

Nanorészecske-képződés kinetikai modellezése

Szabó Rebeka

PhD értekezés tézisei

Témavezető: Dr. Lente Gábor

egyetemi tanár



Pécsi Tudományegyetem

Kémia Doktori Iskola

Pécs

2024

1. Bevezetés

A néhánytól néhány száz nanométerig terjedő nanorészecskék egyre kiemelkedőbb szerepet töltenek be, legfőképp a katalízis, az elektronika, a gyógyászat és a környezetvédelem területén. Ennek oka, hogy kis méretük és nagy felület-térfogat arányuk speciális tulajdonságokkal ruházza fel ezeket a részecskéket, amelyek kitűnően alkalmassá teszi őket a különböző felhasználásokra. Bár mind természetes, mind szintetikus úton előállíthatók, az utóbbi jelentősége sokkal hangsúlyosabb, és manapság leginkább nemesfémekből, platinafémekből, illetve átmenetifém-oxidokból vagy szulfidokból állítják elő a nanorészecskéket.

A zöld kémia esetében a katalitikus módszerek fejlesztése kerül egyre inkább előtérbe, hiszen ilyen formában nemcsak a reakciók kimenetelét gyorsíthatjuk meg, de a szelektív átalakításokat is támogathatja, minimalizálva ezzel a melléktermékek és a hulladék mennyiségét. A nanotechnológiát és az orvostudományokat ötvöző nanomedicina nagyon ígéretes az egészségügy számára, s benne a nanorészecskék mind a diagnosztikában (CT, MRI), mind gyógyszerhordozó rendszerként máris óriási szerepet töltenek be. Nem szabad megfeledkezni azonban a potenciális toxicitásról és a környezetre gyakorolt (negatív) hatásokról sem, amelynek okai a különleges fizikai-kémiai sajátságokaikból származtathatók.

A nanorészecskék fentebb említett kivételes tulajdonságait döntően a méretük és annak eloszlása befolyásolja, ezért a részecskék képződési kinetikájának megértése is elkerülhetetlen. Az eddig meglévő modellek közül említést érdemel a Smoluchowski-modell és a LaMer-modell. Ezek egy továbbfejlesztett változataként is tekinthető a mára jól kidolgozott Finke-Watzky modell, és érdemes megemlíteni a Becker-Döring modellt és annak szélső eseteként is ismert, Lipshitz-Slyozov-Wagner modellt is. Ezen túlmenően a nanorészecskék átlagos méretét és eloszlását kinetikai tényezők határozzák meg, és termodinamikailag instabilak a szilárd fázishoz (*bulk*) képest. Ezért méretük szabályozása a képződési kinetika alapos ismeretét igényli.

2. Célkitűzések

A nanorészecskék képződése kinetikai szempontból sok hasonlóságot mutat a polimerizációs folyamatokkal. A meglévő modellek adaptálása a nanorészecskék képződésének pontos leírására azonban továbbra is lényeges kihívást jelent. Ma már nyilvánvaló, hogy a részecskeméret döntő szerepet játszik potenciális alkalmazásaikban, mivel nagymértékben befolyásolja katalitikus tulajdonságokat és toxicitást.

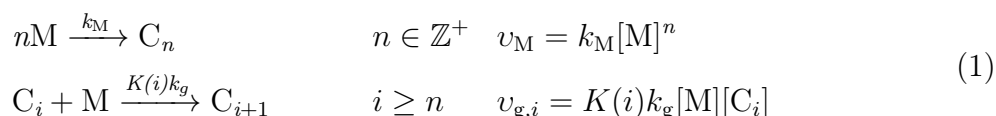
A nanorészecskék képződésével kapcsolatos korábbi kutatások determinisztikus modelleket alkalmaztak, amelyek közelítő megoldásokat adtak. Ezek a megoldások alkalmazhatók a nanorészecskék koncentrációinak időbeli alakulásának kiszámítására de a bennük lévő közelítéseket és elhanyagolásokat ritkán tesztelték szisztematikusan.

