

# **Autokatalitikus reakcióhálóok bioinspirált rendszerekben**

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**Lantos Emese**

Témavezető: **Dr. Tóth Ágota**, *egyetemi tanár*

Kémia Doktori Iskola

Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

2023



# 1. Bevezetés és az értekezés célkitűzései

A minket körülvevő világ komplex rendszerek sokasága, amelyek nem vizsgálhatók és kezelhetők részletekbe menően egyetlen tudományterület eszköztárának segítségével, hanem multidiszciplináris kutatómunkát igényelnek. Gondoljunk csak a szervezetünkben lezajló élettani folyamatokra, az állatok változatos kultakaróira, az állatpopulációk jellemző viselkedési formáira, vagy akár a világűrben végbemenő folyamatokra. Ne feledkezzünk meg az elmúlt éveket alapjaiban felforgató és megrázó Covid-19 pandémiáról és a globális felmelegedésről sem, amelyek kezeléséhez a természettudományok eszköztárához kell folyamodnunk.

A korábbi évtizedekben egyre inkább teret nyerő rendszerbiológiai kutatások teremtették meg az igényt egy új, határtudományokat ötvöző kémiai tudományterület, a *systems chemistry* létrejöttére, melyre a rendszerbiológia analógiájára rendszerkémia néven fogok utalni az elkövetkezendőkben. Ezen tudományág alapfeltevését képezi, hogy az egyedi, individuális molekulák szintjéről kilép a szupramolekuláris szintre, azaz az általa vizsgált rendszer új, megmutatózó tulajdonságait a részecskék közötti kölcsönhatásokból származtatja. Tárgykörébe sorolhatók az önrendeződés, önszerveződés, oszcillációt mutató reakciók, molekuláris gépek és reakcióhálóak is. Mindemellett említést kell tenni a nemlineáris dinamikáról is, amelynek több évtizedes eredményeire nagymértékben támaszkodik a rendszerkémia.

A munkám során vizsgált és modellezett rendszerek közös jellemvonása, hogy biológiailag relevánsak, valamint nemlineáris kémiai viselkedést – autokatalízist és/vagy oszcillációt és/vagy mintázatképződést – mutatnak. Az egyik esetben egy, a biológiában fontos szerepet betöltő enzim vizsgálatára helyeztük a hangsúlyt, míg a másik esetben egy olyan reakcióháló vizsgálatával foglalkoztunk, mely fiziológiás pH környékén mutathat oszcillációt.

Ezek alapján kezdetben egy olyan releváns modell felállítását tűztük ki célul, amelynek segítségével a hidrogenáz enzim–benzil-viologén rendszerben kísérletileg tapasztalt frontreakció sajátosságai magyarázhatóak. Ezt követően egy másik reakcióra, a Schiff-bázisok hidrolízisére helyeztük a hangsúlyt, hiszen ezen folyamat esetén már a korábbiakban is felvetődött az autokatalízis lehetősége. A kísérletek és a modellezés eredményei alapján felfedtük, hogy a vizsgált vegyületek hidrolízise autokatalízist mutat, amely nem egy adott reakcióhoz, hanem a több lépést magába foglaló reakcióhálózathoz rendelhető. A továbbiakban az elsőrendű, általános elvonó lépéssel kiegészített modellt nyílt rendszerben elemeztük, amelynek eredményeit felhasználva és kiterjesztve más reakcióra, a jövőben célzott hatóanyagleadást biztosító, vagy szenzorikai rendszerek hozhatók létre.

## 2. Kísérleti rész

A Schiff-bázisok hidrolízisét kezdetben egy üstreaktorként szolgáló főzőpohárban vizsgáltam a pH-változás nyomon követésével állandó kevertetés mellett, 10-90 V/V% etanol-víz oldószerarányánál. A mérések során megfelelő mennyiségű sósav hozzáadásával szisztematikusan módosítottam a kiindulási pH-t, amely elvonta a reakció autokatalizátoraként szolgáló hidroxidionokat és lehetővé tette az autokatalízis erősségének meghatározását. A későbbiekben más etanol-víz oldószerarányánál is vizsgáltam az autokatalízist. Ezt követően a hidrolízist nyílt rendszerben is monitoroztam, melyhez egy poli(metil-metakrilát)-ból készült folytonosan kevert tankreaktort alkalmaztam.

## 3. Modellezés

A modellezés során a különböző típusú differenciálegyenletek megoldásához más-más szoftvereket, szoftvercsomagokat alkalmaztunk. Jól kevert reaktorokban a

$$\frac{dc_i}{dt} = f(c_i) + k_0(c_{i,0} - c_i) \quad (1)$$

formulával írhatók le a közönséges differenciálegyenletek, ahol  $f(c_i)$  a kinetikai tag,  $k_0(c_{i,0} - c_i)$  az áramlásból származó tag,  $c_{i,0}$  az  $i$ -edik komponens betáplálási,  $c_i$  pedig a reaktorbeli koncentrációja. Ezek megoldását *CVODE*-ban és az ezen megoldóra épülő *XPPAUT* programcsomagban végeztem el. Az iminhidrolízis modellezéséhez szükséges sebességi együtthatókat és egyensúlyi állandókat az egyes komponensekre felírt közönséges differenciálegyenletek segítségével, a kísérleti görbékre történő illesztéssel határoztam meg *Copasi* programban, melyhez Levenberg-Marquardt módszerét alkalmaztam. A bifurkáció és az oszcilláció feltérképezése és jellemzése az *XPPAUT* programcsomag beépített szoftverével, az *AUTO*-val történt.

