

Csapadékképződési folyamatok modellezése

Doktori (Ph.D.) értekezés tézisei

Papp Paszkál

Témavezető: **Dr. Horváth Dezső**, *egyetemi tanár*

Kémia Doktori Iskola

Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

2024

1. Bevezetés és az értekezés célkitűzései

A csapadékképződés mind az ipari folyamatokban, mind a természetben számos helyen előforduló jelenség. Habár gyógyszeripari termékeket, katalizátorokat és más festékipari alapanyagokat gyártanak csapadékképződéssel, a kristályok képződése és növekedése nem mindig kívánatos, pl. a vízkőképződés és a vesekő kialakulása esetén. Annak érdekében, hogy a csapadékképződést jobban tudjuk szabályozni, ezáltal pl. ipari folyamatokban a hozam vagy a selektivitás javítását érjük el vagy éppen a káros folyamatok esetén a góccok kialakulását gátoljuk, elengedhetetlen ezen jelenség mélyrehatóbb tanulmányozása.

Manapság a kísérleti tanulmányok mellett a megnövekedett számítógépes kapacitásnak köszönhetően, egyre komplexebb elméleti kutatásokkal is tanulmányozhatók ezen reaktív heterogén rendszerek. A folyamatok modellezése még mindig számos kihívást rejteget, mivel a modern szuperszámítógépek gyorsasága sem végtelen. A csapadékot kezelhetjük egy túltelítés hatására létrejövő koncentrációmezőként, leírhatjuk a szemcsék méretét és számát egy sűrűségfüggvénnyel, vagy modellezhetjük az egyedi részecskék növekedését és mozgását is. A kutatók feladata az, hogy megtalálják az adott rendszerben a csapadékképződést legjobban leíró egyenleteket és kezelési módot.

Munkám során egy eszköztár kifejlesztését tűztem ki célul, amellyel különböző rendszerekben a csapadékképződés leírható. Jól kevert, reakció-diffúzió és áramlásvezérelt rendszerekben modelleztem a szilárd fázis képződését, valamint a csapadékszemcsék növekedését. Továbbá a kifejlesztett eszköztár segítségével a kísérletek elméleti hátterének igazolását, fizikai-kémiai jelenségek magyarázatát és kísérletileg nehezen meghatározható adatok számítását tűztem ki célul.

Célom volt egy jól kevert rendszerben a szilárd részecskék méreteloszlásának dinamikáját meghatározni, melyhez a populáció-mérleg modellt alkalmaztam. Ez az elmélet olyan rendszerek esetén alkalmazható, ahol nagy számú részecske van jelen. Ekkor a méreteloszlások alakulása egy sűrűségfüggvény időbeli változásával adható meg. Továbbá célom volt, egy reakció-diffúzió vezérelt rendszerben létrejövő Liesegang csapadékmintázatot vizsgálni, mely esetén modellezéssel tanulmányoztuk, hogy miként hat a reaktánsok diffúziója a kialakuló csapadékmintázatokra. Ezenkívül célul tűztem ki áramlásvezérelt rendszerekben történő csapadékképződés esetén az individuális részecskék képződésének, növekedésének és mozgásának elméleti leírását. Az elkészített modellel egy mikrofluidikai reaktorban lejátszódó kalcium-oxalát csapadék képződését, valamint az egymáshoz közeli oldhatóságú fémsók áramlásvezérelt rendszerben történő leválását vizsgáltam.

2. Modellezés

Kémiai számítások esetén a rendszerben lévő komponensek koncentrációinak idő és/vagy térbeli eloszlásainak meghatározása a cél, melyhez a koncentráció időbeli változását leíró komponensmérleg-egyenletet kell megoldani

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_{r=1}^R \omega_{i,r} k_r \prod_{j=1}^N c_j^{m_{r,j}} + D_i \nabla^2 c_i - \vec{u} \nabla c_i, \quad (1)$$

ahol D_i az i -edik komponens diffúziós állandója, \vec{u} a sebességvektor, k_r az r -edik reakció sebességi együtthatója, $\omega_{i,r}$ a sztöchiometriai együttható és $m_{r,j}$ a részrend. A rendszer tulajdonságától függően a komponensmérleg különböző alakjait szükséges megoldani. Egy jól kevert rendszerben a koncentráció időbeli változása csak a lejátszódó reakciók kinetikájától függ, így csak az első, kinetikai tag található meg benne. Abban az esetben ha a koncentrációeloszlás homogénnek tekinthető, a komponensmérleg-egyenlet nem függ a tértől és egy nulla dimenziós problémáról beszélhetünk, viszont ha inhomogén úgy megjelenik az (1) egyenletben a második, diffúziós tag is. Áramlásvezérelt rendszerek esetén a közegmozgás hatását is figyelembe kell venni, ami a harmadik, konvektív taggal írható le. Mivel a konvektív tagban szerepel a sebességvektor-mező, ennek ismerete szükséges, amit Navier–Stokes-egyenlet segítségével tudjuk kiszámolni