Kutatásaim egyik kulcsfontosságú célja a különböző kernelfüggvények, így a tömeg-, felület-, Brown- és diffúziós kernelek alkalmazása és összehasonlítása, hogy meghatározzuk a végső nanorészecskeméret-eloszlás legmegfelelőbb közelítését. Ezek a kernelek a nanorészecskék képződési mechanizmusának matematikai leképezéseiként szolgálnak, lehetővé téve, hogy mélyebb betekintést nyerjünk a különböző kinetikai tényezők szerepébe a nanorészecske méretének és eloszlásának meghatározásában. Ezen túlmenően a dolgozat célja robusztus módszer(ek) kidolgozása a nanorészecskeméret-eloszlással kapcsolatos kísérleti adatok értelmezésére. A fejlett modellezési technikák és a kísérleti eredmények összehasonlításával validálhatjuk és finomíthatjuk az elméleti előrejelzéseket, ami a nanorészecskék képződésében szerepet játszó komplex kinetika átfogóbb megértéséhez vezet.

3. Feltételezések és módszerek

A modell

Az általánosított gócképződési-növekedési modell első lépése során néhány monomeregység alkot egy göcot, amely egy jóval gyorsabb, másodrendű reakcióban növekszik tovább, egy monomeregység egy nanorészecskéhez való hozzáadásán keresztül. A reakciólépések és a hozzájuk tartozó sebsségi egyenletek az alábbi módon adhatók meg:



A fenti, tömör jelölésmód nagyon sok, különböző modellt jelképez. Az egyenletekben szereplő M a monomeregységet jelöli, míg a C_i a pontosan i monomeregységet tartalmazó nanorészecskét jelenti. Az n pozitív egész szám, amely a monomeregeységek azon legkisebb számát határozza meg, amely már göcot képezhet. Az k_M és a k_g a gócképződés és a növekedés sebességi állandóit adják meg, míg a v_M és a $v_{g,i}$ ugyanezen lépések sebességét. A $K(i)$ kernelfüggvény fejezi ki, hogy a gócnövekedés sebességi állandója hogyan függ a részecske méretétől. Kutatásaim során alapvetően négy különböző kernelfüggvényt feltételeztem: a tömegkernel (közvetlenül arányos a tömeggel vagy térfogattal, $K(i) = i$), a felületkernel (közvetlenül arányos a felülettel, $K(i) = i^{2/3}$), a Brown-kernel (közvetlenül arányos a lineáris mérettel, $K(i) = i^{1/3}$), és a diffúziós kernel (független a mérettől, $K(i) = 1$).

Egyszerűsítések

A matematikai kezelésmód egyszerűsítése és a paraméterek számának csökkentése érdekében dimenziómentes mennyiségeket vezettünk be. Ezek lehetővé teszik, hogy a nanorészecskék koncentrációját időben leíró differenciálegyenleteket valamivel egyszerűbb formába hozzuk:

$$\begin{aligned} \frac{dm}{d\tau} &= -\alpha m^n - \sum_{j=n}^{\infty} K(j)mc_j \\ \frac{dc_n}{d\tau} &= \alpha m^n - K(n)mc_n \\ \frac{dc_i}{d\tau} &= K(i-1)mc_{i-1} - K(i)mc_i \quad i > n \end{aligned} \tag{2}$$

Az egyenletekben szereplő m a monomeregység dimenziómentes koncentrációja, c_i pedig a nanorészecskéké. Az α jelöli a göcképződési és -növekedési sebességi állandó arányát, míg a τ a dimenziómentes időt jelképezi.

Az általunk vizsgált populációk matematikai leírásában gyakran előnyös a momentumok használata. A nanorészecske-koncentrációk q -adik momentumát az alábbi egyenlet definiálja, ahol q bármely valós szám lehet:

$$\mu_q = \sum_{j=n}^{\infty} j^q c_j \quad (3)$$

Az első momentum a monomeregységek teljes mennyiségét jelenti a nanorészecskékben: ez az anyagmegmaradás törvényének megfelelően sosem változik meg a rendszerben. Az erre felírt differenciálegyenlet megoldása is ezt igazolja:

$$\mu_1 + m = 1 \quad (4)$$

A nulladik momentum fizikai jelentésértartalma a nanorészecskék összkoncentrációja a dimenziómentes mennyiségekkel kifejezve. Ez esetben azonban a differenciálegyenlet analitikus megoldása már komolyabb erőfeszítéseket igényel, amely többek között egyszerűsítési eljárásokat foglal magába.

A Brown- és a felületkernel esetében még érdemesnek bizonyul az 1/3-ik és a 2/3-ik momentum bevezetése is, amelyek tapasztalataink szerint jó közelítéssel megbecsülhetők az első és nulladik momentum megfelelően súlyozott geometriai közepeként.

