



Universitat Autònoma de Barcelona

**TITULACIÓ:** Química

**NOM DE L'ASSIGNATURA:** 20607 Química orgànica industrial

**CURS:** 2002/2003

**CRÈDITS:** 6

**Requisits:** Química orgànica I (aprovada), Química orgànica II (aprovada)

## PROGRAMA DE TEORIA

- Introducció.

Aspectes específics de la Química Industrial. Matèries primeres: el seu origen; el seu futur. Petroli, gas natural, carbó i recursos renovables.

- Els productes d'un àtom de carboni. El Metà i els seus derivats.

Metà → clorometans → clorofluorometans.

Metà → cianur d'hidrogen → clorur de cianur.

Metà → disulfur de carboni.

- Gas de síntesi. Els productes d'una àtom de carboni. Monòxid de carboni i els seus derivats.

Gas de síntesi i els seus components.

CO → metanol ( → formol, àcid acètic, metilamines), àcid fòrmic.

CO → foscè → compostos en quart grau d'oxidació.

CO<sub>2</sub> → urea → melanina.

- Els hidrocarburs fonamentals.

Cracking tèrmic de nafes i de gas natural: etilè, propilè, butilè, isoprè i ciclopentadiè. Cracking catalític: gasolines i hidrocarburs aromàtics. Reforming de nafes: benzè, toluè, xilens (BTX). Acetilè mitjançant cracking i a partir de carbó. El carbó com a font de productes químics. Naftalè i altres hidrocarburs aromàtics policíclics.

- Els hidrocarburs de segona generació.

Etilbenzè i estirè. Cumè. Ciclohexà.

Etilè i els seus derivats.

Etilè → dicloroetà → clorur de vinil, etilendiamina.

Etilè → acetaldehid → àcid acètic, pentaeritritol, piridines, acetat de vinil.

Etilè → òxid d'etilè → etanolamines, etilenglicol i polietilenglicol.

Etilè → etanol → esters etílics, cloral.

Etilè → hidroformilació d'olefines, el procés oxo: propanal → 1-propanol i àcid propiònic.

- El propilè i els seus derivats.

Propilè → isopropanol → acetona → metacrilat de metil → bisfenol A ( → reïnes epoxi), metil isobutil cetona (MIK) ( → metil isobutil carbinol)

Propilè → cumè → acetona + fenol. Propilè → percloroetilè + tetraclorometà (per-tetra)

Propilè → clorur d'al·lil → epiclorhidrina ( → reïnes epoxi, glicerina), alcohol al·lílic ( → glicerina). Glicerina des de greixos animals.

Propilè → òxid de propilè ( → alcohol al·lílic) → propilenglicol i polipropilenglicol.

Propilè → acrilonitril, acroleïna ( → àcid acrílic i acrilats). Propilè → hidroformilació d'olefines, el procés oxo: aldehids i alcohols oxo.

Oligomerització del propilè.

- Butadiè, butens, isobutilè i els seus derivats.

Butadiè → cloroprè, adiponitril, ciclooctadièopile.

Butens → butadiè, *sec*-butanol ( → butadona (MEK)), anhídrid maleic ( → tetrahidrofuran).

Isobutilè → *tert*-butanol, metil *tert*-butil èter, derivats *tert*-butilats, gasolines sintètiques.

- El Benzè i els seus derivats.

Benzè → etilbenzè → estirè.

Benzè → fenol → 2, 4-D, bisfenol A, àcid salicílic.

Benzè → nitrobenzè → anilina → metilendiisocianat.

Benzè → alquilbenzens, antraquinona.

Ciclohexà → ciclohexanona → àcid adípic i ε-caprolactama.

- Toluè, xilens i els seus derivats.

Toluè → dinitrotoluè → tolildiisocianat.

Toluè → benzaldehid, àcid benzoic.

orto-Xilens → anhídrid ftàlic → ftalonitril.

para-Xilens → tereftalat de metil

- La indústria farmacèutica.

Característiques. Etapes de la investigació i desenvolupament d'un fàrmac. Les eres de la història de la indústria farmacèutica: abans de 1935; l'era de les sulfamides (després de 1935); l'era de les penicil·lines (després de 1948); l'era dels compostos enantiomèricament purs (després de 1964).

- La indústria dels pesticides.

Característiques. Les eres de la història de la indústria dels pesticides: abans de 1945; l'era del DDT (després de 1945); l'era dels pesticides no clorats; l'era de les feromones. Insecticides; els insecticides biològics: feromones i hormones juvenilitzadores. Fungicides. Herbicides.

- La indústria dels detergents.

Els greixos naturals i els sabons. Alquilbenzensulfonats de cadenes ramificades i de cadenes lineals; preparació d'a-olefines. Altres tensioactius aniònics; preparació d'alcohols grassos. Tensioactius no iònics; polioxietilenats. Tensioactius catiònics; sals d'amoni quaternari.

- Colorants.

Colorants azoics. Derivats del trifenilmetà. Derivats de l'antraquinona. Indi. Ftalocianines.

- Polímers.

Correlació entre l'estructura química i les propietats d'un polímer. Polímers vinílics; tipus de polimerització vinílica. Elastòmers i cautxús. Polièsters. Poliamides. Fibres naturals, artificials i sintètiques. Poliuretans. Reïnes.

- Els *Fine Chemicals*.

- Concepte de *fine chemical*, de *commodity* i de *specialty*, la seva esperança de vida comercial. Localització dels *fine chemicals* en l'arbre genealògic dels productes químics. Característiques del sector. Exemple: l'arbre genealògic descendent de la dicetena.