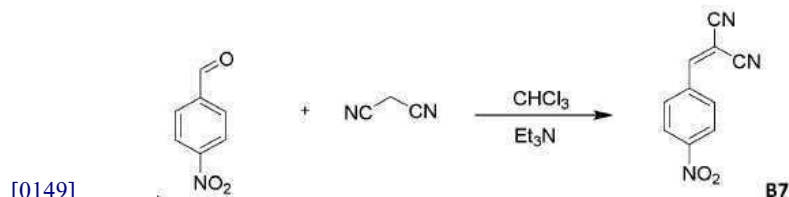
[0144] 백색 고체. NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 8.02 (d, 2H, $J = 12\text{Hz}$); 7.83 (d, 2H, $J = 8\text{Hz}$); 7.80 (s, 1H).
NMR ^{19}F (400 MHz, CDCl_3) δ : -63.48 (s, 3F).

[0145] 실시예 7 - 화합물 B6



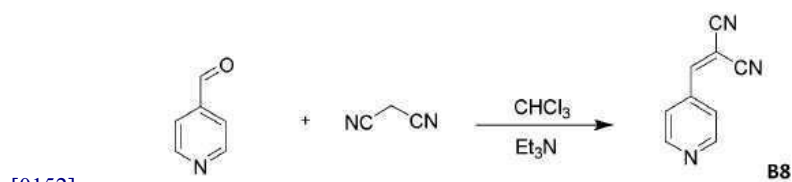
[0147] 백색 고체. NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 7.99 (d, 2H, $J = 8\text{Hz}$); 7.83 (d, 2H, $J = 8\text{Hz}$); 7.74 (s, 1H).

[0148] 실시예 8 - 화합물 B7



[0150] 연한 오렌지색 고체. NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 8.39 (d, 2H, $J = 12\text{Hz}$); 8.07 (d, 2H, $J = 8\text{Hz}$); 7.88 (s, 1H).

[0151] 실시예 9 - 화합물 B8



[0153] 분홍색 고체. NMR ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ : 8.89 (d, 2H, $J = 12\text{Hz}$); 7.81 (s, 2H); 7.68 (d, 2H, $J = 8\text{Hz}$).

[0154] 시리즈 A 및 C의 화합물 및 화합물 D1은 상업적으로 입수 가능하고 입수한 그대로 사용하였다.

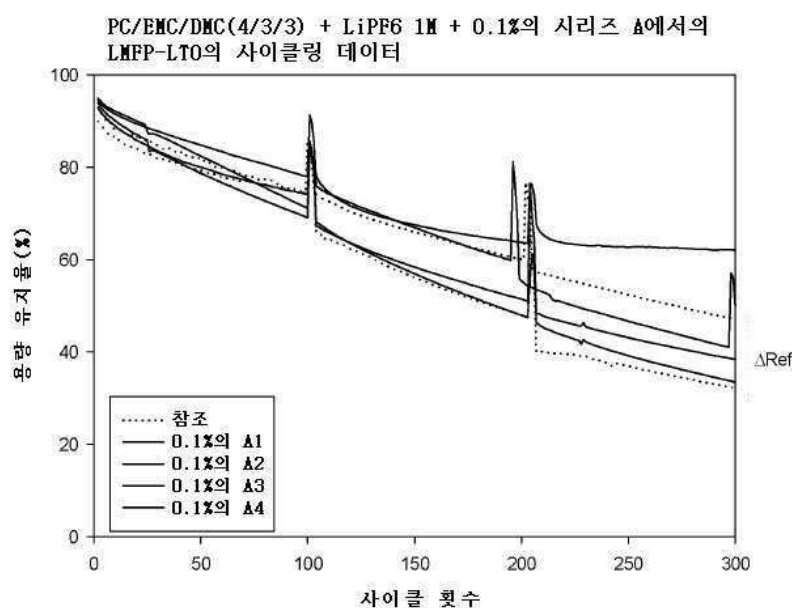
[0155] 도면을 참조하면, 도 1 내지 도 3은 시리즈 A의 화합물을 이용해서 얻어진 결과를 제시하고; 도 4 내지 6은 시리즈 B의 화합물을 이용해서 얻어진 결과를 제시하고; 도 7 내지 9는 시리즈 C의 화합물을 이용해서 얻어진 결과를 제시하고; 도 10 내지 11은 시리즈 D의 화합물을 이용해서 얻어진 결과를 제시한다. 본 발명에 따른 배터리뿐만 아니라 참조 배터리는, 300 사이클 후 불량한 안정성을 설명하는 비닐렌 카보네이트(VC)를 함유하지 않는 것에 유의한다. 그럼에도 불구하고, 알 수 있는 바와 같이, 본 발명에 따른 첨가제를 포함하는 배터리는 훨씬 더 양호한 안정성을 제공한다.