Sztochasztikus közelítés

A folytonos idejű, diszkrét állapotterű sztochasztikus közelítés során molekulaszámokkal dolgozunk koncentrációk helyett, így az időfüggést (is) leíró modell lényegében egy folytonos idejű Markov-láncnak tekinthető ($X(\tau) = (X_0(\tau), X_1(\tau), \dots, X_N(\tau))$). Az összes monomeregység, valamint a pontosan i monomeregységet magába foglaló nanorészecskék számának összege adja meg a teljes molekulaszámot a modellünkben:

$$x_0(\tau) + \sum_{i=n}^{\infty} i x_i(\tau) = N \quad (5)$$

A fenti egyenlet bármely időpillanatban igaz a tömegmegmaradás törvénye miatt. A lehetséges megoldások száma (matematikailag lényegében egy diofantoszi egyenlet megoldásinak száma) adja az állapotok számát. Ezen sztochasztikus közelítés során az állapotvalószínűségek időbeli változását leíró közönséges differenciálegyenlet-rendszernek a megoldása nehézségekbe ütközik az állapotok hatalmas száma miatt, így ezen számítása-

ink Monte Carlo szimulációkon alapulnak a Gillespie-algoritmust alkalmazva. Itt az egyes lépések infinitézimális átmeneti valószínűségeit a determinisztikus sebességi egyenletekkel analóg módon definiáltuk.

Az alkalmazott szimuláció lényege, hogy minden egyes lépés során két független, egyenletes eloszlású véletlen számot generál 0 és 1 között. Az első véletlen számot az idő növelésére használja a következő egyenlet szerint:

$$\tau^{\text{új}} = \tau^{\text{rég}} - \frac{\ln r_{nd_1}}{\sum_{j=1}^N p_j(\tau^{\text{rég}})} \quad (6)$$

A másodikkal azt döntjük el, hogy a nem nulla infinitézimális átmeneti valószínűségű lépések közül melyik következik be. Egy adott, i -edik sorszámú lépés akkor és csak akkor következik be, ha teljesül a következő egyenlőtlenség:

$$\frac{\sum_{j=1}^{i-1} p_j(\tau^{\text{rég}})}{\sum_{j=1}^N p_j(\tau^{\text{rég}})} \leq r_{nd_2} < \frac{\sum_{j=1}^i p_j(\tau^{\text{rég}})}{\sum_{j=1}^N p_j(\tau^{\text{rég}})} \quad (7)$$

Ezen lépés bekövetkezése a molekulaszámokban változásokat idéz elő, amelyek addig ismétlődnek, amíg az összes infinitézimális átmeneti valószínűség nulla nem lesz (a modellben nincsenek megfordítható lépések, így ilyen végállapot valóban létezik).

$$\begin{aligned} x_0(\tau^{\text{new}}) &= x_0(\tau^{\text{old}}) - n; x_n(\tau^{\text{new}}) = x_n(\tau^{\text{old}}) + 1, & \text{ha } i = 1 \\ x_0(\tau^{\text{new}}) &= x_0(\tau^{\text{old}}) - 1; x_i(\tau^{\text{new}}) = x_i(\tau^{\text{old}}) - 1; \\ x_{i+1}(\tau^{\text{new}}) &= x_{i+1}(\tau^{\text{old}}) + 1, & \text{ha } i > n \end{aligned} \quad (8)$$

A szimulációkat a Matlab programban írt kódok segítségével futtattuk le, mind a négy különböző kernelfüggvény esetére, különböző n értékeket megadva a gócképződési lépéshez. A kezdeti molekulaszámokat 10^6 és 10^8 között választottuk meg, amelyek bár kis értékek a valós esetekhez képest, azonban számítástechnikailag kezelhetők, és már így is lényeges következtetések levonását lehetővé tévő eredményekhez jutottunk a determinisztikus számításokkal való összevetéshez. A sebességi állandók arányát, vagyis az α -t mindig 1-nél jóval kisebbnek választottuk, hiszen a növekedési lépésnek sokkal gyorsabbnak kell lennie, hogy értelmes méretű részecskékhez jussunk.