A tér- és időbeli mintázatot adó rendszer viselkedése az alábbi parciális differenciálegyenlettel írható le:

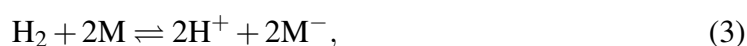
$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + f(c_i), \quad (2)$$

amennyiben a diffúzió az egyetlen transzportfolyamat. Ennek megfelelően, a fenti összefüggés első tagja a diffúziót, míg második tagja a kinetikát írja le. A  $D_i$  az  $i$ -edik komponenshez rendelhető diffúziós együttható, az  $x$  pedig a térbeli koordináta. A dimenziómentesített parciális differenciálegyenleteket egy térbeli dimenzióban, diszkretizálás után a *SUNDIALS* programcsomaghoz tartozó *CVODE*-ban, BDF-integrálórutint alkalmazva oldottam meg.

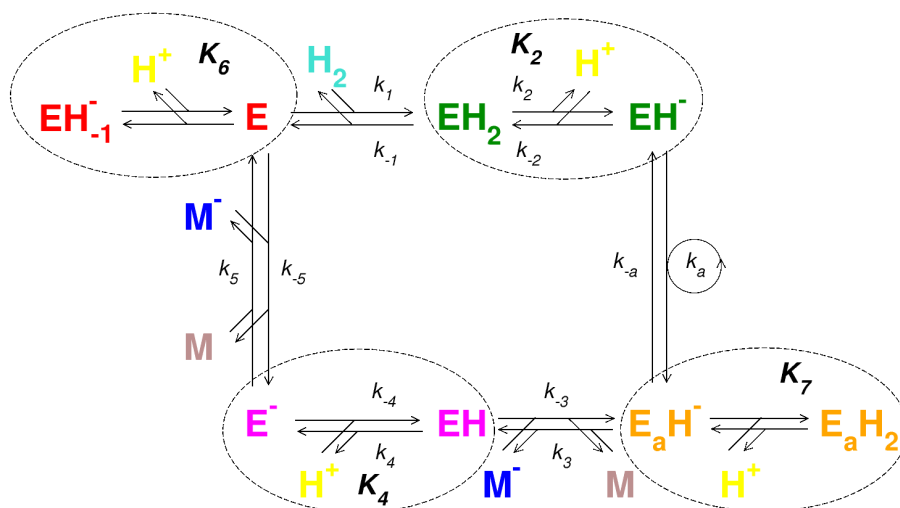
## 4. Új tudományos eredmények

I. A hidrogenáz–benzil-viologén frontképződéssel járó reakcióra megalkotott modell felhasználásával kimutattuk, hogy különböző teljes elektronakceptor- és teljes enzimkoncentráció arányoknál ( $R=M_T/E_T$ ) két eltérő reakciófront alakulhat ki az autokatalitikus lépés és az elektronakceptor-redukció tér- és időbeli szeparációjától függően [3].

A kísérletek során a hidrogenáz enzimhez anaerob körülmények között elektronakceptor molekulát, jelen esetben benzil-viologént adva megfigyelték, hogy spontán reakciófront indult el, amelynek vizuális nyomon követését az elektronakceptor redukált formájának lila színe tette lehetővé. A *Thiocapsa roseopersicinából* kivont *HynSL* enzim által katalizált reakció a következő egyenlettel írható le:

