



Universitat Autònoma de Barcelona

**TITULACIÓ:** Química

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

**CURS:** 2003/2004

**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  $\rightarrow$  clorometans  $\rightarrow$  clorofluorometans.

Metà  $\rightarrow$  cianur d'hidrogen  $\rightarrow$  clorur de cianur.

Metà  $\rightarrow$  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  $\rightarrow$  metanol ( $\rightarrow$  formol, àcid acètic, metilamines), àcid fòrmic.

CO  $\rightarrow$  foscà  $\rightarrow$  compostos en quart grau d'oxidació.

CO<sub>2</sub>  $\rightarrow$  urea  $\rightarrow$  melanina.

- Els hidrocarburs fonamentals.

Cracking tèrmic de naftes i de gas natural: etilè, propilè, butilè, isoprè i ciclopentadiè. Cracking catalític: gasolines i hidrocarburs aromàtics. Reforming de naftes: 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  $\rightarrow$  dicloroetà  $\rightarrow$  clorur de vinil, etilendiamina.

Etilè  $\rightarrow$  acetaldehid  $\rightarrow$  àcid acètic, pentaeritritol, piridines, acetat de vinil.

Etilè  $\rightarrow$  òxid d'etilè  $\rightarrow$  etanolamines, etilenglicol i polietilenglicol.

Etilè  $\rightarrow$  etanol  $\rightarrow$  esters etílics, cloral.

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

- El propilè i els seus derivats.

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

Propilè  $\rightarrow$  cumè  $\rightarrow$  acetona + fenol. Propilè  $\rightarrow$  percloroetilè + tetraclorometà (per-tetra)

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

Propilè  $\rightarrow$  òxid de propilè ( $\rightarrow$  alcohol al·lílic)  $\rightarrow$  propilenglicol i polipropilenglicol.

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

Oligomerització del propilè.

- Butadiè, butens, isobutilè i els seus derivats.

Butadiè  $\rightarrow$  cloroprè, adiponitril, ciclooctadièopile.

Butens  $\rightarrow$  butadiè, sec-butanol ( $\rightarrow$  butadona (MEK)), anhídrid maleic ( $\rightarrow$  tetrahidrofuran).

Isobutilè  $\rightarrow$  *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. Ftalcianines.

- 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.