4. Eredmények

A nanorészecskék dimenziómentes összkoncentrációjának meghatározásához a nulladik momentum analitikus megoldásait kell megtalálnunk a különböző kernel függvények esetére. Ehhez első közelítésként a monomeregységek dimenziómentes koncentrációját tekintjük a μ_0 függvényében.

$$\frac{dm}{d\mu_0} \cong - \frac{m \sum_{j=n}^{\infty} K(j)c_j}{\alpha m^n} \quad (9)$$

A közelítő módszerrel kapott megoldásokat a nanorészecskék végső méretére, valamint azokat nem skálázott formában felírva, az 1. táblázat foglalja össze.

1. táblázat. A nanorészecskék végső mérete a különböző kernel függvények esetében

Kernel függvény	Átlagos végső nanorészecske méret (\bar{M}_∞)
Diffúziós kernel	$\sqrt{\frac{nk_g}{2[M]_0^{n-2}k_M}}$
Felületkernel	$\sqrt[4]{\frac{27}{64}} \left(\frac{[M]_0^{n-2}k_M}{nk_g} \prod_{j=1}^n \frac{3j}{3j-2} \right)^{-3/4}$
Brown-kernel	$\left(\frac{3}{5}\right)^{3/5} \left(\frac{[M]_0^{n-2}k_M}{nk_g} \prod_{j=1}^n \frac{3j}{3j-1} \right)^{-3/5}$
Tömegkernel ($n = 1$)	$\frac{[M]_0 k_g}{\ln\left(1 + \frac{[M]_0 k_g}{k_M}\right) k_M}$
Tömegkernel ($n > 1$)	$\frac{[M]_0^{-n} ([M]_0^2 + [M]_0^n n k_M) \left(1 + \frac{[M]_0^{n-2} n k_M}{k_g}\right)}{\ln\left(1 + \frac{[M]_0^{2-n} k_g}{n k_M}\right) k_M} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i} \frac{[M]_0^{2-n} k_g \left(1 + \frac{[M]_0^{n-2} k_M}{k_g}\right)^{1+i-n}}{k_M}$

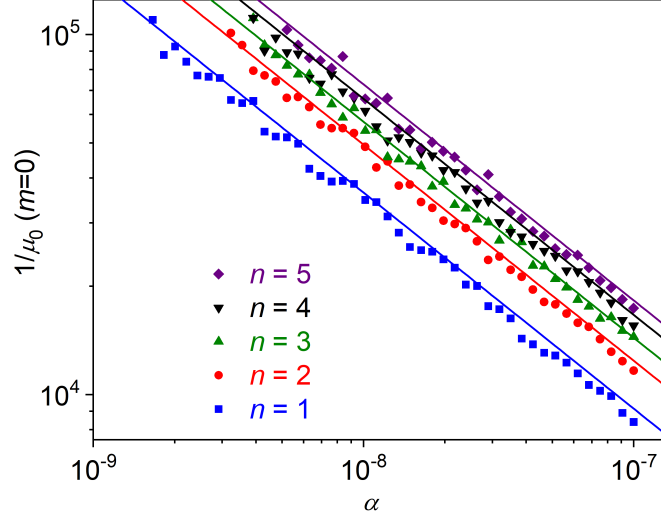
A számításokban lévő közelítéseket az elhanyagolásokat nem tartalmazó, sztochasztikus, Gillespie-szimuláció eredményeivel összevetve validáltuk, ahogy azt az 1. ábra is bemutatja a Brown-kernel öt különböző esetére ($n = 1, 2, 3, 4, 5$).

A nanorészecskék koncentrációjának időbeli változására pontos, szimbolikus megoldást mindössze három esetben sikerült találnunk. Az első a diffúziós kernel azon esete, amikor az göcképződés elsőrendű ($n = 1$):

$$[C_i] = - \frac{1}{[M]_0 k_g} \left(e^{\frac{k_M (k_M - [M]_0 k_g \sqrt{\frac{k_M (2[M]_0 k_g + k_M)}{[M]_0^2 k_g^2}}) \tanh\left(\text{ArcTanh}\left[\sqrt{\frac{k_M}{2[M]_0 k_g + k_M}}\right] + \frac{1}{2} [M]_0 t k_g \sqrt{\frac{k_M (2[M]_0 k_g + k_M)}{[M]_0^2 k_g^2}}\right)}{[M]_0^2 k_g^2}} - 1 \right) \quad (10)$$

$$k_M \sum_{j=0}^{i-1} \frac{1}{j!} \left(\frac{[M]_0 k_g \sqrt{\frac{k_M (2[M]_0 k_g + k_M)}{[M]_0^2 k_g^2}} \tanh\left(\frac{1}{2} [M]_0 t k_g \sqrt{\frac{k_M (2[M]_0 k_g + k_M)}{[M]_0^2 k_g^2}}\right) + \tanh^{-1}\left(\sqrt{\frac{k_M}{2[M]_0 k_g + k_M}}\right)}{k_M} - 1 \right)$$

