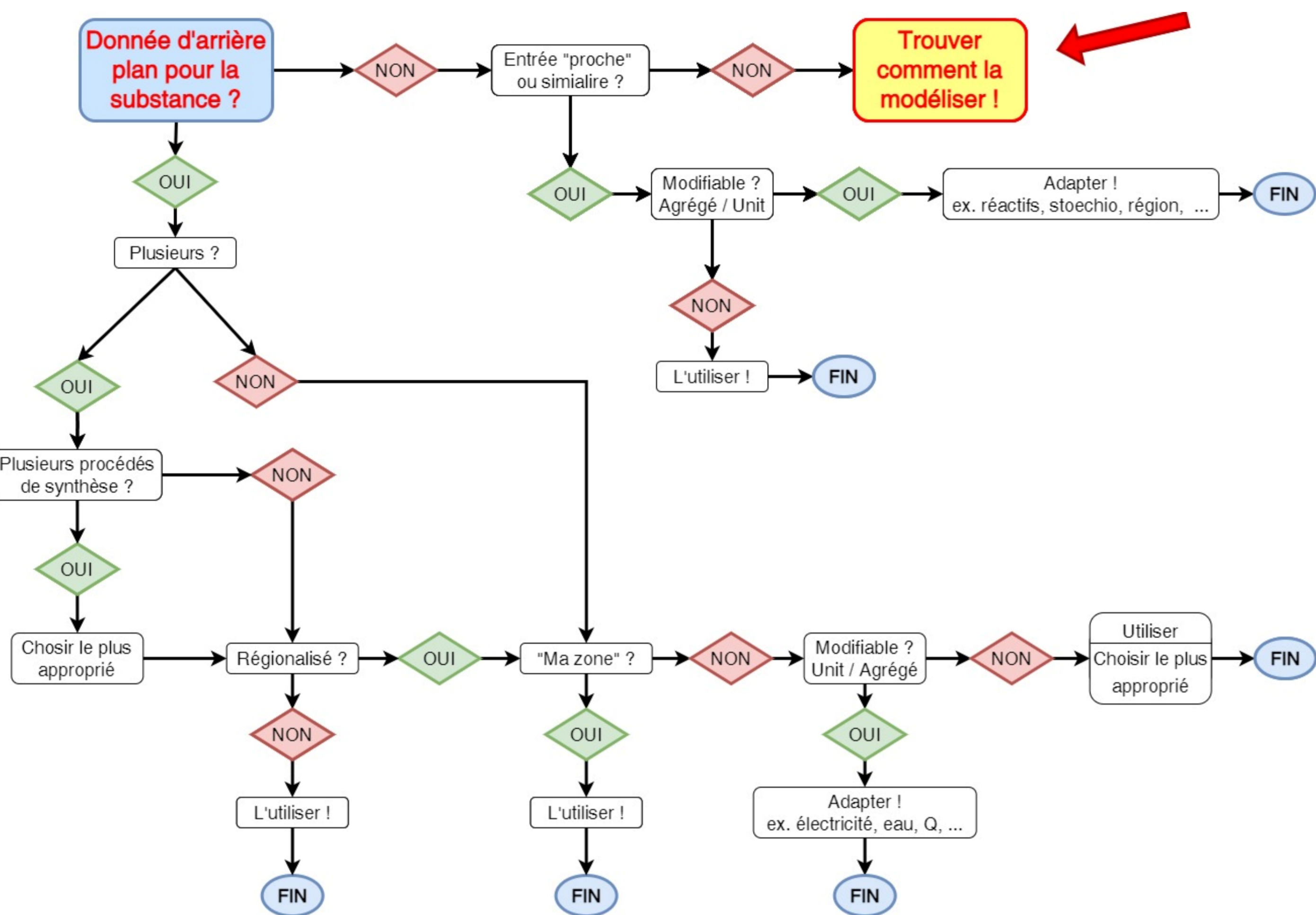
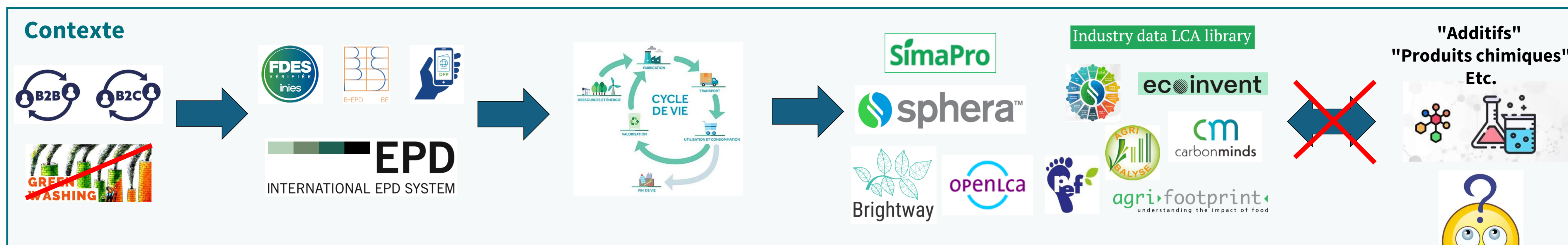


