

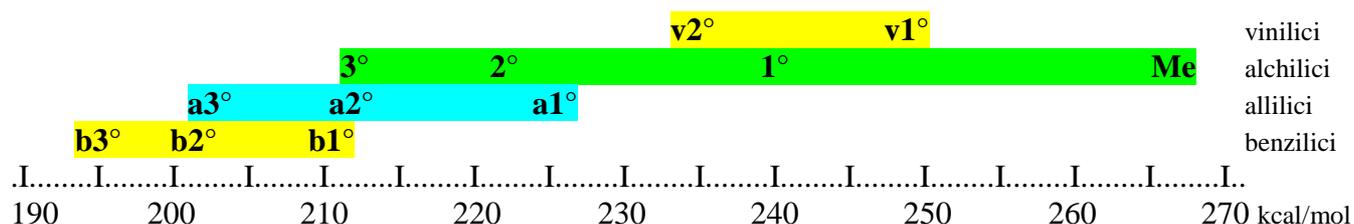
Struttura e stabilità dei carbocationi

I carbocationi più stabili sono quelli **più sostituiti**, infatti l'ordine di stabilità dei carbocationi alchilici è:
 terziario > secondario > primario >> metilico

Per spiegare questo fatto, la teoria MO considera l'**orbitale LUMO**, l'orbitale vuoto che regge la carica positiva. Nel carbocatione **metilico**, l'orbitale LUMO è costituito solo dall'orbitale 2p del carbonio positivo, come si vede nella prima immagine qui sotto. Nei carbocationi **1°**, **2°** e **3°**, invece, l'orbitale LUMO abbraccia, oltre all'orbitale 2p del carbonio positivo, anche gli orbitali sp^3 dei carboni sostituenti, che, così, prendono su di sé una parte della carica positiva e stabilizzano il carbocatione. Quindi, il carbocatione **3°**, che ha 3 sostituenti, è il più stabile. Nei carbocationi **allilici** e ancora di più nei **benzilici**, la stabilizzazione è maggiore perchè l'orbitale LUMO si estende su più orbitali $2p\pi$ e quindi la carica positiva si può distribuire in modo più efficace.

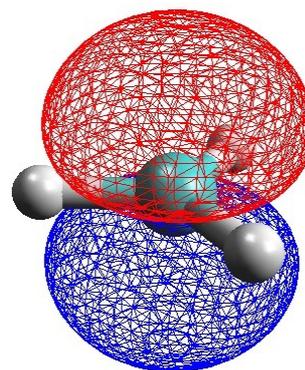
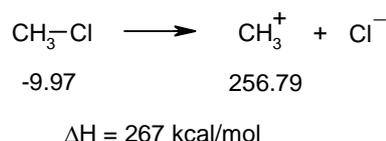
I carbocationi **vinilici**, invece, sono i peggiori perchè la carica positiva destabilizza il doppio legame C=C.

Qui sotto è mostrato il grafico riassuntivo delle energie di formazione dei carbocationi calcolate con ArgusLab dagli allievi della classe terza nel laboratorio di modellistica molecolare.

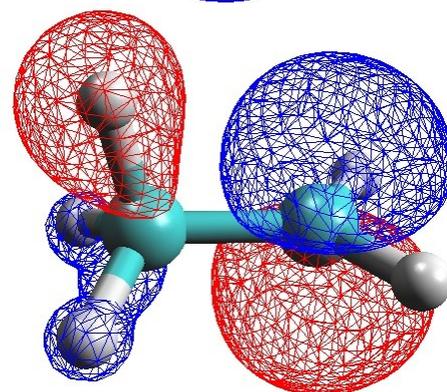
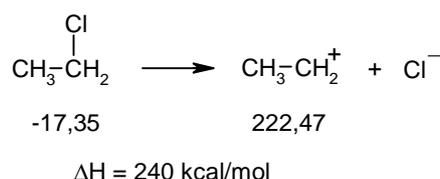


Di seguito sono riportate le reazioni di formazione dei vari carbocationi in ipotetiche reazioni SN1 e a fianco è mostrata la loro struttura e l'orbitale LUMO per poterne valutare stabilità e coniugazione.