[0156] 도 2에서 알 수 있는 바와 같이, 0.1 중량%의 화합물 A1 또는 A4의 사용은 배터리 용량의 개선뿐만 아니라 더 양호한 가역성도 허용한다. 게다가, 배터리 저장의 전체적인 감소가 주목된다(도 3).

- [0157] 도 5는 화합물 B1 및 B4에 대해서 얻어진 결과를 도시한다. 0.5 중량%의 첨가제의 사용은 배터리 용량의 향상을 허용한다. 전체적인 감소 of the 배터리 저항의 전체적인 감소가 주목된다(도 6).
- [0158] 도 7은 화합물 C1 및 C2에 대해서 얻어진 결과를 도시한다. 0.5 중량%의 첨가제의 사용은 yields 45℃에서 300 사이클 후 양호한 안정성을 수득한다. 도 8에서 알 수 있는 바와 같이, 더 양호한 결과가 화합물 C1(도 짧은 탄소 사슬)에 대해서 얻어진다.
- [0159] 도 10은 화합물 D1에 대해서 얻어진 결과를 도시한다. 도 11에서 알 수 있는 바와 같이, 0.5 중량%의 화합물 D1의 사용은 배터리 용량의 향상뿐만 아니라 더 양호한 가역성도 허용한다.
- [0160] 당업자가 이해할 수 있는 바와 같이, 전해질과 관련하여 사용하기 위한 첨가제는 전해질 및 캐소드 활성 물질을 포함하는 배터리의 성분들과 양립 가능하도록 조정된다.
- [0161] 본 발명은 리튬 망간 철 포스페이트(LMFP) - 리튬 티타늄 옥사이드(LTO) 배터리에 관하여 설명되어 있다. 당업자가 이해할 수 있는 바와 같이, 다른 리튬-이온 배터리 유형이 또한 사용될 수 있다. 즉, 캐소드 활성 물질이 리튬-함유 물질을 포함하는 임의의 배터리가 사용될 수 있다. 이러한 리튬-함유 물질은, 올리빈, 리튬 옥사이드, 니켈 망간 코발트 옥사이드(NMC)를 포함하는 리튬 코발트 옥사이드(LCO), 리튬 망간 옥사이드(LMO), 리튬 니켈 옥사이드(LNO) 등일 수 있다.
- [0162] 또한, 당업자가 이해할 수 있는 바와 같이, 애노드 재료는 임의의 적합한 형태, 예컨대, 리튬 합금, Si, SiO_x, 흑연 및 탄소 혼합물, 티탄산염, 티탄산리튬일 수 있다.
- [0163] 청구항의 범위는 실시예에 제시된 바람직한 실시형태에 의해 제한되어서는 안되지만, 전체로서 설명과 일치하는 최광의의 해석이 부여되어야 한다.
- [0164] 본 발명은 많은 문헌을 참조하며, 그 내용은 그 전문이 참조에 의해 본 명세서에 원용된다.
- [0165] **참고문헌**
- [0166] 1. Rohan R. et al. *J. Phys. Chem. C* (2016), 120 (12), 6450-6458.
- [0167] 2. Kim Y.-S. et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces* (2014), 6 (11), 8913-8920.
- [0168] 3. Pohl B. et al. *J. Electrochem. Soc.* (2015), 162 (3), A460-A464.