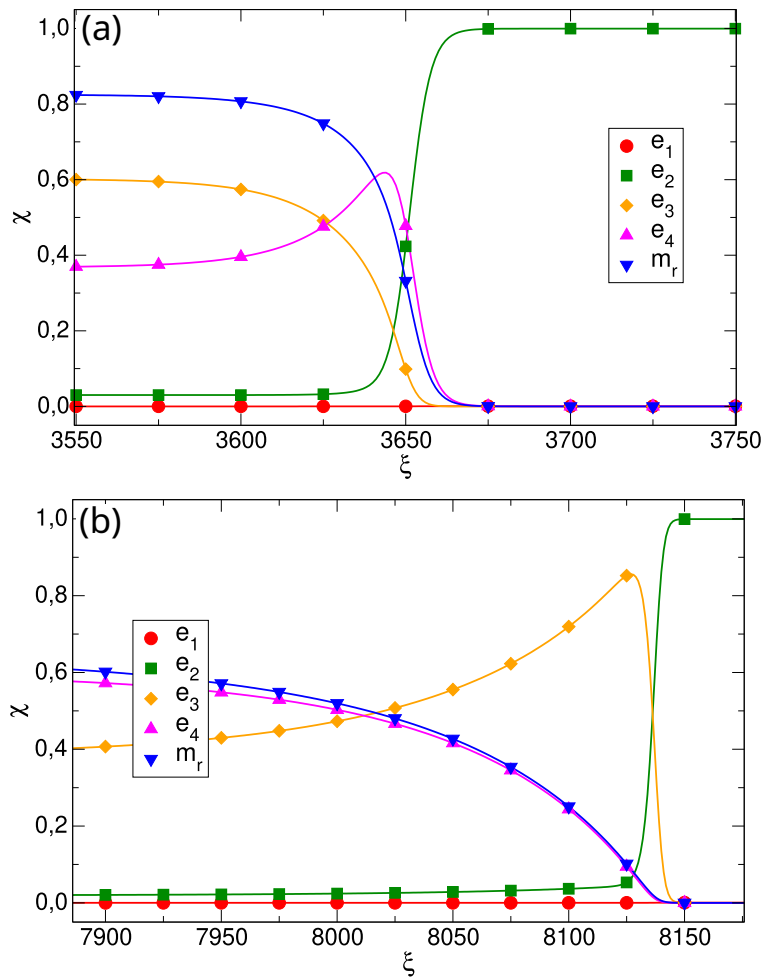


ahol elektronakceptorként az M-mel jelölt benzil-viologén szolgál. A hidrogenáz–benzil-viologén reakciót leíró, általunk alkalmazott modellt az 1. ábra szemlélteti.



1. ábra. A hidrogenáz enzimreakció sematikus modellje benzil-viologén jelenlétében.  $E$  a szabad enzim,  $\text{EH}^-_1$  ennek deprotonált variánsa,  $\text{EH}_2$  a teljesen redukált enzim,  $\text{EH}^-$  ennek deprotonált formája,  $\text{E}_a\text{H}^-$  az autokatalitikus enzimkonformer,  $\text{E}_a\text{H}_2$  ennek protonált formája,  $\text{EH}$  a részlegesen redukált enzim,  $\text{E}^-$  ennek deprotonált formája,  $M$  az elektronakceptor, míg  $M^-$  az elektronakceptor deprotonált formája.

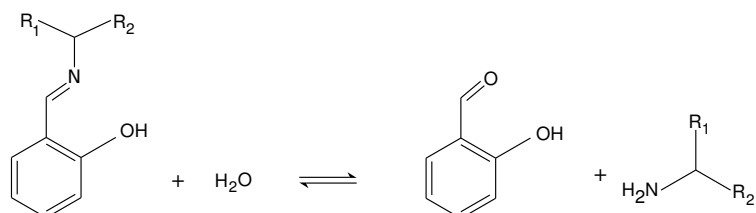
A modellezés során bevezetésre került az  $R$ -rel jelölt viszonyszám, amely a teljes elektronakceptor- és enzimkoncentráció aránya. Ha az elektronakceptor nagy feleslegben van jelen (2. (a) ábra), a kirajzolódó reakció-diffúzó front élesnek mutatkozik, az autokatalízis, valamint a redukció is egy időben megy végbe. Ezzel szemben, ha a benzil-viologén koncentrációját csökkentjük (2. (b) ábra), akkor a redukciós lépés sokkal lassabb, mely a front diffúz megjelenését és az autokatalízis térbeli szeparációját eredményezi.



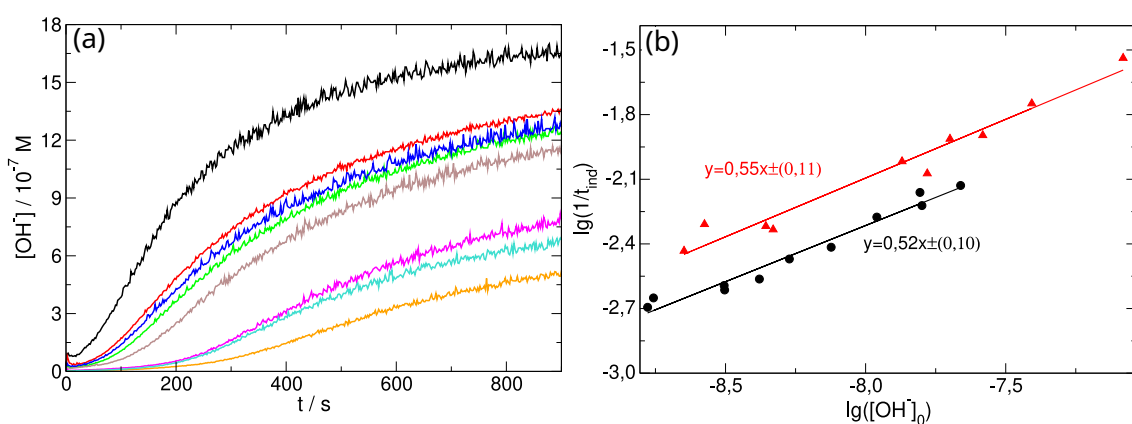
2. ábra. Az  $R = 3,5 \cdot 10^5$  (a) és  $R = 2,5 \cdot 10^3$  (b) arányánál kapott frontprofilok. Dimenziómentes  $\bullet$ : szabad enzimm koncentráció ( $e_1$ );  $\blacksquare$ : teljesen redukált enzimm koncentráció ( $e_2$ );  $\blacklozenge$ : autokatalitikus konformer koncentráció ( $e_3$ );  $\blacktriangle$ : részlegesen oxidált enzimm koncentráció ( $e_4$ );  $\blacktriangledown$ : redukált elektronakceptor-koncentráció ( $m_r$ ).

