MŰANYAGFAJTÁK, KOMPOZITOK, BIOMŰANYAGOK

A mesterséges intelligencia szerepe a bioműanyagok fejlesztésében

Hivatkozás: Vargas, M., AI's Role in Bioplastics Development, Plastics Engineering, 2025. március 17. https://www.plasticsengineering.org/2025/03/ais-role-in-bioplastics-development-008220/#

Tárgyszavak: 1. Anyag 2. Polimer 3. Tömegműanyag 4. Bioműanyag 5. Mesterséges intelligencia 6. Fejlesztés

A műanyagtermelés 2023-ban elérte a 413,8 millió tonnát, amelynek közel 40%-át csomagolási célokra használták fel. A műanyagszennyezés környezeti és egészségügyi hatásai azonban sok problémát okoznak. A mikroműanyagok szennyezik az ökoszisztémákat, az újrahasznosítási erőfeszítések pedig nem elégségesek, így sok műanyag évszázadokig megmarad a környezetben.

A bioműanyagok, különösen a PHA-k (polihidroxi alkanoátok), fenntartható alternatívát kínálnak a hagyományos műanyagokkal szemben. A mikroorganizmusok szén-dioxid és szerves anyagok felhasználásával állítják elő ezeket a biológiailag lebontható polimereket zárt, környezetbarát ciklusban. Ugyanakkor a hagyományos műanyagok megfelelő helyettesítőjének megtalálása eddig lassú és költséges volt, valamint jelentős erőforrásokat igényelt.

A probléma megoldására a kutatók mesterséges intelligenciát (MI) használnak. Ezek az MI eszközök megjósolják a bioműanyagok tulajdonságait, nagy adathalmazokat vizsgálnak és olyan PHA alapú anyagokat találnak, amelyek hasonlóan jól működnek, mint a hagyományos műanyagok. Ez a megközelítés megváltoztatja a fenntartható műanyagok tervezésének módját, gyorsabbá és hatékonyabbá teszi a folyamatot.

A gépi tanulás segítségével, közel 23 000 kísérleti adat felhasználásával tulajdonság-előrejelző modelleket készítettek a termikus, mechanikai és gázáteresztési jellemzők meghatározására. 540 PHA variáns és 13 hagyományos polimer különböző arányú kombinálásával 1,4 millió polimer jelöltet találtak. Három, több feladatot egyszerre ellátó neurális hálózat elemezte a jelölthalmazt. Mindegyik egy-egy tulajdonságra összpontosított: a termikus, mechanikai vagy gázáteresztő képességre. A modellek megjósolták, hogy a PHA-k és kopolimereik hogyan helyettesíthetik a polietilént, a polipropilént, a PVC-t, a polisztirolt, a PET-et és a PA 6-ot.

Annak biztosítására, hogy az MI által kiválasztott anyagok életképesek legyenek az alkalmazásokban, a kutatók kétlépcsős megközelítést alkalmaztak. Összehasonlították a bioműanyag jelöltek megjósolt tulajdonságait az általános műanyagok tulajdonságaival és kiválasztották a legközelebbi egyezéseket. Értékelték a jelöltek előállíthatóságát az ismert biológiai vagy kémiai szintézisútvonalakra összpontosítva. A modellek 14 ígéretes PHA alapú anyagot azonosítottak, amelyek helyettesíthetik a kőolaj alapú műanyagokat. A legjobb jelöltek mindegyike rendelkezett aromás oldallánc-csoportokkal, ami javítja a mechanikai tulajdonságaikat. Kimutatták, hogy a *Pseudomonas oleovorans* mikroorganizmusok képesek természetes úton ilyen tulajdonságokkal rendelkező PHA-kat előállítani bioszintézissel.

A PHA-k keverése hagyományos polimerekkel további lehetőségeket nyújt, kopolimerjeik rugalmasabbak, erősebbek és hőstabilabbak voltak. Ezek a hibrid anyagok zökkenőmentes átmenetet biztosítanak a bioalapú alternatívákhoz, segítve az iparágat a fenntartható anyagok átvételében anélkül, hogy a feldolgozási rendszereikben jelentős változásokat kellene végrehajtani.

A PHA-k biológiailag lebonthatók és megújuló forrásokból származnak, de nagy mennyiségben történő előállításuk még mindig nehéz. Bár a mikrobiális fermentáció bevált módszer, kisebb költségekre és nagyobb méretezhetőségre van szükség. A géntechnológia és az anyagcsere optimalizálása terén elért előrelépések növelhetik a PHA előállításának hatékonyságát, ami segíthet a kőolaj alapú műanyagokkal való versenyben.

Cikk nyelve: angol
Készítette: dr. Lehoczki László