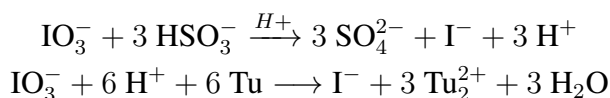


## Zárójelentés az „Reakció-diffúzió és kemomechanikai mintázatok előállítása és vizsgálata” kutatási program (OTKA 77986) során elért eredményekről

A kutatási program céljának megfelelően sikerült: (a) új kémiai rendszerekben mozgó és stacionárius kémiai mintázatok előállítanunk, (b) hidrogénion autokatalitikus reakciók és kemoreszponzív hidrogélek kapcsolásával autonóm kemomechanikai rendszereket kialakítani. A pályázat támogatásával végzett kutatómunka eredményeit 10 cikk, 6 előadás és 4 poszter formájában mutattuk be. Folyamatban van további két kézirat megírása, amelyekben elsősorban a kísérleti eredmények értelmezéséhez szükséges szimulációk eredményeit kívánjuk bemutatni. A szélesebb közönség számára a „Kutatók Éjszakája” és az „Alkímia Ma” rendezvények keretében kísérleti bemutatóval kísért előadásokat tartottunk, illetve ismeretterjesztő cikkeket jelentettünk meg.

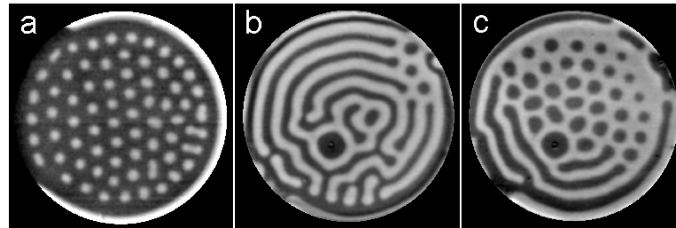
### Mintázatképződés a jodátion-szulfition-tiokarbamid rendszerben

A jodátion-szulfition-[hexaciano-ferrát(II)]-ion (FIS) reakció-diffúzió rendszerben már a 1990-es évek elején változatos dinamikai jelenségek, kémiai hullámok stacionárius mintázatok és önreprodukáló foltok kialakulását figyelték meg. Korábbi kutatásaink során sikerült tisztáznunk, hogy a stacionárius mintázatok létrejöttében fontos szerepet játszik a kis mobilitású protonálódásra képes komponensek jelenléte. Ezek lehetnek a gélvázhoz kötött karboxilcsoportok, vagy az oldatban lévő polielektrolitok egyaránt. Ezt az eredményt felhasználva javaslatot tettünk egy kísérleti tervező módszerre, amelynek segítségével szisztematikusan megtalálhatóak a stacionárius mintázatok kialakuláshoz szükséges paraméterek egy aktivátor-inhibitor rendszerben. Az első sikeres kísérletsorozatot a jodátion-szulfition-tiokarbamid (TuIS) reakcióval végeztük el. Ebben az alábbi első reakció adja az autokatalitikus, a második pedig az inhibitor folyamatot.



Munkánk során vizsgáltuk a reakció nyitott, jól kevert reaktorban (CSTR) és egy oldalról táplált géltreaktorban (OSFR) mutatott dinamikai viselkedését. CSTR-ban kétféle típusú bistabilitást, két stacionárius állapot, illetve egy oszcilláló és egy stacionárius állapot közöttit tapasztaltunk. A hozzáadott polielektrolit (nátrium-poliakrilát) hatására a stacionárius állapotok között kialakuló bistabilitás paramétertartománya csökken. Meglepő módon ezzel párhuzamosan az oszcilláció tartománya kiszélesedik. A reakció-diffúzió rendszer viselkedésének vizsgálatához kétféle reaktor konfigurációt használtunk. Kiindulásként egy gyűrű alakú géltreaktorban, ahol a reagensek betáplálása a gyűrű peremén történik feltérképeztük

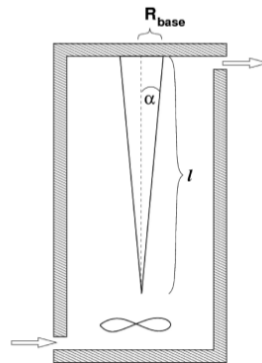
a rendszer nemegyensúlyi fázisdiagramját. A térbeli bistabilitás és oszcilláció kialakulásához szükséges paraméterek ismeretében áttértünk egy korong alakú gélt tartalmazó OSFR használatára. Ebben a betáplálás irányára merőlegesen pszeudokétdimenziós mintázatok figyelhetők meg. A jól ismert kémiai hullámok mellett, töredezett (instabil) hullámokat, labirintus és Turing mintázatokat (1. ábra) sikerült előállítanunk.