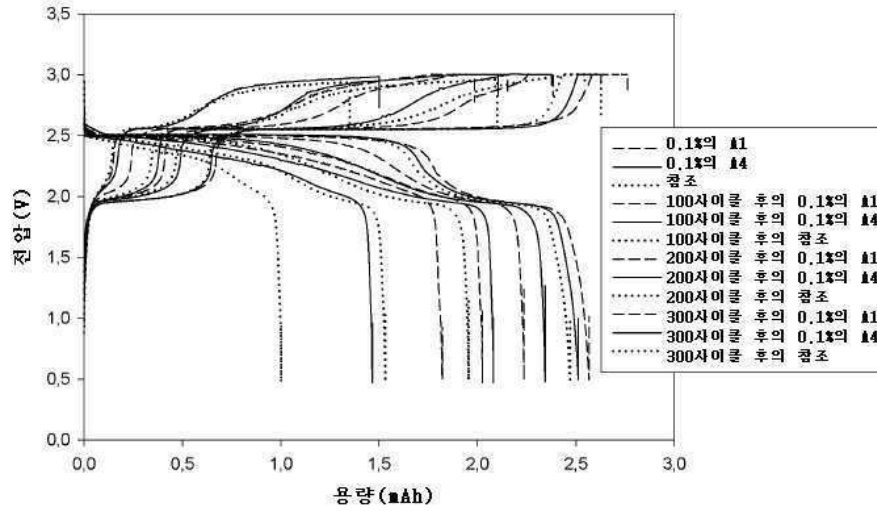
도면

도면1



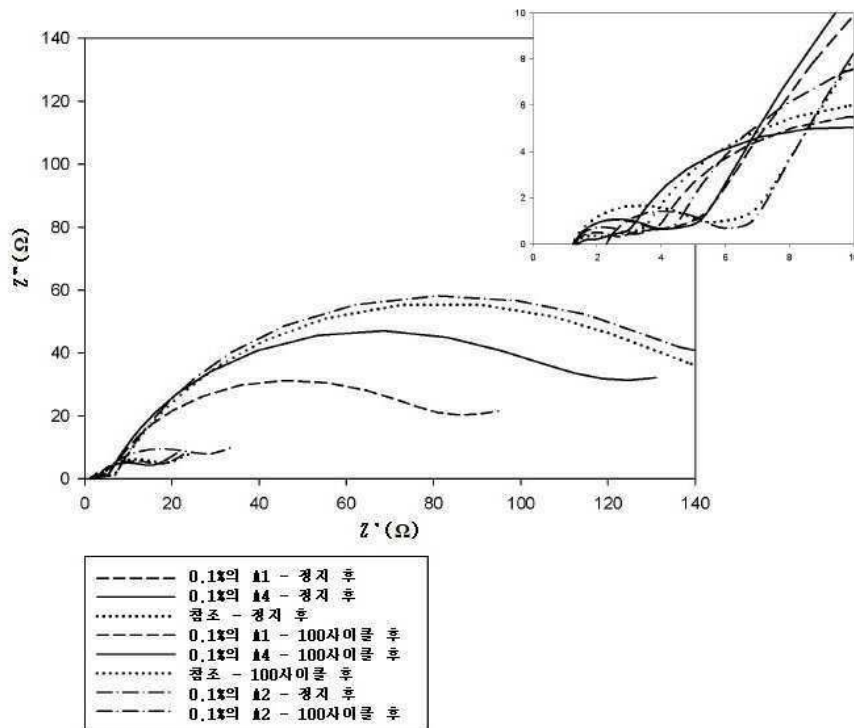
도면2

45°C에서의 PC/EMC/DMC(4/3/3)+LiPF₆(1M)과 0.1%의 첨가제 A를 가진 LMFP-LTO 배터리의 정적 용량(0.05C)

