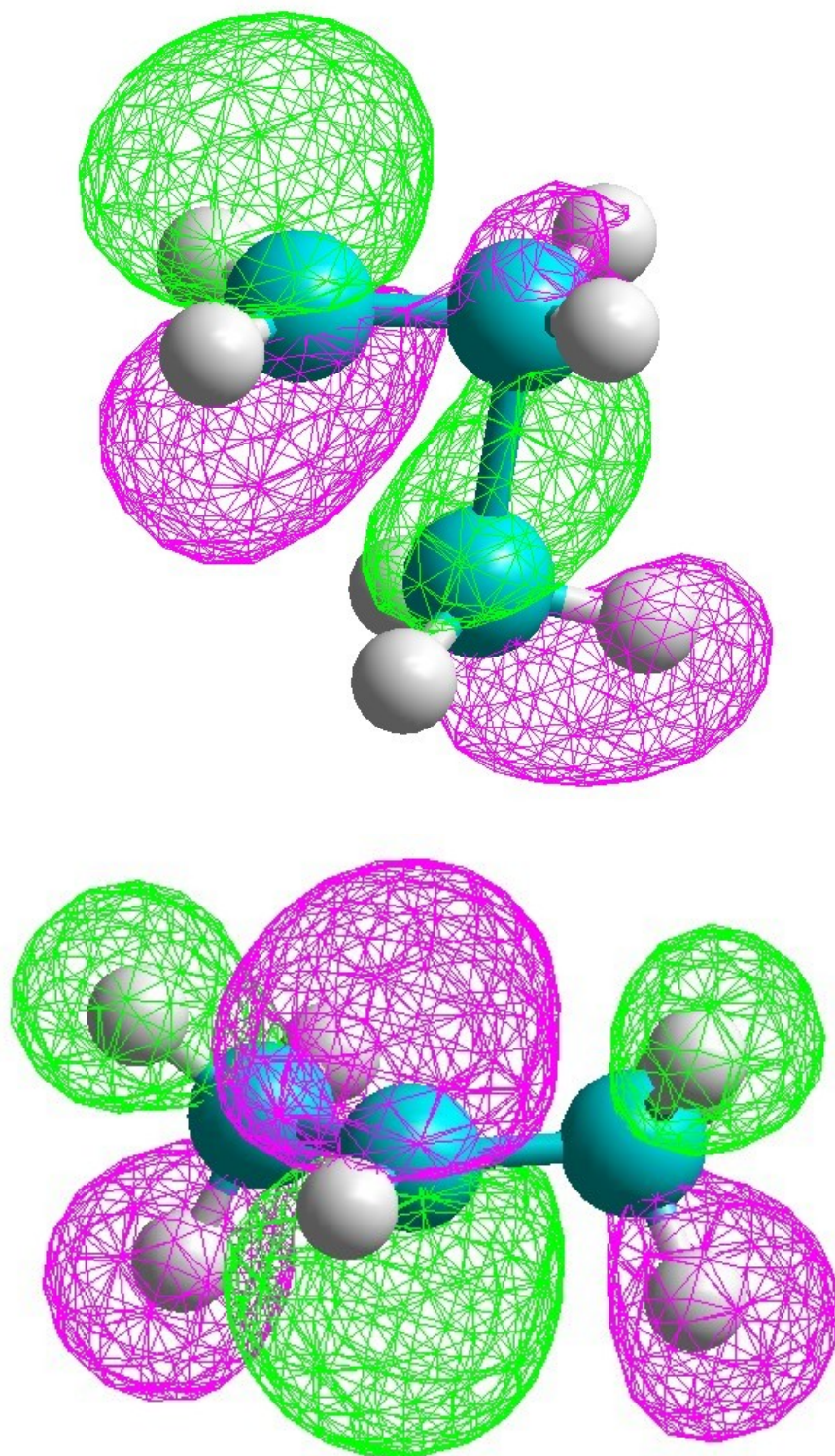


Propil carbocationi 1° e 2° con orbitale LUMO



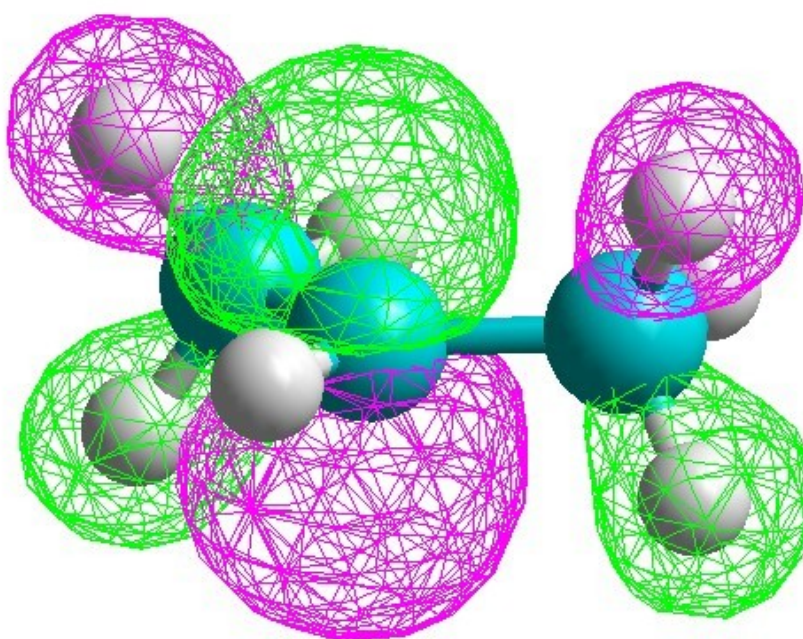
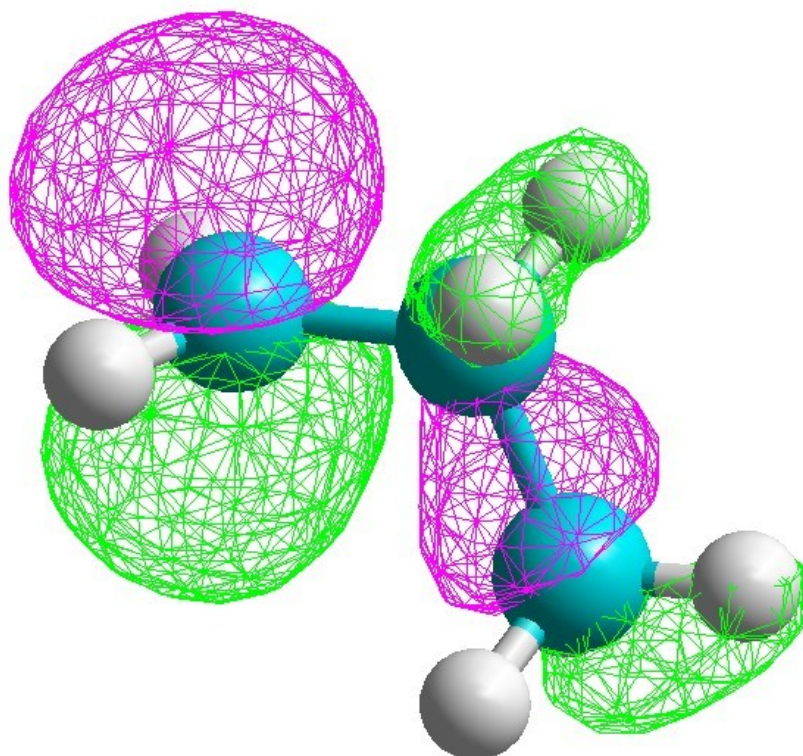
$\Delta H = 13,09$ kcal/mol **a favore del carbocatione 2°** (metodo 3-21G)

Applicando la relazione $\Delta G^\circ = -RT \ln K$ e assumendo $\Delta H^\circ = \Delta G^\circ$ si ottiene:

$K = 4,03 \cdot 10^9$ (per l'ipotetica reazione di equilibrio tra i due carbocationi)