1. ábra. Turing mintázatok a jodátion-szulfition-tiokarbamid rendszerben. (forrás: Horváth, J.; Szalai, I.; De Kepper, P. Physica D, 239, 776-784, 2010)

### A diffúziós anyagtranszport szerepének vizsgálata Landolt reakciókon alapuló reakció-diffúzió rendszerekben

Az előzőekben tárgyalt két Landolt reakcióra épülő rendszerben vizsgáltuk a gél és CSTR közötti diffúziós anyagtranszport szerepét. Ennek egyik kulcsparamétere a gél vastagsága. Kísérleteinkhez olyan reaktort használtunk, amelyben egy kúp alakú gélt (2. ábra) követtük a mintázatok kialakulását.

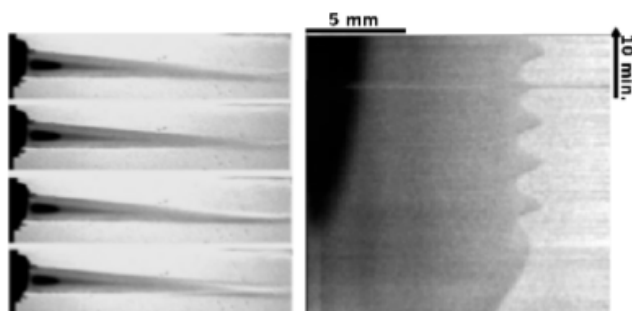
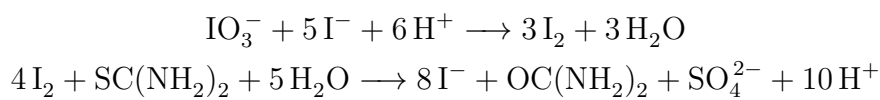


2. ábra. Kúp alakú gélt tartalmazó OSFR.

Tisztán diffúziós anyagtranszportot feltételezve az várható, hogy a gélben kialakuló oszcilláció periódusideje a gélvastagság négyzetével skálázódik. Azonban mindkét vizsgált rendszerben ettől jelentősen eltérő viselkedést tapasztaltunk. Ezt

azzal magyaráztuk, hogy a periódusidő hosszának meghatározásában fontos szerepet játszik a kémiai inhibíció időskálája is. A diffúziós anyagtranszport számított időskálájához képest, a megfigyelt peridusidők általában kisebbek, különösen igaz ez a TuIS rendszer esetében. Vizsgálataink rámutattak arra is, hogy két rendszer dinamikai viselkedésében tapasztalt különbségek a negatív visszacsatolást adó kémiai folyamatok, a jodátion-[hexaciano-ferrát(II)]-ion és a jodátion-tiokarbamid reakciók eltéréseire vezethetők vissza. Az utóbbi reakció összetettebb kinetikáját kádreaktorban és CSTR-ban végzett kísérletekkel is alátámasztottuk. Ebben az egyik kiemelendő tényező a ditio-bis(formamidin) köztitermék pufferelő hatása.

A Tuis rendszerben nagyobb gélvastagságnál egy újabb front megjelenése tapasztalható. Ennek a frontnak a kialakulás nem a hidrogénion autokatalitikus reakció következménye, hanem az alábbi két reakció együttes hatásként kialakuló jodidion autokatalízisé. A kúp alakú geometria lehetőséget teremt, hogy egyszerre lássuk a pH frontot a kisebb, és a jód frontot a nagyobb átmérőjű tartományban (3. ábra). Az is jól látható, hogy amíg az előbbi front oszcillál addig az utóbbi stacionárius állapotban van.