II. Az általunk vizsgált Schiff-bázisok hidrolízise autokatalitikus és az empirikus sebességi egyenletben az autokatalizátor koncentrációjának  $n$  hatványkitevője mindkét esetben 0,5 körüli érték, amely parabolikus autokatalízisnek felel meg [2].

A hidrolízis során időben előre haladva rögzítettük a pH változását két, „A”-val és „B”-vel jelölt imin esetében, amelynek eredményeként egy megfelelő aldehid és amin képződött (3. ábra).



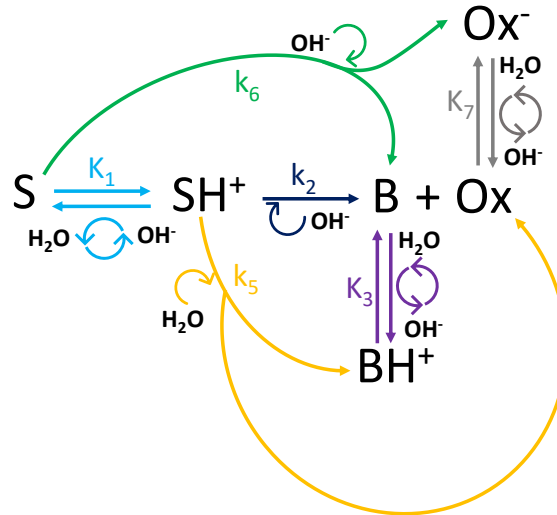
3. ábra. Az iminhidrolízis bruttó reakciója. „A” imin:  $R_1$ : -H és  $R_2$ : -CH<sub>2</sub>OH; „B” imin:  $R_1$ : -CH<sub>3</sub> és  $R_2$ : -CH<sub>3</sub>.



4. ábra. (a): Különböző kiindulási pH-ról indított reakció során mért hidroxidion-koncentráció az idő függvényében az „A” imin esetében. (b): A különböző kiindulási pH-ról indított reakciókhoz tartozó indukciós idők reciprokának logaritmusai a kiindulási hidroxidion-koncentráció logaritmusának függvényében az „A” (▲) és a „B” (●) imin esetében.

A kísérletek során különböző kiindulási pH-ról indítottuk a reakciót (4. ábra (a)), amelyet sósav hozzáadásával állítottunk be. Látható, hogy minél kisebb a kiindulási pH, annál nagyobb a reakció indukciós ideje, ami a reakciósebességgel fordítottan arányos mennyiség. Ennek oka, hogy sav hozzáadásával elvonható a reakció autokatalizátora, azaz a hidroxidion. Az indukciós időt a szigmoid görbék inflexiós pontját határoló, két különböző meredekségű egyenes metszéspontjából határoztuk meg. Az indukciós idők reciprokának logaritmusát ábrázolva a kiindulási hidroxidion-koncentráció logaritmusának függvényében, a kapott pontokra illesztett egyenes meredeksége szolgáltatja az autokatalízis típusát meghatározó hatványkitevőt mindkét vizsgált Schiff-bázis esetében (4. ábra (b)).

III. A kísérleti adatokat felhasználva a Schiff-bázisok hidroxidionokra nézve autokatalitikus hidrolízisére megalkottunk egy modellt, amely abban az esetben válik érvényessé, ha a folyamat során képződő amin erősebb bázis mint az imin, valamint megjelenik a hidroxidion-függő lépés is [2].



5. ábra. Az iminhidrolízis sematikus modellje. S: Schiff-bázis; SH<sup>+</sup>: Schiff-bázis protonált formája; B: amin; BH<sup>+</sup>: amin protonált formája, Ox: aldehid, Ox<sup>-</sup>: fenolát.

Megállapítottuk, hogy a Schiff-bázisok hidrolízise során akkor valósul meg autokatalízis a hidroxidionokra nézve, ha azok koncentrációjának időbeli változása pozitív, azaz ez a részecske termékként jelenik meg. Ezen megfigyelésünket támasztják alá a modellből (5. ábra) származó, alábbi összefüggések is:

$$\frac{dS_T}{dt} = -S_T \frac{K_1 k_5 + K_1 k_2 [\text{OH}^-] + k_6 ([\text{OH}^-])^2}{K_1 + [\text{OH}^-]} \quad (4)$$