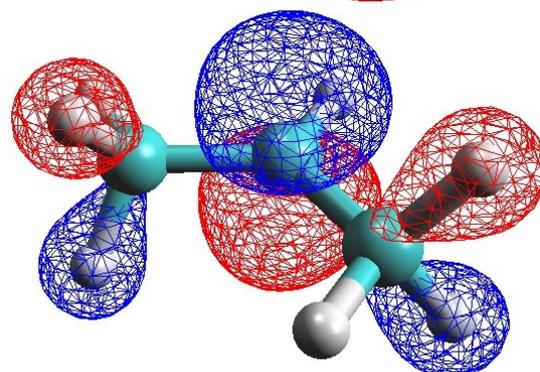
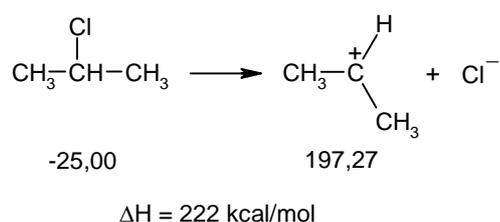
Carbocatione metilico

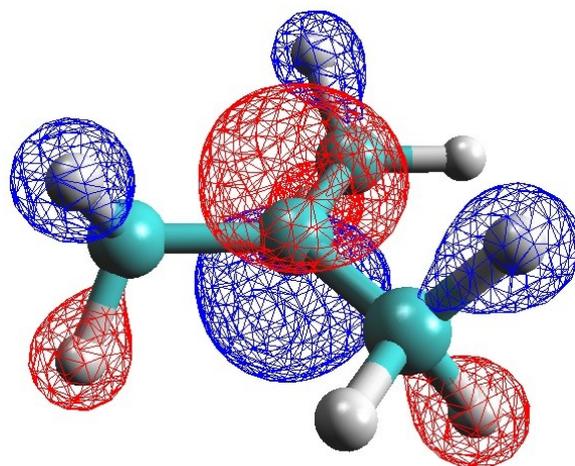
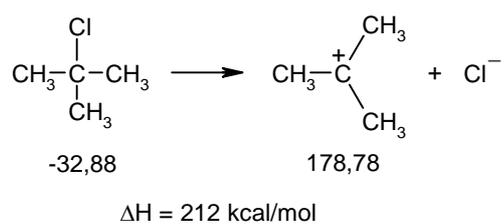
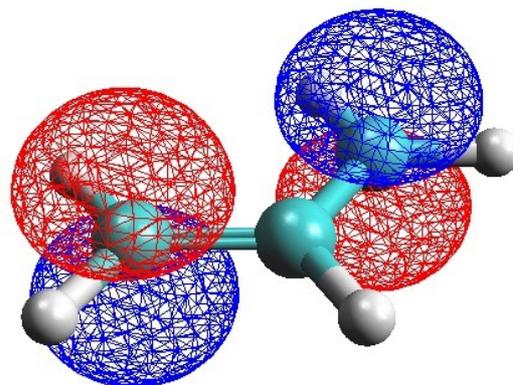
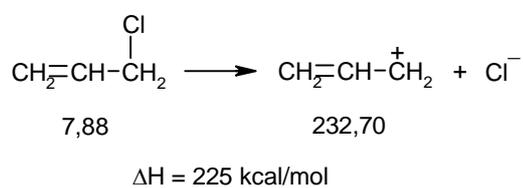
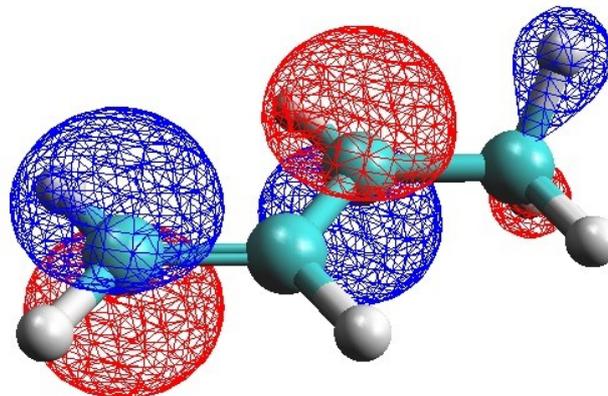
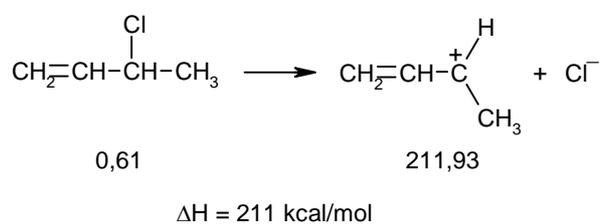
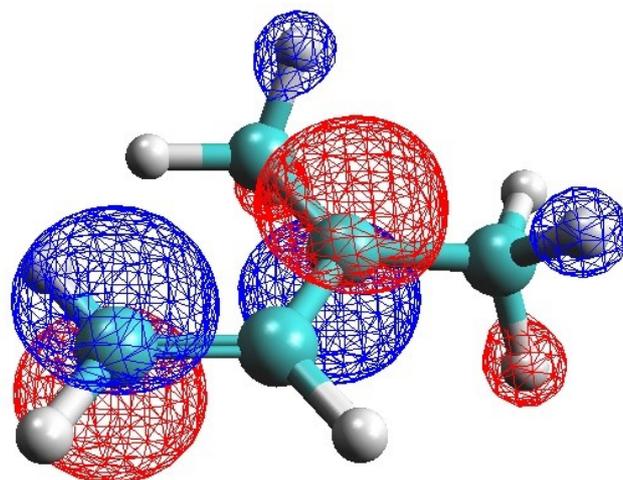
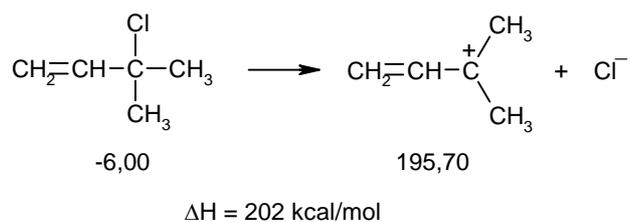