3. ábra. Stacionárius jód front az oszcilláló pH front mögött a TuIS reakcióban. (Forrás: Takacs N, Horvath J, Szalai I Journal of Physical Chemistry A 114, 7063-7069., 2010)

### Kemomechanikai oszcilláció hidrogélekben

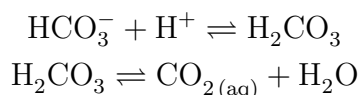
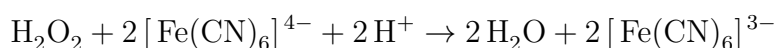
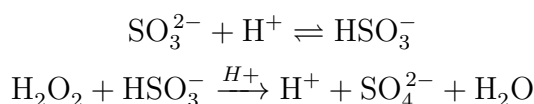
A pH-érzékeny gélekre épülő kemomechanikai instabilitásokat mutató rendszerek vizsgálata során a bromát-szulfid reakciót használtuk amelybe polielektrolit géleket helyeztünk. A gélek hidrofób jellegének változtatásához a kiin-

dulási N-izopropilakrilamid-akrilsav kopolimerhez harmadik komponensként N-tercbutilakrilamidot polimerizáltunk. Az így előállított rendszerben demonstrálni tudtuk, hogy a korábban elméletileg megjósolt kemomechanikai instabilitás, amelyben a negatív visszacsatolást a gél térfogatváltozása adja, kísérletileg létrehozható. Fontos kiemelni, hogy az oszcilláció, a periodikus alakváltozás ebben a rendszerben csak akkor jön létre ha az alkalmazott gél kellő mértékű összehúzódásra képes, hiszen a reakció önmagában csak bistabilitást mutat. Részletesen vizsgáltuk a kialakuló kemomechanikai oszcillációk jellemzőit, így például a gélek periodikus összehúzódása által végzett munkát, amelynek jellemző teljesítménye  $5,4 \times 10^{-6}$  mW körüli értéknek adódott.

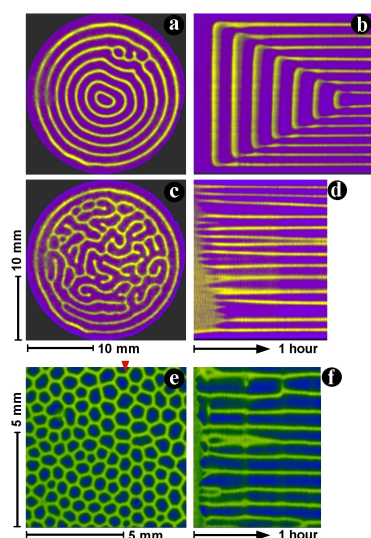
### **Mintázatképződés a hidrogén-peroxid-szulfition-[hexaciano-ferrát(II)]-ion és a hidrogén-peroxid-szulfition-hidrogénkarbonátióion rendszerekben**

A kutatási program legfontosabb eredményeit a hidrogén-peroxid és szulfition közti hidrogénion autokatalitikus reakcióra épülő rendszerekkel kapcsolatban értük el. Az itt vizsgált reakciókkal az első olyan nem halogén kémián alapuló reakció-diffúzió rendszereket hoztuk létre, amelyekben fenntartott térbeli mintázatok kialakulását lehet megfigyelni.

A hidrogén-peroxid-szulfid reakció megfelelő negatív visszacsatolás jelenlétében pH-oszcillációkat mutat jól kevert, folytonosan táplált reaktorban. A negatív visszacsatolást, az irodalomban ismert módon, [hexaciano-ferrát(II)]-ion illetve hidrogén-karbonát segítségével hoztuk létre.



Az így összeállított hidrogén-peroxid-szulfid-ferrocianid (HPSF) illetve hidrogén-peroxid-szulfid-hidrogén-karbonát (HPSC) rendszereket nyitott gélreaktorban vizsgáltuk. Mindkét esetben mozgó pH-hullámok illetve lokalizált stationárius pH-mintázatok kialakulását tapasztaltuk. Megfigyeltünk továbbá térben lokalizált oszcillációt is, aminek hátterében valószínűleg szubkritikus Hopf-bifurkációt áll, ennek kísérletes megfigyelésére nem találtunk korábbi utalást az