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \nu \nabla^2 \vec{u} - \frac{1}{\rho_0} \nabla p + \frac{\rho}{\rho_0} \vec{g}, \quad (2)$$

ahol ν a kinematikai viszkozitás, p a nyomás, \vec{g} a gravitációs gyorsulás, míg ρ a sűrűség. Mivel még izoterm körülmények között is függ az oldatok sűrűsége a koncentrációtól, a sűrűség meghatározására a Boussinesq-közelítést alkalmazzuk

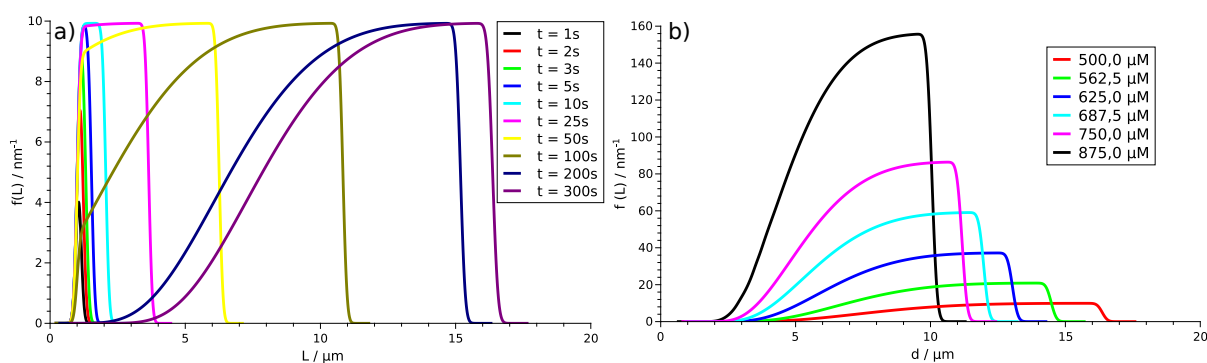
$$\rho = \rho_0 + \sum_i \rho_i c_i, \quad (3)$$

ahol ρ_0 az oldószer sűrűsége és $\rho_i = \partial \rho / \partial c_i$. A modellezés során a jól kevert és reakció-diffúzió kontrollált rendszerek esetén a SUNDIALS programcsomag CVODE integráló motorját használtuk a komponensmérleg-egyenlet megoldására. Az áramlásvezérelt rendszerek esetén a Navier–Stokes-egyenletet az OpenFoam nyílt forráskódú programcsomagjának segítségével oldottuk meg.

3. Új tudományos eredmények

I. *Létrehoztunk egy kísérletileg meghatározott koncentráció–idő függést felhasználó, jól kevert rendszerben részecskeméret-eloszlás meghatározására alkalmas modellt [1].*

A részecskeméret számításához egy csapadékkoncentrációval arányos mért jel időbeli változását kell meghatározni. Kalcium-oxalát csapadékképződése során mért turbiditás görbéket használtuk fel, melyeket kutatócsoportunkban korábban különböző kezdeti reaktáns koncentrációknál határoztak meg. Feltételezve, hogy egy, a Lambert-Beer törvénnyel analóg összefüggés áll fenn, a mért turbiditások koncentrációvá alakíthatók. Az így kapott görbékre a klasszikus nukleációs elmélettel csatolt populáció-mérleg modellt illesztve meghatározható a részecskék növekedésének dinamikája, a részecskeméret-eloszlás, valamint a specifikus felületi energia (1. ábra). A kapott eredmények pásztázó elektronmikroszkópos felvételtől meghatározott részecskemérettel és irodalmi specifikus felületi energia értékkel kerültek összehasonlításra, melyek jó egyezést mutattak. Az elkészült modell általánosítható, így más csapadékképződési folyamatok és kísérleti paraméterek esetén is meghatározhatóak a részecskeméret-eloszlások és azok időbeli változása.