Sikeresen találtunk szimbolikus megoldást még a tömegkernel esetére, amikor a göckép-



1. ábra. Átlagos végső nanorészecske-méret a göcképződési és növekedési sebességi állandó arányának függvényében a Brown-kernel $n = 1, 2, 3, 4, 5$ esetére. A pontok a sztochasztikus szimuláció eredményeit reprezentálják, míg a vonalak a determinisztikus formulákat.

zódás első- ($n = 1$), illetve másodrendű ($n = 2$):

$$[C_i] = \frac{\left(1 - e^{-\frac{t([M]_0 k_g + k_M)}{[M]_0^2}}\right) k_M}{i ([M]_0 k_g + k_M)} \quad (11a)$$

$$[C_i] = \frac{[M]_0 2k_g^{i-2} k_M^2 (i-1)}{(2k_M + (k_g - 2k_M)e^{-[M]_0 k_g t})} \prod_{j=2}^i (2k_M - k_g j - k_g) + [M]_0 \sum_{j=2}^i \frac{k_M (j^2 - 1)}{(2k_M - k_g j - k_g) j} \binom{i-1}{j-1} (-1)^j \left[\left(\frac{k_g}{2k_M + (k_g - 2k_M)e^{-[M]_0 k_g t}} \right)^{\frac{k_g}{2k_M - k_g}} - 1 \right] \quad (11b)$$

Minden más esetben numerikus számolásokat kell végeznünk az időfüggő c_i változók meghatározásához.

5. Tézispontok

1. **Általános gócképződési-növekedési modellcsaládot vezettem be nanorészecskék képződésének kinetikai leírására, amelyben a nanorészecskék reaktivitásának méretfüggését egy kernelfüggvény fejezi ki.** A modellekben az első lépésben néhány (n) monomeregység gócot képez, amely aztán tovább növekszik egy monomeregység hozzáadásával. Négyféle kernelfüggvényt vizsgáltam: a tömeg-, felület, Brown- és diffúziós kerneleket. A koncentrációk időbeli változását leíró differenciálegyenlet-rendszert dimenziómentes mennyiségekkel adtam meg, és a matematikai kezelésmód egyszerűsítése érdekében a momentumok fogalmát is alkalmaztam.
2. **A modellben pontos, szimbolikus megoldásokat találtam a koncentrációk időbeli változására a diffúziós kernel $n = 1$ és a tömegkernel $n = 1$ és $n = 2$ esetére.** Az összes többi esetben numerikus számításokra és időnként ezzel együtt elhanyagolásokra is szükség volt.
3. **Közelítő differenciálegyenletet vezettem be a nulladik momentum (a nanorészecskék összkoncentrációja) meghatározására.** A közelítést alkalmazva analitikus megoldásokhoz jutottam az átlagos végső részecskeméretre mind a négy kernel függvény esetében, n értékétől függetlenül.
4. **A kidolgozott közelítéseket Gillespie-szimulációkkal validáltam.** Sztochasztikus kinetikai szimulációkat végeztem a modellcsalád összes kernelfüggvénye és n értéke esetében a Gillespie-algoritmust alkalmazásával, ehhez Matlab programnyelven írtam megfelelő kódot. Az elhanyagolások által okozott hibát a Gillespie-szimulációkkal való összehasonlítás segítségével jellemeztem, a számunkra fontos paramétertarományban ez elhanyagolhatónak bizonyult.