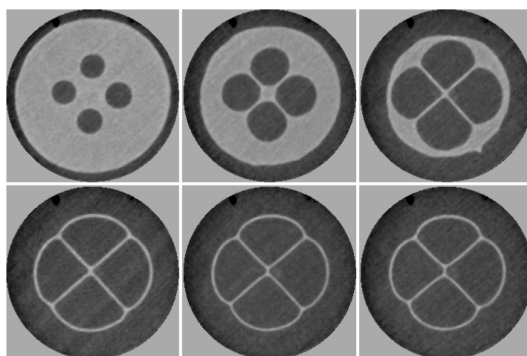


4. ábra. Mintázatok a HPSF és a HPSC rendszerekben. (Forrás: Szalai Istvan, Horvath Judit, Takacs Nandor, De Kepper Patrick Physical Chemistry Chemical Physics, 13, 20228, 2011)

irodalomban. A stacionárius mintázatok kialakulását itt is polielektrolit hozzáadásával indukáltuk (4. ábra). A kialakult mintázatok jellemzően lokalizált jellegűek, ami ismét a mögötte instabilitás szubkritikus jellegére utal. Megmutattuk azt is, hogy a HPFS rendszerben kialakuló mintázatok fényérzékenyek, ami lehetőséget ad dinamikai viselkedés befolyásolására. A fényérzékenység oka az, hogy fény hatására eltolódik a [monoaqua-pentaciano-ferrát(II)]-ion képződésével járó egyensúlyi folyamat. A [monoaqua-pentaciano-ferrát(II)]-ion pedig katalizálja a hidrogén-peroxid-[hexaciano-ferrát(II)]-ion reakciót. A jelenlévő katalizátor mennyiségét számos faktor befolyásolja többek között a reagensek minősége illetve az is, hogy mennyi fény éri az oldatot. Mindkét rendszerre közösen jellemző, hogy a hidrogénionok diffúziója és ennek következtében a dinamikai viselkedés érzékeny minden jelenlévő protonálódásra képes komponens koncentrációjának megváltozásra: számolni kell a közegként használt agarózban lévő karboxil csoportok, illetve az indikátor hatásával is.

Ellentétben a térkitöltő Turing mintázatokkal, az úgynevezett lokalizált mintázatok olyan izolált szerkezetek, amelyek beágyazódnak egy másik stacionárius állapot által kitöltött mezőbe. Ilyen mintázatok tipikusan bistabilitást mutató rendszerekben alakulnak ki. Az általunk vizsgált rendszerekben savas vonalak jelennek meg a homogén semleges/enyhén lúgos háttérben. A HPSF reakció fényérzékenysége lehetőséget ad a lokalizált mintázatok stabilitásának vizsgálatára. Ehhez különböző geometriai elrendezésben pontszerű fény perturbációkat alkalmaztunk. Megmutattuk, hogy a lokalizált mintázatok megőrzik a kezdeti geometriát.

riai perturbáció szimmetriáját (5. ábra). A HPSF rendszerben létrehozható lokalizált mintázatok tehát ebben az értelemben alkalmasak információátvitelre. Fontos tulajdonsága ennek a rendszernek, hogy a lokalizált mintázatok nem mutatnak transzverzális instabilitást. Ez a tulajdonság felhasználható labirintusokban a legrövidebb útvonal megtalálására is. Megmutattuk, hogy egy egyszerű esetben ahol egy be- illetve kijárat van de több zsákutca is, a kialakuló mintázat kijelöli a bejáratától a kijáratig vezető útvonalat.



5. ábra. Fénnyel végzett perturbációk után kialakuló mintázat a HPSF rendszerben. (Forrás: István Szalai, Daniel Cuiñas, Nándor Takács, Judit Horváth, and Patrick De Kepper J. R. Soc. Interface Focus 2 417-432 2012)

A HPSC rendszerben megfigyelt összetett viselkedés, ahol kémiai hullámok és egyfajta hálózatszerű mintázatok együttesen vannak jelen, magyarázatához további vizsgálatokat, elsősorban szimulációkat tervezünk.