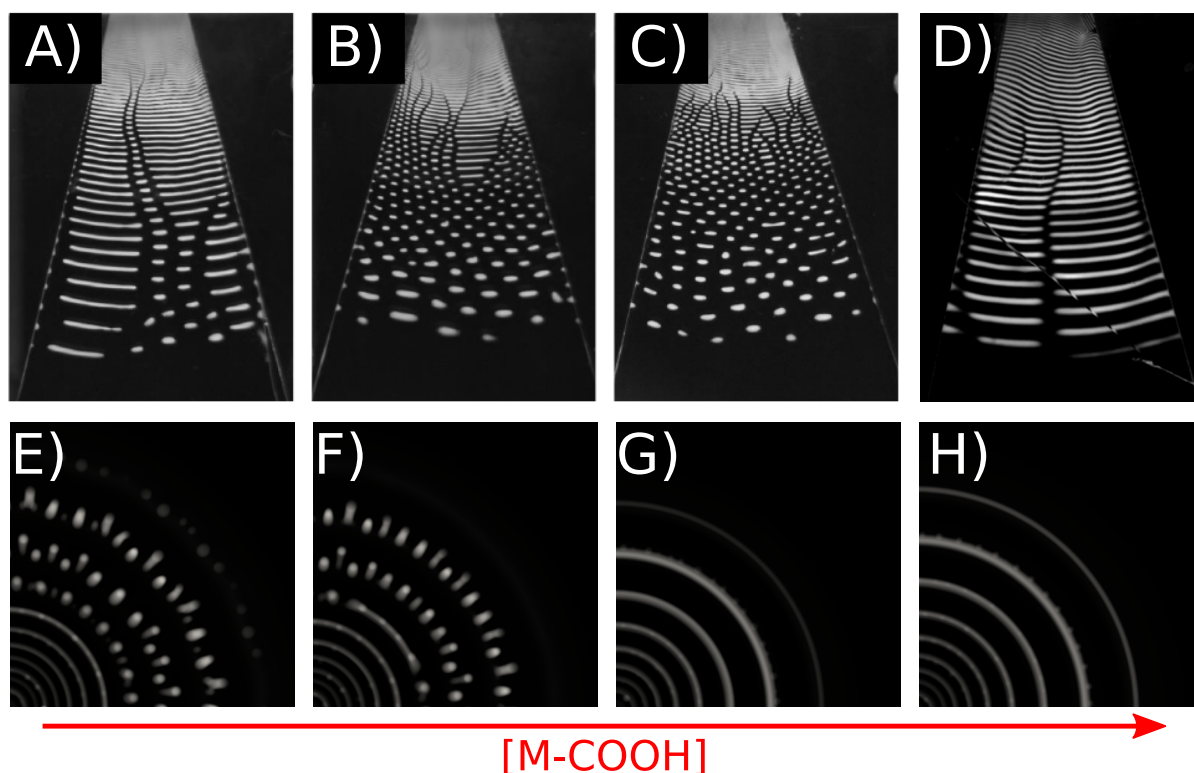


1. ábra. A kalcium-oxalát csapadék méreteloszlásának időbeli változása $c = 500 \mu\text{M}$ kezdeti reaktáns koncentráció mellett a) és különböző kezdeti reaktáns koncentrációk esetén $t = 300\text{s}$ -nál b).

II. *Reakció-diffúzió vezérelt rendszerben modellezéssel alátámasztottuk, hogy megkötés hatására a kialakuló kadmium(II)-hidroxid csapadékmintázat szabályozható [5].*

Egy kadmiumionokat tartalmazó gélbe hidroxidionokat diffundáltatva sávos mintázat alakul ki kadmium(II)-hidroxid csapadékból. Poliakrilamid-metakrilsav kopolimer gélben a metakrilsav mennyiségét növelve a bediffundáló hidroxidionok sav-bázis egyensúlyi reakcióba lépnek a kötött karboxilcsoportokkal ezáltal lassítják a reakció-diffúzió front terjedését, ilyenkor a Liesegang-jelenségre jellemző csapadéksávok felhasadnak, és pöttyös mintázat alakul ki. Tovább növelve a karboxilcsoportok számát a gélben újra sávos mintázat képződik.

A Liesegang-jelenség modellezésére használatos spinodális fázisszeparációs elmélet szolgált a számítások alapjául, mely a fázisok nukleáció nélküli kialakulását magyarázza. A jelenség leírására a Ginzburg–Landau-egyenletből származtatott Cahn–Hilliard-egyenletet oldottuk meg. Számításaink során megkötés nélküli esetben a fázisszeparáció pöttyös mintázatot eredményezett a két dimenziós termikus zaj hatására. A karboxilcsoportok számának növekedésével azonban a front sebessége csökken, ezáltal a rendszerben kialakuló front haladási irányában keletkező, egydimenziós koncentrációgradiens domináns lesz a termikus perturbációhoz képest, ami a 2. ábrán látható sávos mintázatok kialakulását segíti elő.



2. ábra. A kadmium(II)-hidroxid csapadékmintázat változása növekvő karboxilcsoport koncentráció hatására kísérletekben (A-D) és modellszámításokkal alátámasztva (E-H)

III. *Létrehoztunk egy, a szilárd részecskék nukleációját és növekedését áramlásvezérelt rendszerekben leíró modellt [4].*

Áramlásvezérelt rendszerek esetén a koncentrációmező időbeli változását leíró (1) komponensmérleg-egyenlet számításához szükséges az áramlási vektormező ismerete, melyhez a (2) Navier-Stokes-egyenletet kell megoldani. Az így kapott homogén koncentráció felhasználható (c_i) a képződő heterogén szilárd fázis mennyiségének meghatározására. A csapadék képződésének sebessége (r_h) leírható, mint

$$r_h = \left(k_n + k_g \sum_j A_j \right) \left(\prod_i c_i - K_{sp} \right),$$

ahol k_n a nukleáció, míg k_g a növekedés sebességi együtthatója, A_j a szilárd részecske felülete és K_{sp} az oldhatósági szorzat. Az ebből számítható szilárd fázis anyagmennyisége a sebességi együtthatókkal arányosan két részre osztható és meghatározható a göcképződésre (Δn_n)

$$\Delta n_n = \frac{k_n}{k_n + k_g \sum_j d_j^2} r_h \Delta t \Delta V$$

és a növekedésre (Δn_g)

$$\Delta n_g = \frac{k_g d_j^2}{k_n + k_g \sum_j d_j^2} r_h \Delta t \Delta V$$

jutó anyagmennyiség. Az így meghatározott anyagmennyiségeket felhasználva az alábbi kritérium és összefüggés alapján meghatározhatjuk, hogy egy iterációs lépés során egy térfogatelemben létrejön-e góc, illetve annak mérete is megadható

$$1 \mu\text{m} \leq d_{új} = \left(\frac{6M \Delta n_n}{\rho_p \pi} \right)^{1/3},$$