# Analyse du cycle de vie de produits sortant des domaines couramment représentés dans les bases de données généralistes

**Dr Ir Sylvie Gros Lambert, Prof Angélique Léonard**  
En collaboration avec Ir Sabela Teixeira Taboada  
Liège Université (ULiège - Belgique) - s.gros Lambert@uliege.be



**Il existe une entrée d'arrière-plan très proche**

**2-Méthoxyéthanol**: méthanol + oxyde d'éthylène (protoné) → 2-méthoxyéthanol

$$CH_3OH + C_2H_4O \rightarrow C_3H_8O$$

ecoinvent: Methyl-3-methoxypropionate: synthèse: méthanol + méthyl acrylate  
⇒ Remplacement du méthyl acrylate par l'oxyde d'éthylène

- Adaptation des quantités: stoechiométrie
- Consommations d'énergie (électricité, chaleur): conservées telles quelles

**Il existe une entrée d'arrière-plan très proche**

**"Soude" / Carbonate de soude naturel**: Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>: ecoinvent: procédé Solvay uniquement

Mais ...

**USLCI: Soda ash** incluant le trona comme ressource naturelle  
⇒ Utilisation comme référence de base

- Adaptation des entrées US par des européennes
- Adaptation des sources d'énergie (bituminous coal → natural gas)

**Aucun "proxy" disponible ...**  
⇒ **Création du modèle**

**Synthèse + Production**

- Réaction**: stoechiométrie: a A + b B → c C + d D  
Rendement? coproduits? (⇒ allocations?)
- Procédé**:
  - Énergie: électricité, chaleur
  - Émissions, déchets
  - Autres ...

**Il existe une EPD pour le produit / un article avec les résultats**  
→ **sans inventaire disponible**

⇒ Même méthode / mêmes facteurs de caractérisation: EN15804+A2, EF 3.x

- Utilisation des résultats tels quels
- Création de pseudo-substances correspondant aux catégories
- Input from nature, emissions to air/water/soil, waste, ...
- Ajout de FC = 1 pour ces pseudo-substances dans les méthodes



**Synthèse?** → outils de recherche, bibliographie, brevets, IA, ...

Google Scholar, ULLMANN'S ENCYCLOPEDIA OF INDUSTRIAL CHEMISTRY, WIKIPÉDIA Encyclopédie Libre, PrepChem SYNTHETIC CHEMISTRY ENABLED, Claude, FPO DRIVING UP FORWARD, perplexity, ChatGPT, NIST WebBook de Chimie NIST, SRD 69

**Production: Données génériques ecoinvent**  
Utilisées pour les *chemicals (in)organiques*

⇒ **Proxy le plus pertinent en l'absence de données primaires**

→ **Électricité**: ex. Calculated based on literature data published by the GENDORF Chemical Park. The factory produced an average of 2462760 tonnes of chemical substances (including intermediates) per year in the years 2015-2019. The average consumption of electricity in the years 2015-2019 was 982796751 kWh per year. This equals 0.39906 kWh/kg chemical produced.