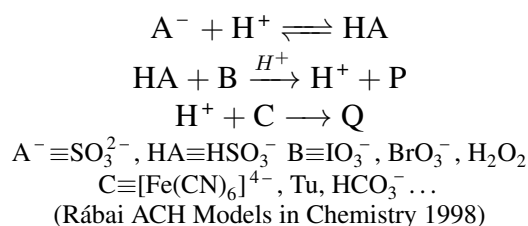
### Reakció-diffúzió mintázatok előállításának módszere

A térbeli mintázatok létrehozására javasolt tervező módszerünk elvi megfontolásairól, az ennek kapcsán felmerült matematikai kérdésekről a "Communications on Pure and Applied Analysis" folyóiratban közölt cikkünkben számoltunk be. Ebben kiemeltük, hogy a kísérletekben alkalmazott reaktorokban megfigyelhető mintázatképződésre a vegyes peremfeltételek jelenlétének (Dirichlet és Neumann) meghatározó szerepe van. Fontos továbbá, hogy az általunk alkalmazott módszer során, amikor egy kis mobilitású komplexképző (polielektrolit) segítségével szabályozzuk az aktivátor effektív diffúzióját, egyben a pozitív visszacsatolás kinetikáját is befolyásoljuk. Ez az elkerülhetetlen kettős hatás, korlátozza a kísérletekben megfigyelhető jelenségeket. Végül arra is rámutattunk, hogy a gél és a jól kevert tankreaktor között diffúziós anyagcsere figyelembe vétele a kísérletek matematikai modellezésében alapvető jelentőségű.

## Hidrogénion autokatalitikus rendszerek dinamikai viselkedésének modellezése

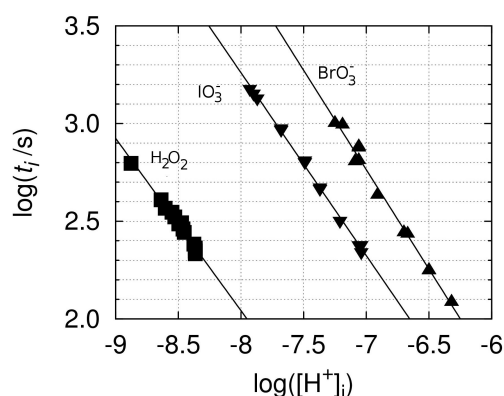
Az utóbbi évek során számos hidrogénionra autokatalitikus reakció-diffúzió rendszert tanulmányoztunk. A kutatási munka további folytatása illetve a meglévő eredmények értelmezésére elkezdjük a hidrogénion autokatalitikus reakció-diffúzió rendszerek modellezését. Két alapvető probléma merült fel ezzel kapcsolatban. Az egyik a kísérletekben használt reaktorok leírásának módja, mert a kísérletekben megfigyelt pszeudo-kétdimenziós mintázatok korrekt leírása háromdimenziós reakció-diffúzió egyenletekre vezet, melyek megoldása számításigényes. A másik a szimulációkhoz használt kinetikai modell kiválasztásával kapcsolatos, azaz, hogy egy általános modell viselkedését vagy a különböző reakciókra jellemző részletes modelleket vizsgáljuk.

Az utóbbi kérdésben a Rábai Gyula által javasolt általános pH-oszcillátor modell tanulmányozása mellett döntöttünk. Ez a következő három lépést tartalmazza:



Erről a modellről ismert, hogy alkalmas a CSTR-ban megfigyelt jelenségek, a bistabilitás, oszcilláció és gerjeszthetőség leírására egyaránt. Megmutattuk azt is, hogy szintén jól visszaadja a félig nyitott és kádreaktorban tapasztalható viselkedést. Megvizsgáltuk a modell néhány általános jellemzőjét és megmutattuk, hogy ezek valóban összhangban vannak a jodátion-szulfition, bromátion-szulfition és a hidrogén-peroxid-szulfition reakciókban végzett kísérletek eredményeivel. Kiemelésre érdemes, hogy a kádreaktorban tapasztalható indukciós periódus hossza mindhárom vizsgált oxidálószer esetében hasonló módon függ a kiindulási pH-tól (6. ábra). Ezzel megerősítettük azt, hogy a első közelítésben az oxidálószer kémiai jellege csak az oxidáció sebességét szabja meg. Mindezek alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy a Rábai modell jó kiindulási pontja lehet a hidrogénion autokatalitikus RD rendszerek vizsgálatának.