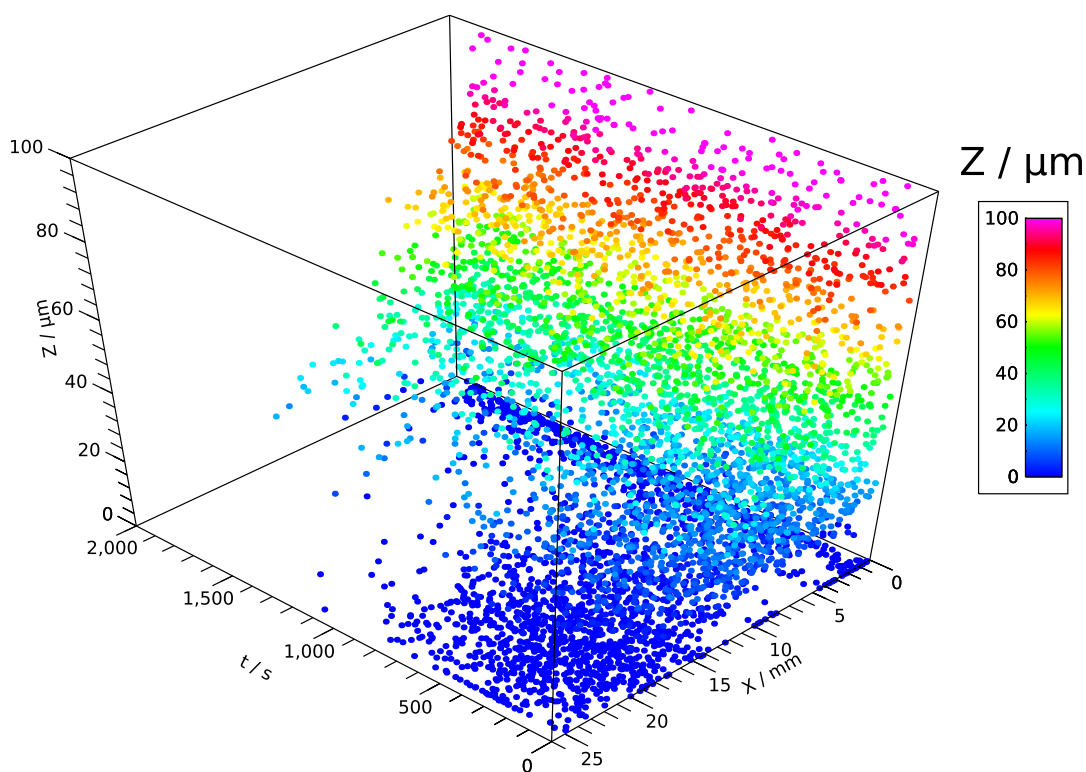
ahol ρ_p a szilárd részecske sűrűsége, M pedig a molekulatömeg. A részecskék növekedését a növekedésre jutó anyagmennyiség segítségével a

$$d_{új,j} = \left(d_j^3 + \frac{6M \Delta n_g}{\rho_p \pi} \frac{d_i^2}{\sum_j d_j^2} \right)^{1/3}$$

egyenlet alapján határozhatjuk meg. Az elkészült modellt mikrométeres és centiméteres méretskálájú áramlásvezérelt rendszereken is validáltuk.

IV. Bemutattuk, hogy mikrofluidikai csatornában leülepedett kalcium-oxalát monohidrát részecskék nukleációs helyeinek eloszlása idővel a reaktorban inhomogénná válik [2].