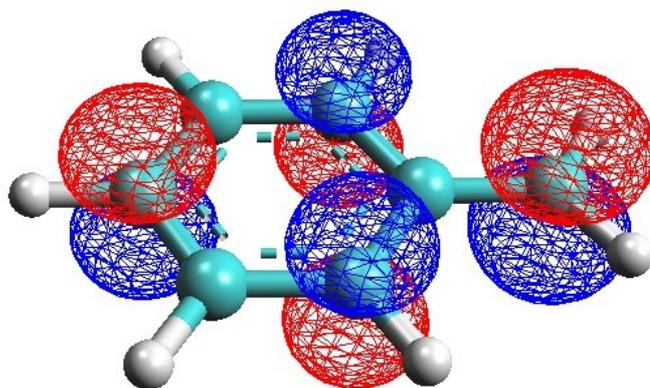
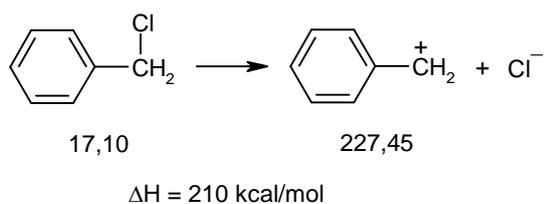
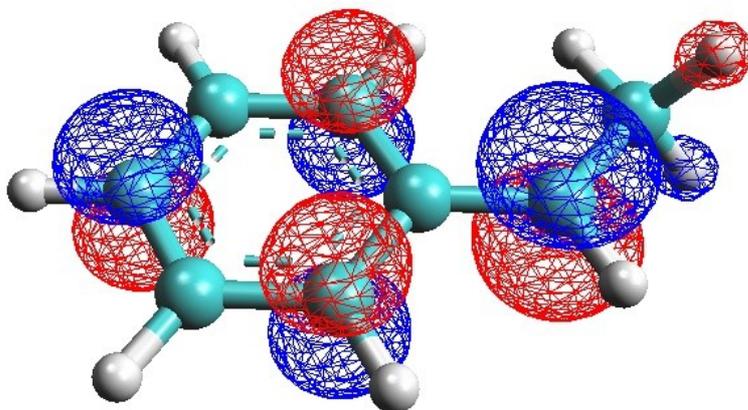
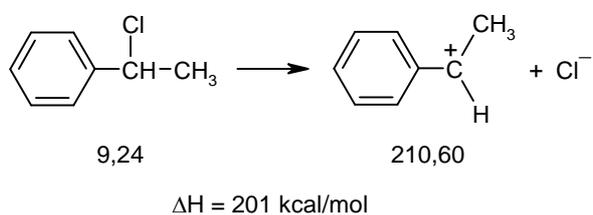
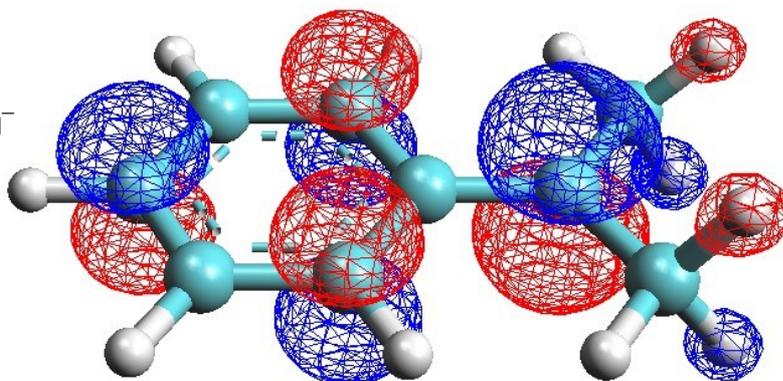
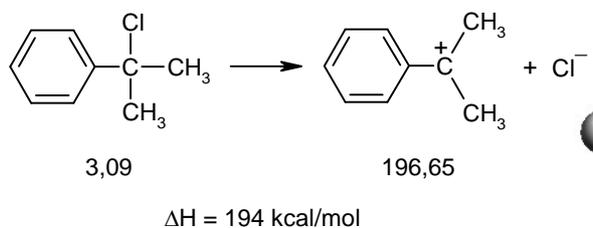
Carbocatione primario