Megjelent közlemények

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

1. Szabó, R., Lente, G. Full analytical solution of a nucleation-growth type kinetic model of nanoparticle formation, *J. Math. Chem.*, **2019**, 57, 616-631. **IF: 1.77**
2. Szabó, R., Lente, G. A comparison of the stochastic and deterministic approaches in a nucleation-growth type model of nanoparticle formation, *Chem. Mat.*, **2021**, 33, 5430-5436. **IF: 10.51**
3. Szabó, R., Lente, G. General nucleation-growth type kinetic models of nanoparticle formation: possibilities of finding analytical solutions, *J. Math. Chem.*, **2021**, 59, 1808-1821. **IF: 2.48**
4. Szabó, R., Lente, G. Predicting particle size distribution in nanoparticle formation by stochastic and deterministic approaches, *Željko Čupić; Slobodan Anič (ed.), PHYSICAL CHEMISTRY 2021. (Proceedings)*, **2021**, pp. 123-128.
5. Lente, G., Szabó, R., Matematikai reakciókinetika: a paritásértési energiától a nanorészecske-növekedésig, *Magy. Kém. Foly.*, **2022**, 128, 60-68.
6. Szabó, R., Lente, G. Deterministic approximation for the nucleation-growth type model of nanoparticle formation: a validation against stochastic simulations, *Chem. Eng. J.*, **2022**, 445, 137377. **IF: 15.1**

Poszterek és előadások a PhD értekezés témájában

1. Lente, G., Szabó, R. Detailed kinetic analysis of a simple two-step nanoparticle growth model, 1st International Conference on Reaction Kinetics, Mechanism and Catalysis, June 6-9, 2018, Budapest, Hungary
2. Szabó, R., Lente, G. Egy gócképződés-növekedés típusú nanorészecske-növekedési modell sebességi egyenletének analitikus megoldása, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság és a Koordinációs Kémiai Munkabizottság összevont ülése, November 8-9, 2018, Veszprém, Hungary
3. Szabó, R., Lente, G. A comparison of the stochastic and deterministic approach in a nucleation-growth type model of nanoparticle formation, 3rd Workshop on Formal Reaction Kinetics and Related Areas, Budapest University of Technology and Economics, January 9-10, 2020, Budapest, Hungary

4. **Szabó, R.**, Lente, G. A sztochasztikus és determinisztikus közelítés összehasonlítása a nanorészecske-képződésnek egy gócképződési-gócnövekedési modelljében, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság ülése (online), November 6, 2020
5. **Szabó, R.**, Lente, G. Comparison of the stochastic and deterministic approach in a nucleation-growth type model of nanoparticle formation, 9th Interdisciplinary Doctoral Conference (online), November 27-28, 2020
6. **Szabó, R.**, Lente, G. Symbolic deterministic and simulation stochastic description of nanoparticle formation kinetics, Formal Reaction Kinetics Seminar (online), February 25, 2021
7. **Szabó, R.**, Lente, G. A comparison of the stochastic and deterministic approach in a nucleation-growth type model of nanoparticle formation, 2nd International Conference on Reaction Kinetics, Mechanism and Catalysis (online), May 20-22, 2021
8. **Szabó, R.**, Lente, G. Nanorészecske-képződési kinetika szimbolikus determinisztikus és szimulációs sztochasztikus leírása, II. FKF Szimpózium (online), June 16-18, 2021
9. Lente, G., **Szabó, R.** Predicting particle size distribution in nanoparticle formation by stochastic and deterministic approaches, PHYSICAL CHEMISTRY 2021. 15th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, September 20-24, 2021, Belgrade, Serbia
10. **Szabó, R.**, Lente, G. A comparison of the stochastic and deterministic approach in a nucleation-growth type model of nanoparticle formation, Mathematics in (bio)Chemical Kinetics and Engineering 2021 (online), October 24-27, 2021, Shanghai, China
11. **Szabó, R.**, Lente, G. A comparison of the stochastic and deterministic approach in a nucleation-growth type model of nanoparticle formation, 10th Jubilee Interdisciplinary Doctoral Conference, November 12-13, 2021, Pécs, Hungary
12. **Szabó, R.**, Lente, G. Deterministic approximation for the nucleation-growth type model of nanoparticle formation: comparison with stochastic results, Formal Reaction Kinetics Seminar (online), February 22, 2022
13. **Szabó, R.**, Lente, G. Determinisztikus közelítés a nanorészecske-képződés gócképződési-növekedési modelljére: összehasonlítás a sztochasztikus eredményekkel, Intelligens szakosodás megvalósítása a Pécsi Tudományegyetemen (online), March 21-23, 2022