A kísérletekben használt OSFR reaktorok (7. ábra) matematikai leírására kö-



6. ábra. Az indukciós periódus hosszának függése a kezdeti pH-tól, Landolt típusú reakciókban. (Forrás: István Molnár, Nándor Takács, Krisztina Kurin-Csörgei, Miklós Orbán and István Szalai International Journal of Chemical Kinetics 45, 462-468, 2013)

vetkező egyenletrendszer alkalmas:

$$\frac{d\mathbf{c}_{\text{cstr}}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{c}_{\text{cstr}}, k_1, k_2 \dots k_n) + k_0(\mathbf{c}_0 - \mathbf{c}_{\text{cstr}}) \quad (1)$$

$$\partial_t \mathbf{c} = \mathbf{f}(\mathbf{c}, k_1, k_2 \dots k_n) + \mathbf{D} \Delta \mathbf{c} \quad (2)$$

$$\text{Dirichlet peremfeltétel } x = 0 (\forall y, z) : \mathbf{c}(x = 0, y, z) = \mathbf{c}_{\text{cstr}}$$

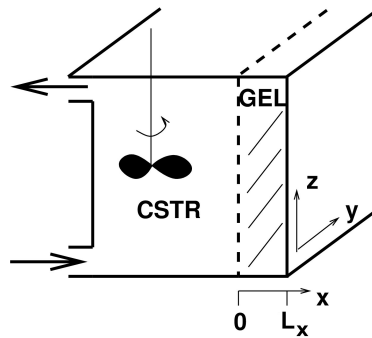
Neumann peremfeltétel a többi peremen

Ez rámutat arra a tényre, hogy az irodalomban elterjedten használt közelítés, amelyben a gél vastagságát, azaz az  $x$ -irányú kiterjedését elhanyagolják, csak speciális esetekben fogadható el. A pseudo-kétdimenziós, az  $y - z$  síkban megfigyelt mintázatok leírásához szükséges háromdimenziós szimulációk azonban, különösen számos (5-7) kémiai komponens jelenlétében eléggé számításgényes feladatot jelentenek. Ehhez kapcsolódóan kidolgoztuk a kísérletekben alkalmazott nyitott gélreaktorok egy új közelítő leírás módját. Ebben a közelítésben a pseudo-kétdimenziós gél és a tankreaktor közötti csatolás leírásában figyelembe vesszük azt, hogy a diffúziós anyagcsere sebessége egyrészt az egyes komponensek diffúziós együtthatójától, másrészt a gél vastagságától ( $L_x$ ) is függ. Ez utóbbit azonban illesztendő paraméterként érdemes kezelni. A közelítő módszernek (DFUR) megfelelő egyenletrendszer a következő módon írható le:

$$\frac{d\mathbf{c}_{\text{cstr}}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{c}_{\text{cstr}}, k_1, k_2 \dots k_n) + k_0(\mathbf{c}_0 - \mathbf{c}_{\text{cstr}}) \quad (3)$$

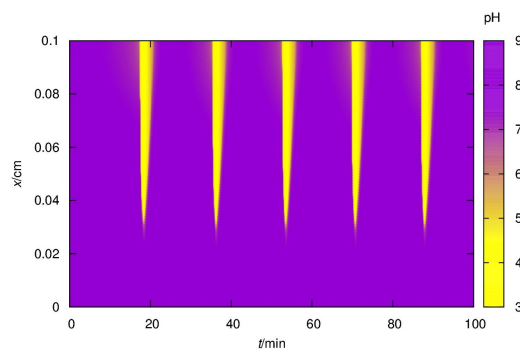
$$\partial_t c_i = \mathbf{f}(\mathbf{c}, k_1, k_2 \dots k_n) + \frac{D_i}{L_x^2} (c_i - c_{i,\text{cstr}}) + D_i (\partial_y^2 c_i + \partial_z^2 c_i) \quad (4)$$





7. ábra. Nyitott gélreaktor (OSFR).