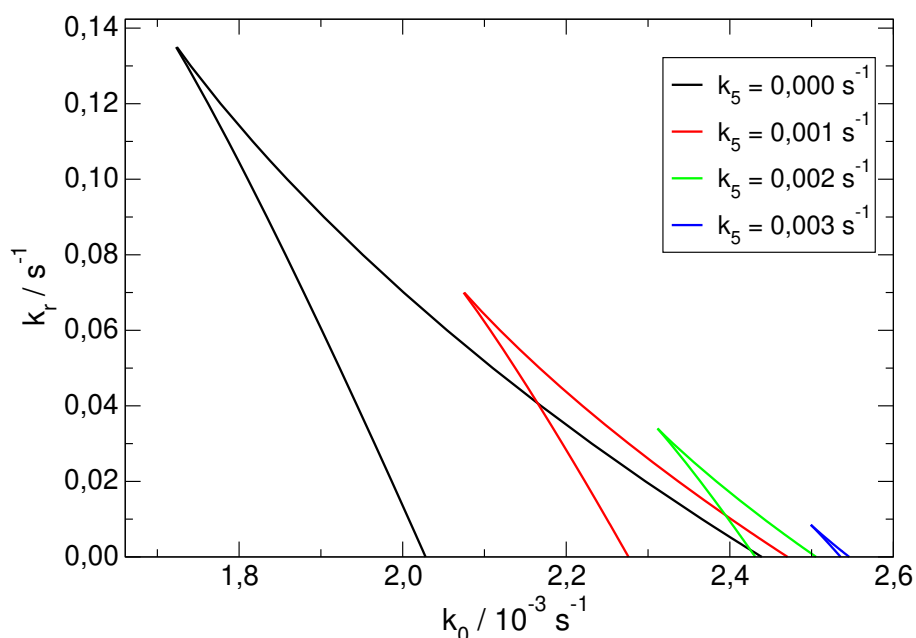
$$\frac{d[\text{OH}^-]}{dt} = \frac{\left( \frac{(K_1 - K_3)[\text{OH}^-]}{(K_1 + [\text{OH}^-])(K_3 + [\text{OH}^-])} + \frac{[\text{OH}^-]}{K_7 + [\text{OH}^-]} \right) \frac{dS_T}{dt}}{1 + \frac{K_1 S_T}{(K_1 + [\text{OH}^-])^2} + \frac{K_3 B_T}{(K_3 + [\text{OH}^-])^2} + \frac{K_w}{([\text{OH}^-])^2} + \frac{K_7 \text{Ox}_T}{(K_7 + [\text{OH}^-])^2}} \quad (5)$$

Ha a  $K_3$ , azaz az amin disszociációs állandója nagyobb, mint a  $K_1$ , vagyis az imin disszociációs állandója, akkor a  $\frac{d[\text{OH}^-]}{dt}$  hányados is pozitív, hiszen a  $\frac{dS_T}{dt}$  minden esetben negatív. A hidroxidion-függő lépés ( $k_6$ ) csak abban az esetben valósul meg, ha a hidroxidionok nukleofil támadást képesek végrehajtani a Schiff-bázissal szemben, melyet az intramolekuláris hidrogénhíd biztosít.



IV. Az autokatalízist mutató Schiff-bázisok esetében nyílt rendszerben bistabilitás lehetséges, és annak megjelenése, valamint kiterjedése a nemkatalizált ( $k_5$ ) és az elvonó lépés ( $k_r$ ) nagyságától függ [1].

Nyílt rendszerben végzett számolásokkal kimutattuk, hogy a Schiff-bázisok hidrolízise során a bistabilitás megjelenése, valamint a bistabil tartomány kiterjedése a nemkatalizált lépés sebességi együtthatójának ( $k_5$ ), valamint az elvonó lépés sebességi együtthatójának ( $k_r$ ) értékétől függ, melyet a 6. ábra szemléltet. Ha ábrázoljuk a nyeregcsomó bifurkációs pontokhoz tartozó elvonó lépés sebességi együtthatóját ( $k_r$ ) a megfelelő térsebesség ( $k_0$ ) függvényében, akkor kirajzolódik a folytonos vonallal határolt terület, azaz a bistabil tartomány. Minél nagyobb a nemkatalizált reakció hozzájárulása, annál kisebb a tartomány kiterjedése, valamint minél erősebb az elvonó lépés, annál kisebb a megengedett nemkatalizált reakció hozzájárulása a rendszerben.

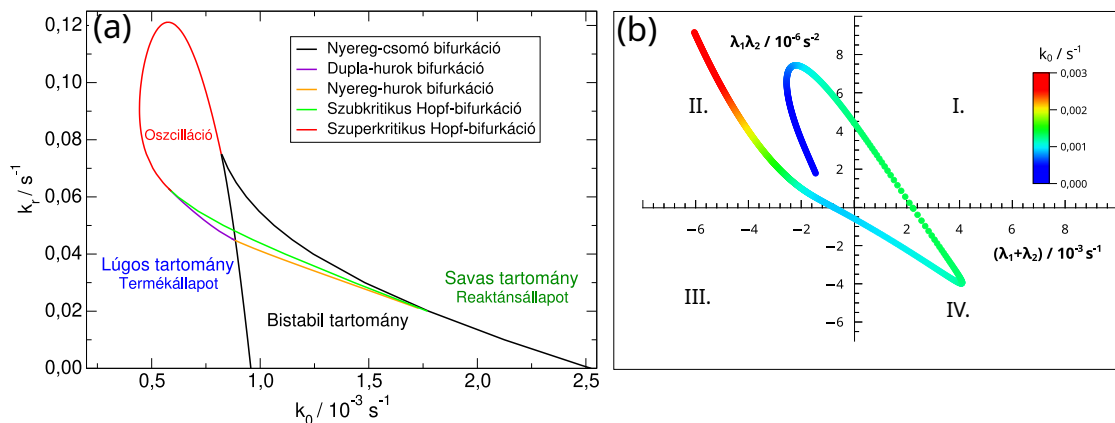


6. ábra. Az elvonó lépés sebességi együtthatója ( $k_r$ ) a térsebesség ( $k_0$ ) függvényében különböző erősségű nemkatalizált reakciósebességi együttható ( $k_5$ ) mellett.