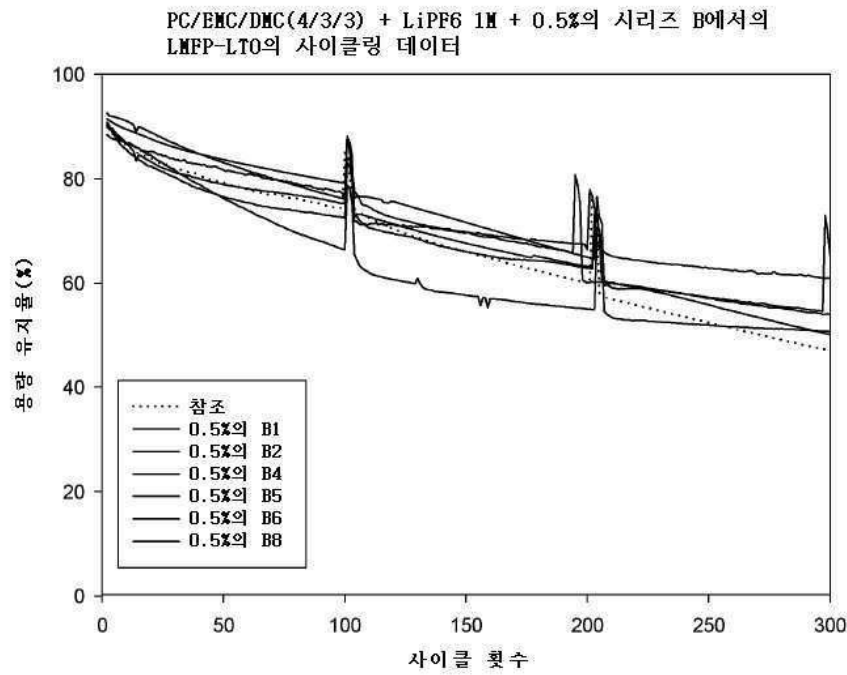


도면3

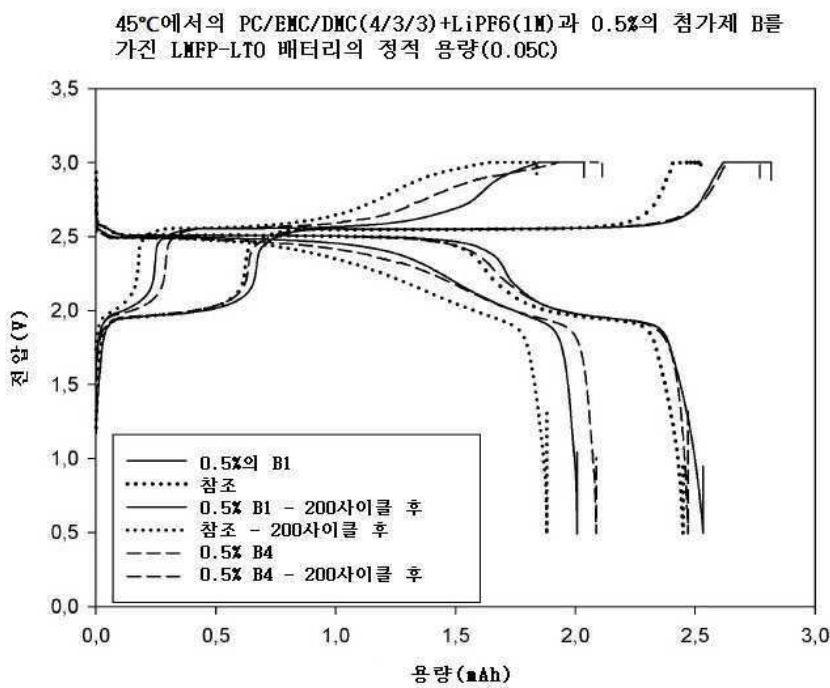
0 및 100 사이클에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3)+1M LiPF₆+0.1% A) 대 참조의 나이퀴스트 플롯