14. **Szabó, R.**, Lente, G. Deterministic approximation for the nucleation-growth type model of nanoparticle formation: comparison with stochastic results, 20th János Szentágothai Conference and Competition (online), April 14, 2022
15. **Szabó, R.**, Lente, G. Deterministic approximation for the nucleation-growth type model of nanoparticle formation: comparison with stochastic results, Spring Wind Conference, May 6-8, 2022, Pécs, Hungary
16. **Szabó, R.**, Lente, G. Determinisztikus közelítés a nanorészecske-képződés göcképződési-növekedési modelljére: összehasonlítás a sztochasztikus eredményekkel, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság ülése, May 19-20, 2022, Balatonvilágos, Hungary
17. **Szabó, R.**, Lente, G. Prediction of nanoparticle size distributions based on nucleation-growth type models, ACS Fall 2022, Chicago, IL, USA
18. Lente, G., **Szabó, R.** Nucleation-growth type models of nanoparticle formation: deterministic and stochastic approaches, Workshop on Aerogels Characterization and Modelling, March 29-31, 2023, Debrecen, Hungary
19. **Szabó, R.**, Lente, G. Prediction of nanoparticle size distributions based on nucleation-growth type models, 21st János Szentágothai Conference and Competition (online), April 21, 2023
20. Lente, G., **Szabó, R.** Nanorészecskék képződésének kinetikai leírása, MTA Felületkémiai és Nanoszerkezeti, Katalízis és Kolloidkémiai Munkabizottságok összevont ülése, May 24, 2023, Budapest, Hungary
21. **Szabó, R.**, Lente, G. Modeling the kinetics of nanoparticle formation, ACS Fall 2023, August 13-17, 2023, San Francisco, Ca, USA
22. **Szabó, R.**, Lente, G., Bibbona, E., Cappelletti, D., Siri, P., Sabbioni, E. Nanorészecske-képződési modellek matematikai kinetikai elemzése, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság ülése, October 26-27, 2023, Mátrafüred, Hungary
23. **Szabó, R.**, Lente, G., Bibbona, E., Cappelletti, D., Siri, P., Sabbioni, E. Final nanoparticle size distribution under unusual parameter regimes, Formal Reaction Kinetics and Related Questions Seminar (online), October 31, 2023

A PhD értekezés témáján kívül készült közlemények

1. Lente, G., Fursenko, A., **Szabó, R.** Use of the Taylor theorem to predict kinetic curves in an arbitrary mechanism, *Chem. Eng. J.*, **2022**, 445, 136676. **IF: 15.1**

2. Kumar, S. K. A., Lente, G., Szabó, R. A polynomial-based method to approximate kinetic curves in multistep mechanism, *Željko Čupić; Slobodan Anič (ed.), PHYSICAL CHEMISTRY 2022. (Proceedings)*, **2022**, pp. 127-134.
3. Lente, G., **Szabó, R.** Hidrogéntechnológiai kutatások a Megújuló Energiák Nemzeti Labor első évében, *Magy. Kém. Foly.*, **2023**, 129, 87-88.
4. Sabbioni, E., **Szabó, R.**, Siri, P., Cappelletti, D., Lente, G., Bibbona, E. Final nanoparticle size distribution under unusual parameter regimes, *közlésre beküldve*, pre-print: ChemRxiv, **2024**, doi:10.26434/chemrxiv-2024-wh3jv.

Ismeretterjesztő cikk

1. Lente, G., **Szabó, R.** Gyalogos tudomány az Alpok árnyékában, *Magy. Kém. Lapja*, **2024**, 79(1), 12-14.

Poszterek és előadások az értekezés témáján kívül

1. Lente, G., **Szabó, R.** Chiral symmetry breaking in crystallization equilibrium, Mathematics in (bio)Chemical Kinetics and Engineering 2017, May 25-27, 2017, Budapest, Hungary
2. **Szabó, R.**, Lente, G. Chiral symmetry breaking in crystallization equilibrium, Meeting of the Reaction Kinetics and Photochemistry Working Group of the Hungarian Academy of Sciences, November 2-3, 2017, Budapest, Hungary
3. Lente, G., Fursenko, A., **Szabó, R.** Use of the Taylor theorem to predict kinetic curves in an arbitrary mechanism, Mathematics in (bio)Chemical Kinetics and Engineering 2021 (online), October 24-27, 2021, Shanghai, China
4. Kumar, A.K.S., Lente, G., **Szabó, R.** A polynomial-based method to approximate kinetic curves in multistep mechanism, PHYSICAL CHEMISTRY 2022. 16th International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, September 26-30, 2022, Belgrade, Serbia