V. Az iminhidrolízisen alapuló reakcióháló változatos dinamikáját a lineáris stabilitáselemzéssel kapott két legnagyobb sajátérték szabályozza és a bistabilitás, valamint oszcilláció tartományai az elvonó lépés ( $k_r$ ) – térsebesség ( $k_0$ ) paramétersíkjában  $X$ -diagramot alkotnak [1].

Az iminhidrolízis-alapú reakcióháló összetettsége komplex dinamikát eredményez, amely jól szemléltethető az elvonó lépés sebességi együtthatója ( $k_r$ ) vs. térsebesség ( $k_0$ ) alkotó fázisdiagramon. Az összetett dinamikából származó bistabilitás, valamint oszcilláció tartományai  $X$ -diagramot alkotnak a  $k_r - k_0$  fázissíkon, melyet kiegészítve a különböző típusú bifurkációkkal – szubkritikus/szuperkritikus Hopf-, nyereg-csomó, dupla-hurok és nyereg-hurok bifurkációk – a 7. (a) ábra illusztrál.

A reakcióháló dinamikáját a Jakobi-mátrix stabilitáselemzéssel kapott, két legnagyobb sajátértéke határozza meg, hiszen az összes többi a teljes paramétertartományban negatív értéket vesz fel. Ebből adódóan a reakcióháló a kétváltozós rendszerrel analóg módon kezelhető: az  $x$ -tengelyen ábrázolható a két sajátérték összege, míg az  $y$ -tengelyen azok szorzata (7. (b) ábra). Előbbi a kétváltozós rendszerhez rendelhető Jakobi-mátrix spurjának, utóbbi pedig determinánsának feleltethető meg.

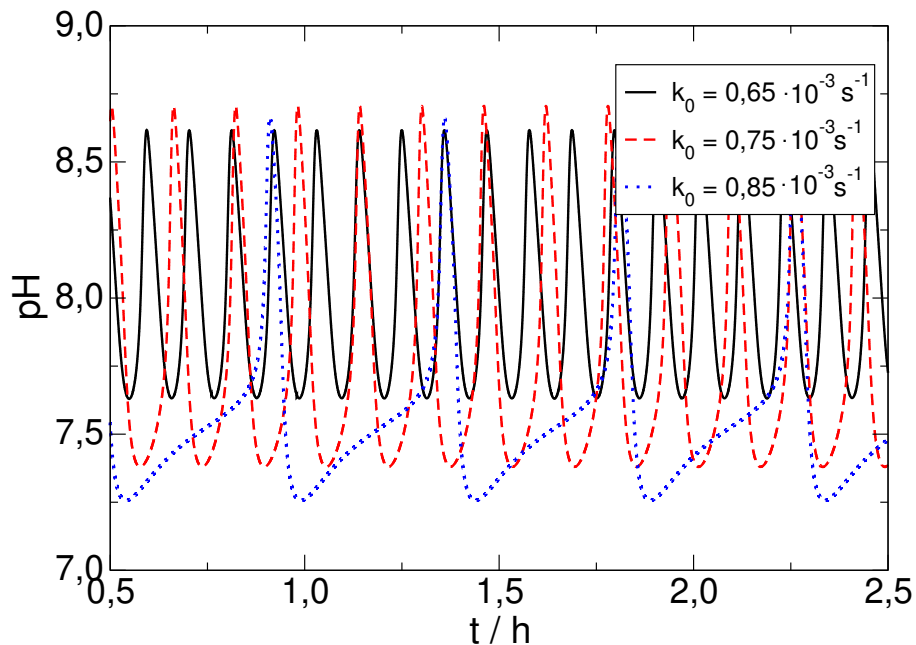


7. ábra. A bistabil és az oszcillációs tartomány által alkotott  $X$ -diagram a  $k_r - k_0$  paramétersíkban kiegészítve a különböző típusú bifurkációkkal (a). A reakcióháló dinamikáját befolyásoló, Jakobi-mátrix két sajátértékének kétváltozós rendszerrel analóg reprezentálása a megfelelő  $k_0$  értékekkel.

A 7. (b) ábrán az ábrázolt görbe és az  $x$ -tengely metszéspontja szolgáltatja a nyereg-csomó bifurkációt, míg a görbe és az  $y$ -tengely metszéspontjában mutatkozik meg a Hopf-bifurkáció. A térsebesség csökkenésével, azaz a pirostól a kék jelölők irányába haladva, a II. síknegyedben stabil fókusz/csomópontok, a III. és IV. síknegyedben nyeregpontok, míg az I. síknegyedben instabil csomó/fókuszpontok mutatkoznak meg a reakcióhálóban.

VI. Az iminhidrolízisen alapuló reakcióháló megfelelő paraméterbázis mellett oszcillációt mutat, amelynek amplitúdóját és periódusidejét a térsebesség ( $k_0$ ), a nemkatalizált lépés sebességi együtthatója ( $k_5$ ), az elvonó lépés erőssége ( $k_r$ ) és a Schiff-bázis protonálódási állandója ( $K_1$ ) befolyásolja [1].