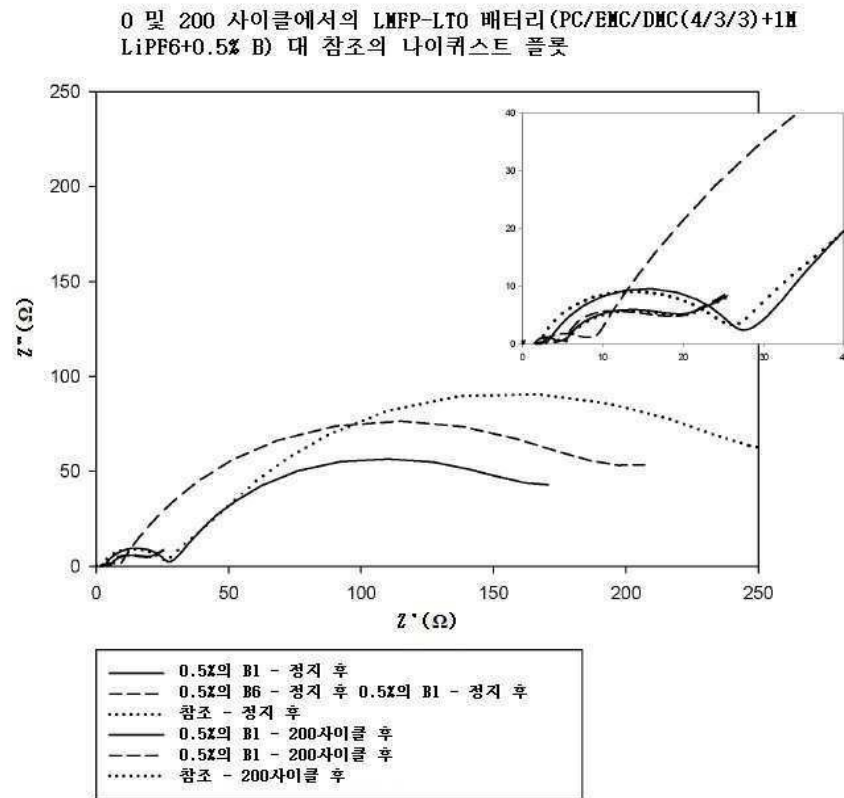
도면4



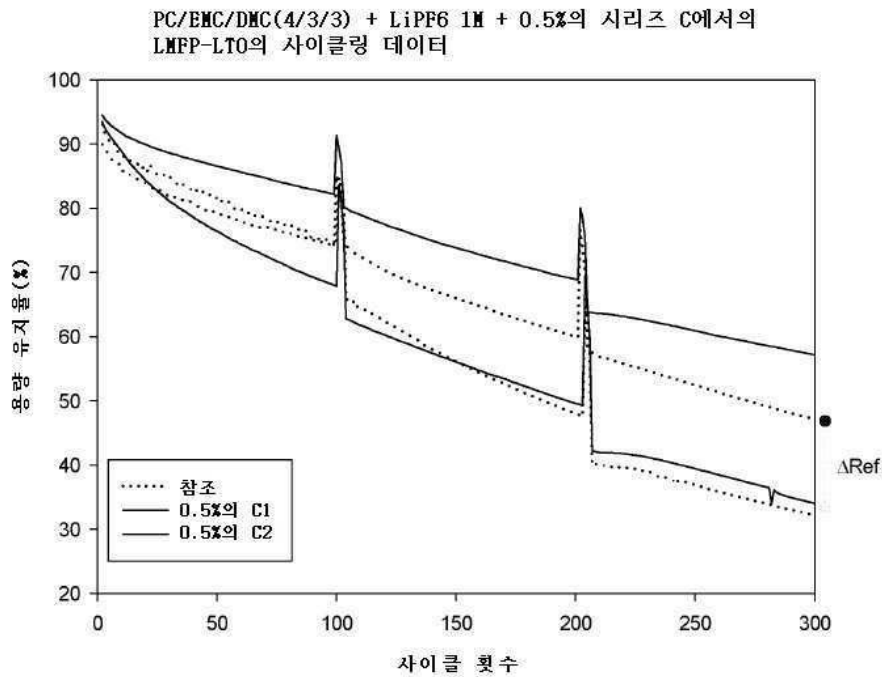
도면5



도면6

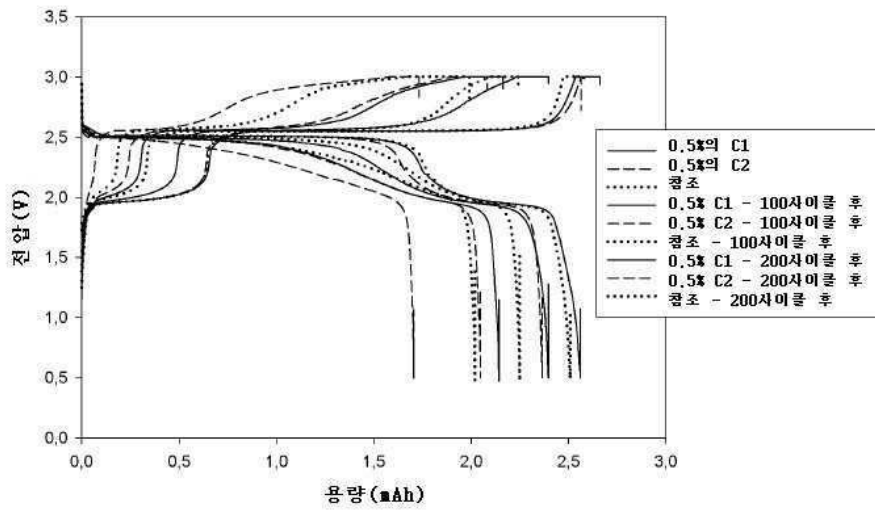


도면7



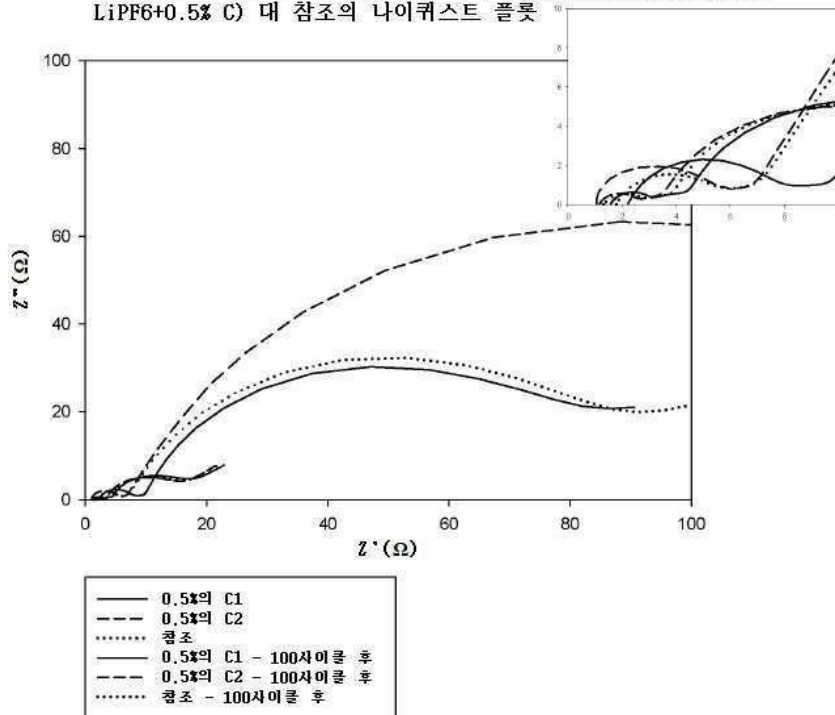
도면8

