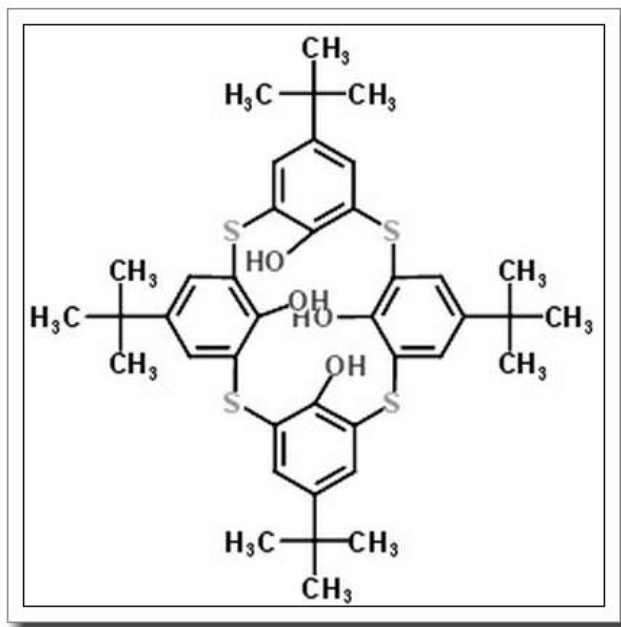


4-叔丁基硫杂杯[4]芳烃

4-tert-Butylthiacalix[4]arene



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-tert-Butylthiacalix[4]arene
中文名称	4-叔丁基硫杂杯[4]芳烃
CAS 号	182496-55-5
分子式	C ₄₀ H ₄₈ O ₄ S ₄
分子量	721.067
纯度	>96%

产品说明

4-叔丁基硫杂杯[4]芳烃产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-叔丁基硫杂杯[4]芳烃 (4-tert-Butylthiacalix[4]arene, CAS 号: 182496-55-5) 是一种硫桥联的杯芳烃衍生物, 分子式为 $C_{40}H_{48}O_4S_4$, 分子量 721.067。其结构由四个对叔丁基苯酚单元通过硫原子桥接形成环状空腔, 具有独特的三维锥形构象。该化合物纯度高于 96%, 为白色至类白色结晶粉末, 可溶于有机溶剂如氯仿、二甲基亚砷 (DMSO), 但不溶于水。其空腔结构赋予其优异的分子识别和主客体化学特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为第三代超分子主体化合物, 4-叔丁基硫杂杯[4]芳烃可通过疏水作用、 $\pi-\pi$ 堆积及氢键选择性结合金属离子、有机小分子或生物活性物质。其硫原子取代传统杯芳烃的亚甲基桥, 显著增强了配位能力和电子转移效率, 在仿酶催化、离子传输和分子开关领域具有重要研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于超分子化学、材料科学及药物递送系统:

- (1) 分子传感器: 用于检测重金属离子 (如 Hg^{2+} 、 Cd^{2+}) 或环境污染物;
- (2) 功能材料: 作为模板合成多孔聚合物或纳米催化剂载体;
- (3) 药物载体: 通过包合作用改善难溶性药物的生物利用度;
- (4) 基础研究: 探索非共价键相互作用机制及仿生系统构建。

4. 储存条件与使用建议

储存于 $-20^{\circ}C$ 避光干燥环境中, 保质期 24 个月。开封后建议充氮密封保存。使用前需平衡至室温以避免结露, 配制溶液时优先选用惰性溶剂 (如无水 THF)。操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 核磁共振 (1H NMR) 及质谱 (MS) 验证结构。安全

数据: LD50 (大鼠经口) >2000 mg/kg, 属于低毒类化合物。但仍需佩戴防护手套和护目镜, 若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

注: 本说明仅限科研用途, 不适用于医药或食品领域。具体应用需进一步实验验证。