

Atoms	1,4-thiophthene	1,5-thiophthene	1,6-thiophthene
1	—	—	—
2	0.5044	0.5090	0.5078
3	0.4189	0.4600	0.4312
4	—	0.5600	0.4312
5	0.5044	—	0.5079
6	0.4189	0.5506	—
7	0.1916	0.1782	0.2756
8	0.1916	0.1130	0.1126

Table 3. Free Valence Indices.

Compound	Reaction (Position)			
	electro- philic	nucleo- philic	radical	addition
1,4-thiophthene	3,6	2,5	2,5	$\begin{cases} 2-3 \\ 5-6 \end{cases}$
1,5-thiophthene	6,4	2,3	4,6	2-3
1,6-thiophthene	2,5	3,4	2,5	$\begin{cases} 2-3 \\ 4-5 \end{cases}$

Table 4. The Prediction of Reactivity of Thiophthenes.

- ¹⁵ R. GOMPPER, E. KUTTER, and W. TOEPFL, *Ann. Chem.* **659**, 90 [1962].
¹⁶ R. GOMPPER and E. KUTTER, *Angew. Chem.* **74**, 251 [1962].
¹⁷ YA. L. GOL'DFARB and V. P. LITVINOV, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* **1963**, 1621.
¹⁸ O. DANN and W. DIMMLING, *Chem. Ber.* **87**, 373 [1954].

in 1,5-thiophthene (1,5-thiophene-2-carboxylic acid³), and positions 3 and 4 in 1,6-thiophthene (1,6-thiophthene-3,4-diol^{15, 16}) are the possible sites for nucleophilic attack. Positions 2 and 5 in 1,4-thiophthene, positions 4 and 6 in 1,5-thiophthene, and positions 2 and 5 in 1,6-thiophthene are the most reactive positions for radical attack. There is a vast amount of data concerning radical reactions available in the literature. It appears that these compounds favour radical reactions. We cite a few examples: 2-methyl-1,4-thiophthene², 2,5-dimethyl-1,4-thiophthene¹⁷, 4,6-dimethyl-1,5-thiophthene^{18, 19}, 2-ethyl-1,6-thiophthene²⁰, and 2,5-diethyl-1,6-thiophthene²¹. Finally, the most reactive bonds in all three compounds are the next nearest bonds to sulphur atoms.

We are in the process of developing a more sophisticated approach, but the results presented in this note suggest that even a simple approach such as we have adopted can, to some extent, be useful in the study of the reactivities of organosulphur molecules.

Acknowledgement: We thank Dr. A. HINCHLIFFE for helpful discussions.

- ¹⁹ E. IMOTO and R. NOTOYAMA, *Chem. Abstr.* **1955**, 4620 d.
²⁰ YA. L. GOL'DFARB and V. P. LITVINOV, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* **1963**, 343.
²¹ V. P. LITVINOV and YA. L. GOL'DFARB, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* **1963**, 2183.

BERICHTIGUNG

Zu F. LOHMANN, FERMI-Niveau und Flachbandpotential von Molekülkristallen aromatischer Kohlenwasserstoffe, *Z. Naturforschg.* **22 a**, 843 [1967].

Auf S. 844, rechte Spalte, in der letzten Gleichung muß es heißen:

$$U_{FB} = \dots - 4,48 + 4,17 = -0,3 \text{ V.}$$

Nachdruck — auch auszugsweise — nur mit schriftlicher Genehmigung des Verlages gestattet

Verantwortlich für den Inhalt: A. KLEMM

Satz und Druck: Konrad Tritsch, Würzburg



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.