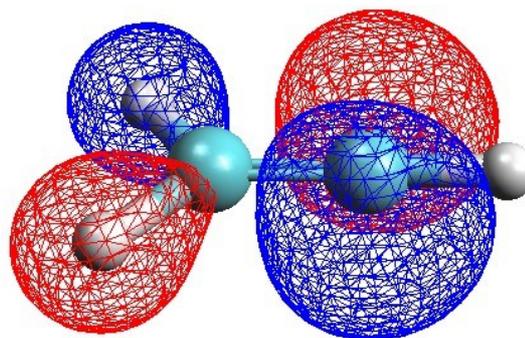
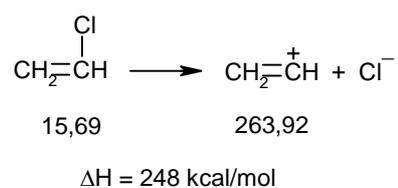
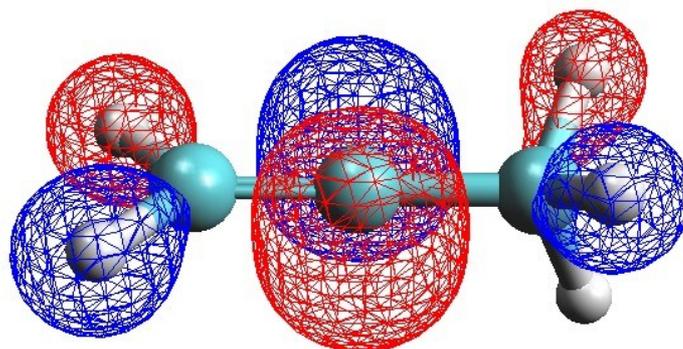
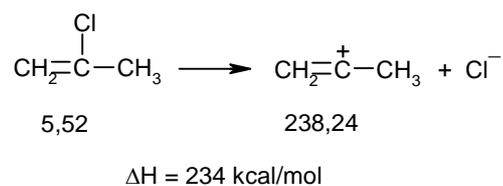


Carbocatione secondario



Carbocatione terziario**Carbocatione allilico primario****Carbocatione allilico secondario****Carbocatione allilico terziario**

Carbocatione benzilico primario**Carbocatione benzilico secondario****Carbocatione benzilico terziario**

Carbocatione vinilico primario**Carbocatione vinilico secondario**

Dati raccolti ed elaborati dagli allievi della classe terza chimici dell'ITI Marconi di Padova nel laboratorio di modellistica molecolare sotto la guida del prof Mauro Tonellato.
Il programma utilizzato è stato ArgusLab.