Abban az esetben, ha növeljük a Schiff bázis protonálódási állandóját ( $K_1$ ), az oszcillációs tartomány a kisebb térsebesség ( $k_0$ ) értékek irányába tolódik el, ezzel szemben a nemkatalizált reakció sebességi együtthatójának ( $k_5$ ) növelése a nagyobb  $k_0$  felé tolja a már említett tartományt. Az amplitúdó minden esetben 0,2-2 pH-egység közötti. Az elvonó lépés erősségének növelése mellett mindig csökken az amplitúdó értéke. A periódusidő általában órákban mérhető, és az elvonó lépés hozzájárulásának növelésével a periódusidő nő. A térsebesség amplitúdóra és periódusidőre kifejtett hatását a 8. ábra szemlélteti, mely alapján elmondható, hogy a  $k_0$  növelése ezen tartományon belül háromszorosára növeli a periódusidőt, ám ezzel szemben az amplitúdót nem befolyásolja számottevően.



8. ábra. A térsebesség ( $k_0$ ) hatása az oszcilláció amplitúdójára és periódusidejére.

## 5. Publikációs lista

### 5.1. Az értekezés témakörében megjelent közlemények

1. **E. Lantos**, Á. Tóth, D. Horváth  
*Oscillatory dynamics in a reaction network based on imine hydrolysis*  
Chaos, **33**, 103104 (2023)  
<https://doi.org/10.1063/5.0169860>  
IF<sub>2022</sub> = 2,9 (Q1)
2. **E. Lantos**, G. Mótyán, É. Frank, R. Eelkema, J. van Esch, D. Horváth, Á. Tóth  
*Dynamics of hydroxide-ion-driven reversible autocatalytic networks*  
RSC Adv., **13**, 20243-20247 (2023)  
<https://doi.org/10.1039/D3RA04215D>  
IF<sub>2022</sub> = 3,9 (Q2)
3. L. Gyevi-Nagy **E. Lantos**, T. Gehér-Herczegh, Á. Tóth, Cs. Bagyinka, D. Horváth  
*Reaction fronts of the autocatalytic hydrogenase reaction*  
J. Chem. Phys., **148**, 165103 (2018)  
<https://doi.org/10.1063/1.5022359>  
IF<sub>2018</sub> = 2,997 (Q1)  
 $\Sigma$ IF = 9,797

### 5.2. Az értekezés témaköréhez nem kapcsolódó közlemények

1. R. Zahorán, P. Kumar, Á. Deák, **E. Lantos**, D. Horváth, Á. Tóth  
*From balloon to crystalline structure in the calcium phosphate flow-driven chemical garden*  
Langmuir, **39**, 5078-5083 (2023)  
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c00079>  
IF<sub>2022</sub> = 3,9 (Q1)
2. M. Emmanuel, **E. Lantos**, D. Horváth, Á. Tóth  
*Formation and growth of lithium phosphate chemical gardens*  
Soft Matter, **18**, 1731-1736 (2022)  
<https://doi.org/10.1039/D1SM01808F>  
IF<sub>2022</sub> = 3,4 (Q1)

3. **Á. Tóth**, G. Schuszter, N. P. Das, **E. Lantos**, D. Horváth, A. De Wit, F. Brau  
*Effects of radial injection and solution thickness on the dynamics of confined A plus B -> C chemical fronts*  
Phys. Chem. Chem. Phys., **22**, 10278-10285 (2020)  
<https://doi.org/10.1039/C9CP06370F>  
IF<sub>2020</sub> = 3,676 (Q1)
  4. **E. Lantos**, L. Mérai, Á. Deák, J. Gómez-Pérez, D. Sebők, I. Dékány, Z. Kónya, L. Janovák  
*Preparation of sulfur hydrophobized plasmonic photocatalyst towards durable superhydrophobic coating material*  
J. Mater. Sci. Technol., **41**, 159-167 (2020)  
<https://doi.org/10.1016/j.jmst.2019.04.046>  
IF<sub>2020</sub> = 8,067 (D1)
  5. **E. Lantos**, N. P. Das, D. S. Berkesi, D. Dobó, Á. Kukovecz, D. Horváth, Á. Tóth  
*Interaction between amino-functionalized inorganic nanoshells and acid-autocatalytic reactions*  
Phys. Chem. Chem. Phys., **20**, 13365-13369 (2018)  
<https://doi.org/10.1039/c8cp01053f>  
IF<sub>2018</sub> = 3,567 (Q1)
- $\Sigma$ IF = 22,61

## 6. Előadások

### 6.1. Az értekezés témaköréhez kapcsolódó előadások

1. **Lantos Emese**, Horváth Dezső, Tóth Ágota  
*Autokatalitikus reakcióhálóok bioinspirált rendszerekben*  
PhD-dolgozat bemutatása, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés, 2023. június 8-9, Balatonvilágos, Magyarország
2. **Lantos Emese**, Horváth Dezső, Tóth Ágota  
*Imin hidrolízisen alapuló pH-oszcillátor modellezése*  
MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés, 2022. október 27-28, Balatonvilágos, Magyarország (online)