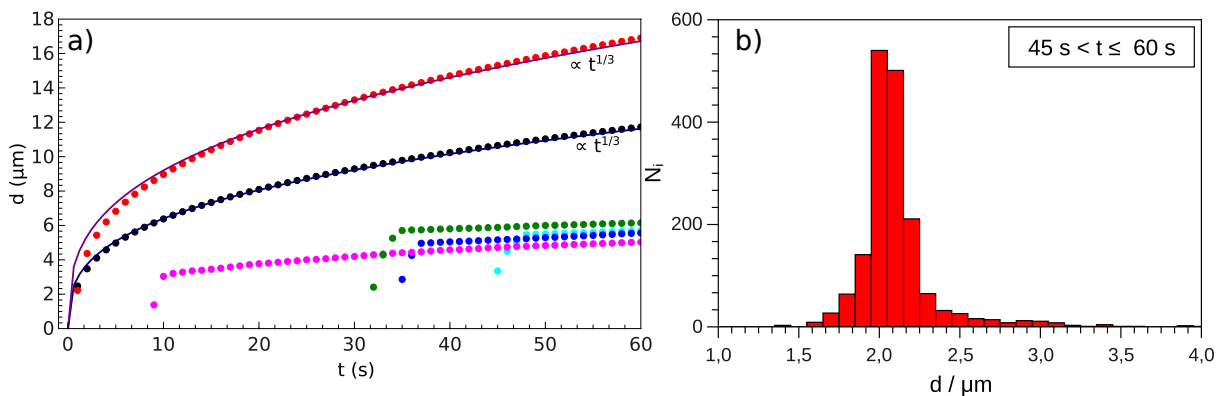
Egy mikrofluidikai csatornába kalcium-kloridot és nátrium-oxalátot áramoltatva, tanulmányozható a kalcium-oxalát részecskék viselkedése. A csapadék képződésének tanulmányozása érdekében numerikus modellezéssel vizsgáltam a részecskék nukleációját. Feltérképeztem a reaktorban leülepedett csapadékszemcsék nukleációs helyeinek időbeli és térbeli változását (3. ábra). Kezdetben a részecskék képződése homogén, a csatorna minden pontján bekövetkezik a nagy túltelítettség miatt. Az idő előrehaladtával a beáramoltatástól távolabb egyre kisebb mértékben képződnek részecskék, valamint a gócképződés inkább a reaktor fenti részeire korlátozódik. Ezen jelenség a gócnövekedés és képződés kompetitív jellegével magyarázható. Kezdetben a nukleáció domináns az egész csatornában. A kialakult részecskék leülepednek és növekedni kezdenek, ezáltal a csatorna alsó szakaszaiban a gócnövekedés fog dominálni és a nukleáció elhanyagolható mértékűvé válik. Mivel a csatorna elején a legnagyobb a túltelítettség, az idő előrehaladtával a legtöbb részecske itt fog képződni a felső régióban, azonban a reaktor távolabbi részein már nem lesz elég magas a túltelítettség ahhoz, hogy új részecske képződjön. Ezáltal az idő előrehaladtával a nukleációs helyek inhomogénná válnak a csatornában, ugyanis a beáramoltatáshoz közeli, fenti részekre korlátozódik a további gócképződés.



3. ábra. A mikrofluidikai csatornában leülepedett részecskék nukleációs helyeinek alakulása az időben

V. Bemutattuk, hogy mikrofluidikai csatornában elkülönülten leülepedett kalcium-oxalát részecskék növekedése áramlásvezérelt, valamint a reaktort elhagyó részecskék méreteloszlása monodiszperz [4].

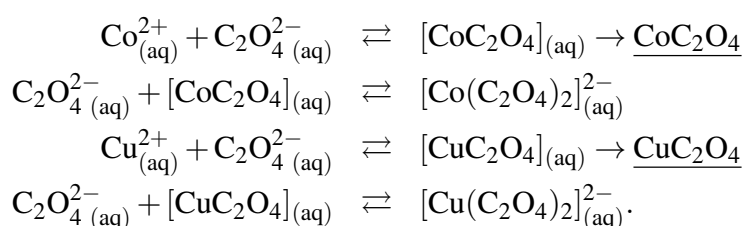
Tovább vizsgálva a kalcium-oxalát csapadékszemcsék viselkedését a rendszer számítógépes modelljét használva igazolni tudtuk, hogy a részecskék növekedését nem csak a túltelítés, hanem egymástól való távolságuk is befolyásolja. Azon részecskék, amelyek izoláltan, a többi részecskétől távol ülepednek le $t^{1/3}$ -al arányosan nőnek, ahogy az a 4. a) ábrán látható, tehát növekedésük áramlásvezérelt. A csoportokban leülepedő csapadékszemcsék méretváltozása nem jelentős, ugyanis versengés lép fel közöttük. Azok a részecskék, amelyek nem a reaktor aljához közel képződnek kisodródnak a reaktorból. A reaktort elhagyó részecskék méreteloszlását az elkészült modell segítségével meghatároztuk, melyet a 4. b) ábra szemléltet. A méreteloszlás nagy fokú monodiszperzitást mutat, a számolt polidiszperzitási index értéke 1,2. Az idő változásával a polidiszperzitás változása elhanyagolható. Ez azzal magyarázható, hogy a részecskék mindig a reaktor elején képződnek ott, ahol nagy a túltelítettség, így mindig ugyanannyi időt töltenek a csatornában, ezért és hasonló méretűre növekednek.