45°C에서의 PC/EMC/DMC(4/3/3)+LiPF₆(1M)과 0.5%의 첨가제 C를 가진 LMFP-LTO 배터리의 정적 용량(0.05C)

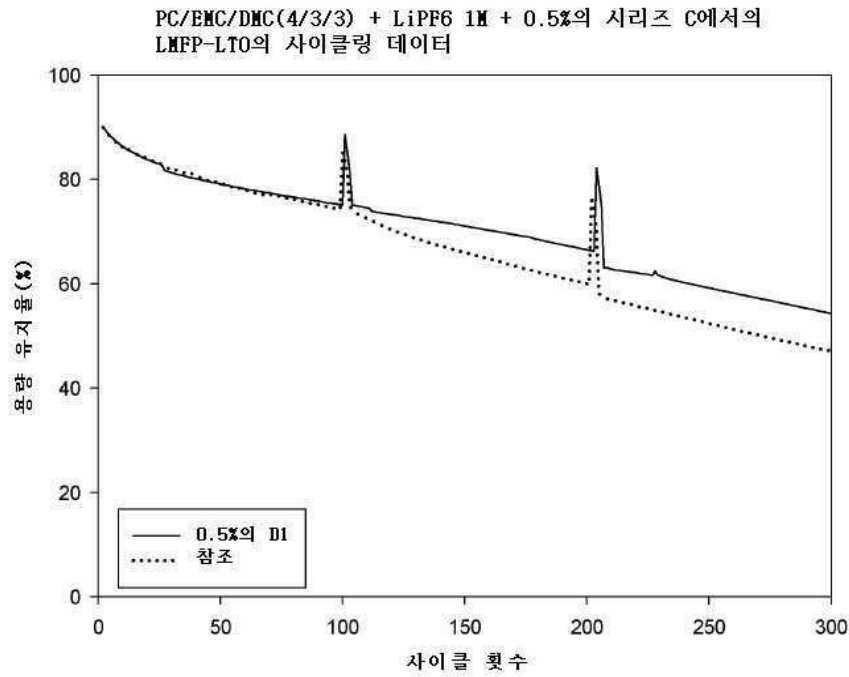


도면9

0 및 100 사이클에서의 LMFP-LTO 배터리(PC/EMC/DMC(4/3/3)+1M LiPF₆+0.5% C) 대 참조의 나이퀴스트 플롯



도면10



도면11