A DFUR közelítés előnye, hogy: figyelembe veszi az egyes komponensek eltérő sebességű anyagcseréjét és a gélvastagság, mint alapvető kísérleti paraméter megjelenik az anyagcsere kinetikájában. Fontos azonban megjegyezni, hogy ez a közelítés is korlátozott érvényességű. Ezért a szimulációkban a következő stratégiát követtük: első lépésként egy dimenzióban (azaz az  $x$  koordináta mentén) vizsgáljuk a modell alapvető dinamikai viselkedést vegyes peremfeltételek mellett (1-2 egyenletek); második lépésként megvizsgáljuk DFUR modell alkalmazhatóságát, illesztjük annak  $L_x$  paraméterét az előző szimulációk eredményéhez (3-4 egyenletek); harmadik lépésként a DFUR módszer segítségével vizsgálhatjuk a pseudo-kétdimenziós dinamikai viselkedést. A szimulációkkal kapcsolatos néhány előzetes eredményt már publikáltunk (István Szalai, Daniel Cuiñas, Nándor Takács, Judit Horváth, and Patrick De Kepper J. R. Soc. Interface Focus 2 417-432 2012), azonban a részletesebb kifejtést bemutató kéziratok jelenleg készülnek. A szimulációk során kapott, nem publikált eredmények közül kettőt érdemes kiemelni.

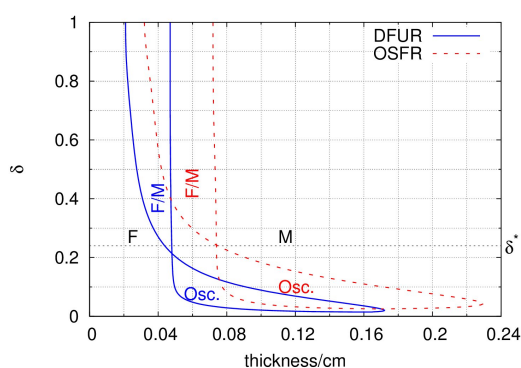


8. ábra. A Rábai modellel végzett numerikus szimulációk eredményei inhibitor mentes esetben.

Megmutattuk, hogy a Rábai modell segítségével végzett szimulációk (1-2

egyenletek) jól leírják a hidrogénionra autokatalitikus reakció-diffúzió rendszerekben megfigyelt diffúzióvezérelt instabilitásokat. Ezekben a rendszerekben a hidrogénion a többi ionhoz képest mért gyorsabb diffúziója oszcilláció és gerjeszthetőség kialakulásához vezethet kémiai inhibitor (C komponens) jelenléte nélkül is. A szimulációkban megfigyelt jelenségeket a 8. ábra mutatja be.

Teszteltük a DFUR módszer alkalmazhatóságát egy egyszerű köbös autokatalízist tartalmazó modell esetén,  $A + 2B \rightarrow 3B$ . Amennyiben az aktivátor, ami itt a B anyag, diffúziója gyorsabb mint az A komponensé, az előzőekhez hasonló módon diffúzióvezérelt instabilitás révén oszcilláció alakulhat ki. A közelítés mentes (1-2 egyenletek) és a DFUR közelítés (3-4 egyenletek) alapján kapott nemegyensúlyi fázisdiagramok meglepően jó egyezést mutatnak (9.ábra).



9. ábra. Számított fázisdiagramok közelítés mentesen (OSFR, 1-2 egyenletek) és a DFUR közelítést (3-4 egyenletek) használva. A  $\delta$  paraméter az A és B komponensek diffúziós állandóinak hányadosa. Az „F” és „M” a monostabil stacionárius állapotok, az „F/M” a bistabilitás, az „Osc.” pedig az oszcillációk tartományát jelöli.

A továbbiakban tervezzük a Rábai modell OSFR-ban kialakuló dinamikájának feltérképezését, aminek segítségével a különböző rendszerekben (FIS, TuIS, HPSF, HPSC) megfigyelt kísérletek eredményeket kívánjuk értelmezni.