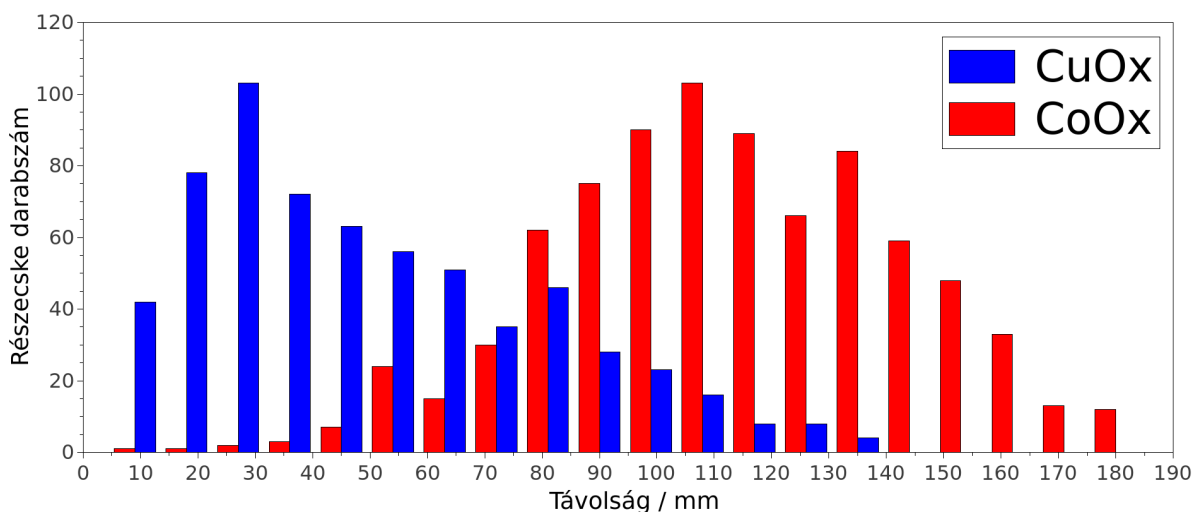
4. ábra. A leülepedett szilárd részecskék növekedése a) és a reaktort elhagyó szemcsék méreteloszlása b)

VI. *Kimutattuk, hogy réz(II)- és kobalt(II)-oxalát áramlásvezérelt rendszerben történő képződése során a térbeli szeparációt a csapadék kialakulást megelőző komplexképződés határozza meg [3].*

Kobalt(II)- és réz(II)ionok oxaláttal való reakciója során a keletkező kobalt(II)- és réz(II)-oxalát csapadékok jól kevert rendszerben együttesen válnak le, ugyanis oldhatósági szorzataik hasonlóak ($pK_{sp,CoOx} = 8,58$; $pK_{sp,CuOx} = 8,76$). Ezzel ellentétben áramlásvezérelt rendszer esetén, amikor a kobalt(II)- és réz(II)ionok homogén elegyét alulról áramoltatjuk egy nátrium-oxalátot oldatot tartalmazó reaktorba a két csapadék térben egymástól elkülönülve válik le. A jelenség megismerése céljából egy számítógépes modellt készítettünk, melybe a felsorolt komplex és csapadékképződési reakciókat építettük be:

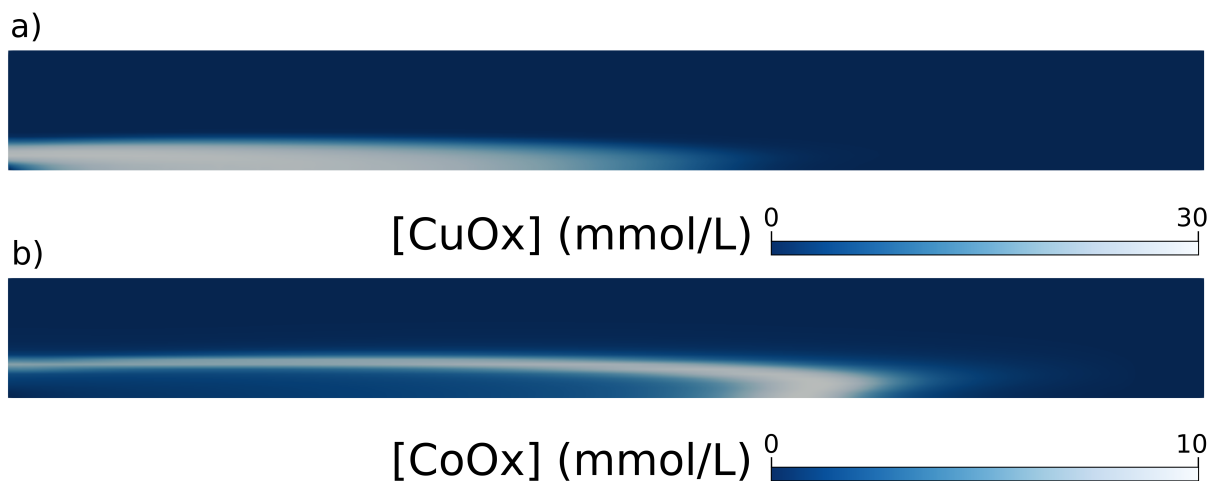


Számításainkkal sikerült leírni a kísérletekben látott térbeli csapadék szeparációt, amelyet az 5. ábrán mutatok be.