→ **Chaleur**: ex. Calculated based on literature data published by the GENDORF Chemical Park. The factory produced an average of 2462760 tonnes of chemical substances (including intermediates) per year in the years 2015-2019. The average consumption of natural gas in the years 2015-2019 was 4645920000 MJ per year. This equals 1.8865 MJ/kg chemical produced.

**2-éthyl hexyl amine C<sub>8</sub>H<sub>19</sub>N (CAS 104-75-06)**

→ **Sources**: Prepchem, Wikipedia, ecoinvent

→ **Réaction**:  
C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>OH (2-ethylhexanol) + NH<sub>3</sub> → C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>NH<sub>2</sub> (2-ethylhexylamine) + H<sub>2</sub>O

→ **Procédé**: ? → proxy ecoinvent: dioctyl terephthalate  
→ Utilise le 2-éthyl hexanol en tant qu'intermédiaire pour sa synthèse  
→ Énergie (électricité, chaleur) conservée + adaptation région  
→ Émissions, déchets: conservés

**Thiophène C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>S (CAS 110-02-1)**

→ **Sources**: Brevet, ecoinvent

→ **Réaction**:  
C<sub>4</sub>H<sub>6</sub> (1,3-butadiene) + S → C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>S (thiophene) + H<sub>2</sub>

→ **Procédé**: ? → proxy ecoinvent: pyridine cf. hétérocycle  
→ Rendement, ratio butadiène/soufre  
→ Énergie (électricité, chaleur) conservée + adaptation région  
→ Émissions, déchets: non

**2-Méthyltétrahydrofurane CH<sub>3</sub>C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>O (CAS 96-47-9)**

Article ACV MeTHF – inventaire confidentiel!  
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acssusresmg.4c00144>

Mais inventaire précurseur: Furfural (+ H<sub>2</sub>)  
→ proxy avec ratio précisé dans l'article

**Furfural C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub> (CAS 98-01-1)**

→ **Sources**: article, ecoinvent  
→ **Synthèse** à partir de maïs  
Inventaire: dans les informations complémentaires

**Iodure de potassium KI (CAS 7681-11-0)**

→ **Sources**: Ullman, ecoinvent

→ **Réaction**:  
I<sub>2</sub> + SO<sub>2</sub> + 4 KOH → 2 KI + K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> + 2 H<sub>2</sub>O

→ **Procédé**: ? → proxy ecoinvent  
→ Methyl iodide, Potassium perchlorate  
→ Coproduits: allocation (massique/économique)  
→ Énergie (électricité, chaleur) identique  
⇒ conservée + adaptation région

**Références**

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/14356007>  
<https://www.wikipedia.org/>  
<https://webbook.nist.gov/chemistry/>  
<https://www.freepatentsonline.com/>  
<https://scholar.google.be/>  
<https://ecoquery.ecoinvent.org/>

<https://chatgpt.com/>  
<https://claude.com/product/overview>  
<https://researchrabbitapp.com/>  
<https://www.google.com/>  
<https://www.perplexity.ai/>  
<https://www.opera.com/fr/features/aria>

<https://www.comport.com/digital-product-passport/>  
<https://www.linkedin.com/pulse/rse-washing-greenwashing-que-se-cache-t-il-derriere-ces-jaurrey-uf0le/>  
<https://support.simapro.com/s/article/How-to-use-external-LCIA-results-in-your-LCA-model>  
[https://fr.freepik.com/vecteurs-premium/tableau-chimie-dessine-main\\_4503937.htm](https://fr.freepik.com/vecteurs-premium/tableau-chimie-dessine-main_4503937.htm)  
<https://www.sciencedirect.com/topics/chemical-engineering/flowsheet>  
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acssusresmg.4c00144>