**Publikációk**

1. P. De Kepper, J. Boissonade, I. Szalai: From Sustained Oscillations to Stationary Reaction-Diffusion Patterns, *Chemomechanical Instabilities in Responsive Materials* eds.: P. Borckmans; P. De Kepper; A. R. Khokhlov; S. Métens, Springer, Netherlands. ISBN 978-90-481-2992-8, 2009
2. Horváth, J.; Szalai, I.; De Kepper, P.: Pattern formation in the Thiourea-Iodate-Sulfite system: spatial bistability, waves, and stationary patterns, *Physica D*, 239, 776-784, 2010
3. Takacs N, Horvath J, Szalai I: Spatiotemporal Dynamics of Mixed Landolt Systems in Open Gel Reactors: Effect of Diffusive Feed., *Journal of Physical Chemistry A* 114:(26) pp. 7063-7069., 2010
4. J. Horváth, I. Szalai, J. Boissonade, P. De Kepper: Oscillatory dynamics induced in a responsive gel by a non-oscillatory chemical reaction: experimental evidence, *Soft Matter* 18, 8462, 2011
5. Szalai Istvan, Horvath Judit, Takacs Nandor, De Kepper Patrick: Sustained self-organizing pH patterns in hydrogen peroxide driven aqueous redox systems, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13, 20228, 2011
6. Csörgeiné Kurin Krisztina, Szalai István, Orbán Miklós: A "nemlineáris kémiai dinamikai jelenségek" kutatása az ELTE Analitikai Kémiai Tanszéken, *Magyar Kémiai Folyóirat*, 2012
7. De Kepper, P.; Szalai, I.: An effective design method to produce stationary chemical reaction-diffusion patterns, *Communications on Pure and Applied Analysis*, 11, 189-207, 2012
8. István Szalai, Daniel Cuiñas, Nándor Takács, Judit Horváth, and Patrick De Kepper: Chemical morphogenesis: recent experimental advances in reaction-diffusion system design and control, *J. R. Soc. Interface Focus* 2 417-432 2012
9. Szalai István, Kurin-Csörgei Krisztina, Orbán Miklós: Modelling pH oscillators in open, semi-batch and batch reactors, *Reaction Kinetics Mechanisms and Catalysis* 106 257-266. 2012
10. István Molnár, Nándor Takács, Krisztina Kurin-Csörgei, Miklós Orbán and István Szalai: Some general features in the autocatalytic reaction between sulfite ion and different oxidants, *International Journal of Chemical Kinetics* 45, 462-468, 2013

### **Előadások**

- E/1 „An Experimental Design Method to Produce Chemical Reaction Diffusion Patterns” International Workshop on Pattern formation in Chemical and Biological Systems Budapest (2010)
- E/2 „Pattern Formation in a Halogen Free Chemical Reaction-Diffusion System” Non-Linear Dynamics and Self-Organisation in Chemical Systems (NLDS Days) Bordeaux (meghívott előadás, 2010)
- E/3 „Mintázatképződés kémiai reakció-diffúzió rendszerekben” Ortvay Kollokvium ELTE Fizika Intézet (előadás)
- E/4 „Reakció-diffúzió mintázatok a hidrogén-peroxid - szulfition autokatalitikus reakción alapuló rendszerekben” MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága (előadás)
- E/5 „An effective design method to produce stationary chemical reaction-diffusion patterns” 21st IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC 21) Durham (meghívott előadás, 2012)
- E/6 „Modeling Reaction-Diffusion Systems in Open Gel Reactors” MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága (2012)

### **Poszterek**

- P/1 „Sustained Spatiotemporal Oscillations in Mixed Landolt Systems” Third European Science Foundation on Functional Dynamics Cascais Portugália (2009)
- P/2 „Pattern formation in halogen free reaction-diffusion systems” International Conference „Engineering of Chemical Complexity” (Berlin, July 4–8, 2011)
- P/3 „Reduced modelling of one-side-fed spatial reactors: The DFUR approximation” Oscillations & Dynamic Instabilities in Chemical Systems Gordon Research Conference Colby College Waterville, ME, USA (2012)
- P/4 „Modelling pH oscillators in open, semi-batch and batch reactors” Oscillations & Dynamic Instabilities in Chemical Systems Gordon Research Conference Colby College Waterville, ME, USA (2012)

### **Ismeretterjesztés**

- I/1 Kutatók Éjszakája bemutató és előadás (2009)

I/2 Szalai I.: „Önszerveződő kémiai mintázatok” *Élet és Tudomány*, 2010, 30, 934

I/3 Szalai I.: „Mintázatképződés” *OTKA Magazin* (2010)

I/4 „Ki festi a zebra csíkját? — Önszerveződő kémiai és biológiai mintázatok” *Alkímia Ma* ELTE Kémiai Intézet (2011)