3. **Emese Lantos**, Ágota Tóth, Dezső Horváth  
*Oscillations and bistability in the autocatalytic reaction network of imine hydrolysis*  
Dynamics Days Europe, 2022. augusztus 22-26, Aberdeen, Skócia
4. **Lantos Emese**, Horváth Dezső, Tóth Ágota  
*Hidroxidion-vezérelt autokatalitikus reakcióháló modellezése*  
SZTE TTIK FKAT Tanszéki szeminárium, 2022. május 17., Szeged, Magyarország
5. **Emese Lantos**, Dezső Horváth, Ágota Tóth  
*Dynamics of Hydroxide-Ion-driven Reversible Autocatalytic Networks*  
15th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 2021. szeptember 20-24, Belgrád, Szerbia (online)
6. **Lantos Emese**, Horváth Dezső, Tóth Ágota  
*Hidroxidion-vezérelt autokatalitikus reakcióháló tervezése*  
SZAB Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Munkabizottság ülése, 2021. június 8., Szeged, Magyarország (online)
7. **Emese Lantos**, Dezső Horváth, Ágota Tóth  
*Dynamics of Hydroxide-Ion-driven Reversible Autocatalytic Networks*  
Chemical Systems Meeting, 2021. március 22-23, (online)
8. **Lantos Emese**, Horváth Dezső, Tóth Ágota  
*Iminalapú oszcillátor tervezése: iminek autokatalitikus hidrolízise*  
XLII. Kémiai Előadói Napok, 2019. október 28-30, Szeged, Magyarország
9. **Lantos Emese**, Horváth Dezső, Tóth Ágota  
*Organikus oszcillátor tervezése*  
MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés, 2019. május 23-24, Balatonalmádi, Magyarország
10. **Lantos Emese**, Tóth Ágota, Horváth Dezső  
*Iminek autokatalitikus hidrolízise*  
XLI. Kémiai Előadói Napok, 2018. október 15-17, Szeged, Magyarország
11. Dezső Horváth, László Gyevi-Nagy, **Emese Lantos**, Ágota Tóth  
*Reaction-diffusion fronts driven by the autocatalytic hydrogenase reaction*  
14th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 2018. szeptember 24-28, Belgrád, Szerbia

12. Gyevi-Nagy László, **Lantos Emese**, Tóth Ágota, Horváth Dezső  
*A hidrogenáz frontreakció modellezése*  
MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság ülés, 2016. november 3-4, Mátraháza, Magyarország
13. Gyevi-Nagy László, **Lantos Emese**, Tóth Ágota, Horváth Dezső  
*A hidrogenáz frontreakció modellezése*  
XXIX. Kémiai Előadói Napok, 2016. október 17-19, Szeged, Magyarország
14. Tünde Gehér-Herczegh, **Emese Lantos**, Csaba Bagyinka, Ágota Tóth, Dezső Horváth  
*Spatio-temporal pattern formation in an autocatalytic hydrogenase reaction*  
Conference SysChem 2016, CMST COST Action, 2016. május 5-12, Valtice, Csehország
15. Tünde Herczegh, **Emese Lantos**, Csaba Bagyinka, Ágota Tóth, Dezső Horváth  
*Spatio-temporal pattern formation in an autocatalytic hydrogenase reaction*  
Beyond Self Assembly Workshop, 2016. január 21-24, Bad Gastein, Ausztria

## 6.2. Az értekezés témaköréhez nem kapcsolódó előadások

1. Tóth Ágota, Schuszter Gábor, Nirmali Prabha Das, **Lantos Emese**, Horváth Dezső, Ann De Wit, Fabian Brau  
*Radiálisan terjedő kémiai frontok dinamikája*  
MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság ülés, 2019. november 7-8, Mátrafürdő, Magyarország
2. **Lantos Emese**, Nirmali Prabha Das, Tóth Ágota, Horváth Dezső  
*Autokatalitikus kémiai reakció és szervesetlen nanogömbök kölcsönhatása*  
XL. Kémiai Előadói Napok, 2017. október 16-18, Szeged, Magyarország

## 7. Poszter prezentáció

### 7.1. Az értekezés témaköréhez kapcsolódó poszter prezentáció

1. **Emese Lantos**, Stevan Macesic, Ágota Tóth, Dezső Horváth  
*Spatiotemporal dynamics of autocatalytic reversible reaction networks*  
GRC Systems Chemistry, 2022. június 26 - július 1, Newry, USA

2. **Emese Lantos**, Dezső Horváth, Ágota Tóth

*Spatiotemporal patterns in the autocatalytic hydrogenase reaction*

Systems Chemistry Virtual Symposium, 2021. július 7-9, online

## **7.2. Az értekezés témaköréhez nem kapcsolódó poszter prezentáció**

1. Nirmali Prabha Das, **Emese Lantos**, Dezső Horváth, Ágota Tóth

*Coupling of self-assembly and self-organization of different length scales*

GRC on Systems Chemistry, 2018. július 29 - augusztus 3, Newry, USA

2. Nirmali Prabha Das, **Emese Lantos**, Dezső Horváth, Ágota Tóth

*Coupling of self-assembly and self-organization of different length scales*

GRC on Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, 2018. július 8-13,  
Les Diablerets, Svájc

MTMT azonosító: 10069335