La stabilità dei carbocationi è quindi $1^\circ \ll 2^\circ \ll 3^\circ$

Propil radicali 1° e 2° con orbitale HOMO



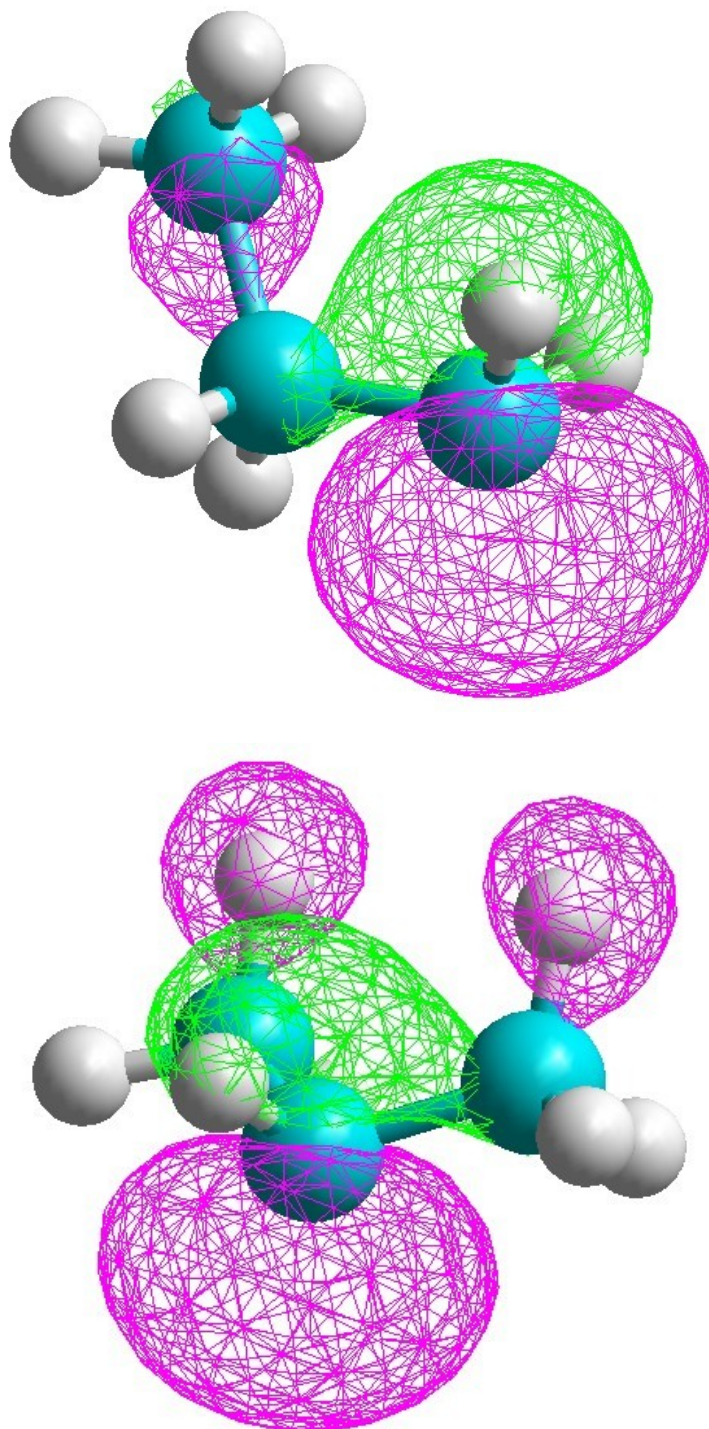
$\Delta H = 2,802 \text{ kcal/mol}$ a favore del radicale 2° (metodo 6-311G)

Applicando la relazione $\Delta G^\circ = -RT \ln K$ e assumendo $\Delta H^\circ = \Delta G^\circ$ si ottiene:

$K = 113,8$ (per l'ipotetica reazione di equilibrio tra i due radicali)

La stabilità dei radicali, come per i carbocationi, è quindi $1^\circ < 2^\circ < 3^\circ$

Propil carbanioni 1° e 2° con orbitale HOMO



$\Delta H = 0,939$ kcal/mol **a favore del carbanione 1°** (metodo 6-311G)

Applicando la relazione $\Delta G^\circ = -RT \ln K$ e assumendo $\Delta H^\circ = \Delta G^\circ$ si ottiene:

$K = 4,887$ (per l'ipotetica reazione di equilibrio tra i due carbanioni)

La stabilità dei carbanioni, al contrario dei carbocationi e dei radicali, è quindi $3^\circ < 2^\circ < 1^\circ$