5. ábra. A leülepedett réz(II)- és kobalt(II)-oxalát részecskék térbeli eloszlása, ahol az x -tengelyen a 0 mm a beáramoltatás helyét jelöli

Továbbá a 6. ábra alapján a komplexek koncentrációinak térbeli eloszlásaiból meghatározhattuk, hogy a csapadékok térbeli elkülönüléséért a csapadékképződést megelőző komplexképződés a felelős. Mivel az oxaláto-réz(II) komplex stabilitási állandója nagyobb, mint az oxaláto-kobalt(II) komplexé ($\log_{10}\beta_{CuOx} = 4,84, \log_{10}\beta_{CoOx} = 3,25$), ezért az



6. ábra. A réz(II)- (a) és kobalt(II)-oxalát komplexek (b) koncentráció eloszlásai

előbbi a reaktor aljához közel alakul ki. Ebből a komplexből kialakuló réz(II)-oxalát csapadék így a beáramoltatáshoz közel fog képződni, és leülepedni. A kobalt(II)-oxalát csapadék prekurzorának számító kobalt(II)-oxalát komplex ezáltal csak a reaktor felső részén tud kialakulni. Ebből adódóan a kobalt(II)-oxalát szilárd részecskék tovább tartózkodnak az áramban, így térben később tudnak leülepedni.

4. Publikációs lista

4.1. Az értekezés témakörében megjelent közlemények

1. **P. Papp**, Á. Tóth, D. Horváth
Population mass balance model for precipitation with turbidity measurements
ACS Omega, **9**, 13412-13417 (2024)
IF₂₀₂₃ = 3,7 (Q2)
2. **P. Papp**, S. Bourg, M. Emmanuel, Á. Tóth, A. Abou-Hassan, D. Horváth
Spatiotemporal distribution of calcium oxalate crystals in a microchannel
Cryst. Growth Des., **11**, 8116 (2023)
IF₂₀₂₃ = 3,2 (Q2)
3. **P. Papp**, Á. Tóth, D. Horváth
Spatial precipitate separation enhanced by complex formation
Chem. Eng. Sci., **261**, 117955 (2022)
IF₂₀₂₂ = 4,7 (Q1)
4. K. Rakotozandriny, S. Bourg, **P. Papp**, Á. Tóth, D. Horváth, I. T. Lucas, F. Babonneau, C. Bonhomme, A. A. Hassan
Investigating CaOx crystal formation in absence and presence of polyphenols under microfluidic conditions in relation with nephrolithiasis
Cryst. Growth Des., **20**, 20243-20247 (2020)
IF₂₀₂₀ = 4,076 (Q1)
5. **P. Papp**, B. Bohner, Á. Tóth, D. Horváth
Fine tuning of pattern selection in the cadmium–hydroxide-system
J. Chem. Phys., **152**, 094906 (2020)
IF₂₀₂₀ = 3,488 (Q1)
ΣIF = 19,164

4.2. Az értekezés témaköréhez nem kapcsolódó közlemények

1. **P. Papp**, Á. Tóth, D. Horváth
PaReDiSo: A reaction-diffusion solver coupled with OpenMPI and CVODE
Comput. Phys. Commun., **301**, 109193 (2024)
IF₂₀₂₃ = 7,2 (D1)

2. Y. Stergiou, D. M. Escala, **P. Papp**, D. Horváth, M. J. B. Hauser, F. Brau, A. De Wit, Á. Tóth, K. Eckert, K. Schwarzenberg
Unraveling dispersion and buoyancy dynamics around radial $A + B \rightarrow C$ reaction fronts: microgravity experiments and numerical simulations
 npj Microgravity, **10**, 53 (2024)
 IF₂₀₂₃ = 4,4 (Q1)
3. Y. Stergiou, **P. Papp**, D. Horváth, Á. Tóth, K. Eckert, K. Schwarzenberg
Experimental and numerical investigation of a density-driven instability during a horizontal miscible displacement
 Phys. Fluids, **35**, 064112 (2023)
 IF₂₀₂₃ = 4,1 (D1)
4. Y. Stergiou, M. J. B. Hauser, A. Comolli, F. Brau, A. De Wit, G. Schuszter, **P. Papp**, D. Horváth, C. Roux, V. Pimienta, K. Eckert, K. Schwarzenberg
Effects of gravity modulation on the dynamics of a radial $A + B \rightarrow C$ reaction front
 Chem. Eng. Sci., **257**, 117703 (2022)
 IF₂₀₂₂ = 4,7 (Q1)
5. M. Emmanuel, **P. Papp**, G. Schuszter, A. Deák, L. Janovák, Á. Tóth, D. Horváth
Nucleation kinetics of lithium phosphate precipitation
 CrystEngComm, **24**, 4447–4453 (2022)
 IF₂₀₂₂ = 3,1 (Q2)
6. **P. Papp**, G. Czakó
Rotational mode specificity in the $F^- + CH_3I$ ($v = 0, JK$) S_{N2} and proton-transfer reactions
 J. Phys. Chem. A, **124**, 8943–8948 (2020)
 IF₂₀₂₀ = 2,781 (Q2)
7. **P. Papp**, V. Tajti, G. Czakó
Numerical separation of the front-side attack and double-inversion retention pathways of S_{N2} reactions
 Chem. Phys. Lett., **755**, 137780 (2020)
 IF₂₀₂₀ = 2,328 (Q2)

8. E. Balog, **P. Papp**, Á. Tóth, D. Horváth, G. Schusztter

The impact of reaction rate on the formation of flow-driven confined precipitate patterns

Phys. Chem. Chem. Phys., **22**, 13390–13397 (2020)

IF₂₀₂₀ = 3,676 (Q1)

Σ IF = 32,285

$\Sigma\Sigma$ IF = 51,449

5. Előadások

5.1. Az értekezés témaköréhez kapcsolódó előadások

1. **Papp Paszkál**, Horváth Dezső

Csapadékképződési folyamatok modellezése

Ph.D. értekezés alapjául szolgáló eredmények előzetes bemutatása, MTA Reakciókinetika és Fotokémiai Munkabizottsága, 2024.05.30., Balatonvilágos, Magyarország

2. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső

Csapadékképződés kinetikai jellemzése populáció-mérleg modellel

MTA Reakciókinetika és Fotokémiai Munkabizottsága, 2023.06.09., Balatonvilágos, Magyarország

3. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső

Spatial precipitate separation enhanced by complex formation

Japan-Hungarian Workshop, 2022.03.14., Budapest, Magyarország

4. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső

Spatial precipitate separation enhanced by complex formation

COST Chemobrionics Pisa, 2022.09.06., Pisa, Olaszország

5. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső

Numerical modeling of precipitate formation in a microfluidic system

GRS Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, 2022.07.16., Easton, MA, Egyesült Államok

6. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső

Csapadékképződés modellezése folyadékfázisban

Intézményi ÚNKP konferencia, 2022.06.03., Szeged, Magyarország

7. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Kémiai reakció és a közegmozgás kölcsönhatásának modellezése szilárd-folyadék rendszerben
XLIV. Kémiai Előadói Napok, 2021.10.21., Szeged, Magyarország
8. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Spatial separation of precipitate in reactive media
2nd Conference on Nonlinearity, 2021.10.09., Belgrád, Szerbia
9. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Kalcium-oxalát csapadékképződésének modellezése mikrocsatornákbán
Intézményi ÚNKP konferencia, 2021.06.24., Szeged, Magyarország
10. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Numerical modeling of precipitate formation in microfluidic system
2nd International Conference on Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis, 2021.05.21., Budapest, Magyarország
11. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Csapadékképződés modellezése mikrofluidikás reaktorban
MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága, 2019.11.07., Mátrafüred, Magyarország
12. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Csapadékképződés modellezése mikrofluidikás reaktorban
XLII. Kémiai Előadói Napok, 2019.10.28., Szeged, Magyarország
13. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Controlling pattern formation of cadmium-hydroxide system
Conference on Nonlinearity, 2019.10.11., Belgrád, Szerbia
14. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Csapadékmintázat képződésének modellezése
Intézményi ÚNKP konferencia, 2019.06.21., Szeged, Magyarország
15. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Csapadékmintázat képződésének modellezése
KeMoMo-QSAR, 2019.06.06., Szeged, Magyarország

16. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Kadmium-hidroxid csapadékképződés modellezése
XLI. Kémiai Előadói Napok, 2018.10.15., Szeged, Magyarország
17. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Kadmium-hidroxid csapadékképződés modellezése
MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága, 2018.05.24., Balatonalmádi, Magyarország

6. Poszter prezentáció

6.1. Az értekezés témaköréhez kapcsolódó poszter prezentáció

1. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Modeling the kinetics of spatiotemporal precipitation
12th International Conference on Chemical Kinetics, 2023.06.26., Hefei, Kína
2. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Spatial precipitate separation enhanced by complex formation
COST Chemobrionics Pisa, 2022.09.06., Pisa, Olaszország
3. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Spatial precipitate separation enhanced by complex formation
GRC Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, 2022.07.20., Easton, MA, Egyesült Államok
4. **Papp Paszkál**, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Spatial separation of precipitates in reactive media
Understanding Crystallisation: Faraday Discussion, 2022.03.28., York, Egyesült Királyság

6.2. Az értekezés témaköréhez nem kapcsolódó poszter prezentáció

1. **Papp Paszkál**, Stergiou Yorgos, Schusztér Gábor, Tóth Ágota, Eckert Kerstin, Schwarzenberger Karin, Horváth Dezső
Radiális reakciófront terjedése súlytalanságban
Magyar Űrkutatási Fórum, 2023.05.03., Sopron, Magyarország

MTMT azonosító: 10074723

7. Nyilatkozat

Alulírott, mint Horváth Dezső Papp Paszkál jelölt doktori témavezetője a Csapadékképződési folyamatok modellezése című doktori értekezéshez kapcsolódó Cryst. Growth Des., **20**, 20243-20247 (2020) publikációval és a jelölt V. tézispontjával kapcsolatban ezúton nyilatkozok arról, hogy az értekezésben felhasznált eredmények tükrözik a jelölt önálló hozzájárulását és a tézispontban megfogalmazott eredményeket eddig senki sem használta fel tudományos fokozat megszerzésekor, s ezt a jövőben sem fogja.

Prof. Dr. Horváth Dezső
egyetemi tanár