

**Részletes zárójelentés OTKA 100801**  
**A szupramolekuláris kölcsönhatások szerepe**  
**egy- és többkomponensű szilárd fázisú rendszerek felépítésében**  
**Bombicz Petra**

A homo- és heteromolekuláris kristályrendszerek alkalmazkodó képességének megismerése lehetővé tette szilárd fázisú anyagok szerkezetének, és így fizikai-kémiai tulajdonságainak tudatos befolyásolását. Az intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolásának megvalósításával egy- és többkomponensű rendszerek izostrukturalitását megőriztük, illetve morfortróp és polimorf átalakulást váltottunk ki, királis szétválasztódást értünk el. Kémiai kötést változtattunk irányítottan az ionostól a kovalensig. A projekt eredményeként a szupramolekuláris effektusoknak a molekulák szilárd fázisban való elrendeződésére gyakorolt hatását értettük meg mélyebben. Az így nyert ismereteken keresztül közelebb kerültünk az egyre inkább előre meghatározott tulajdonságú anyagok szisztematikus megtervezhetőségéhez és előállításához.

A projekt kezdeti munkatervében felsorolt vegyületszempontok közül a kalixarén zárványvegyületekkel az előzetes terveknel is gyorsabban, hatékonyabban haladtunk.

Ritkán vizsgált, laterálisan szubsztituált kalixarének konformációs viselkedését és zárványkomplex képzését írtuk le. A laterálisan diszubsztituált kalixarének szintézise önmagában bravúr, Prof Weber és kutatócsoportja végezte. Az általunk végrehajtott szerkezetvizsgálat során feltárt 1,2-alternáló molekulageometria pedig szintén ritkaság, bizonyíték arra nézve, hogy a kristályban fellépő erők elégségesek ahhoz, hogy flexibilis molekulák konformációját befolyásolják. A diszubsztituált, 1,2-alternáló geometriájú rendszerek homológ sorában az aszimmetrikusan / szimmetrikusan diszubsztituált vegyületek finomhangolását valósítottuk meg, megismerve a rendszer alkalmazkodó képességét.

A kutatómunka során olyan kalixarén kristályrendszerekkel dolgoztunk, melyekben sikerült különválasztani a szterikus igények és az elektrosztatikus kölcsönhatások irányító szerepét. A két tényező külön-külön, majd együttes finomhangolásával sikeres lépést tettünk a tudatos kristálytervezés felé. A kristályok szerkezetét, és így fizikai-kémiai tulajdonságait befolyásolni tudtuk, megtartva izostrukturalitásukat vagy morfortróp ill. polimorf átalakulást kiváltva. Az irányított szintézis során új, megváltoztatott tulajdonságú anyagokat sikerült előállítani. A „crystal engineering” kifejezés nyomán bevezettük a szupramolekuláris kölcsönhatások tudatos alakítására a „synthon engineering” kifejezést.

A kalixarén témában korábban megjelent hat cikk után két cikk jelent meg a diszubsztituált kalixarénekről [1, 2]. Az elmúlt 4 évben a kalixarén zárványkomplexek tulajdonságainak finomhangolása területén hat előadás hangzott el (4 külföldön, 1 Bruckner termi előadás, 1 MKE konferencia keretében) [L2, L3, L4, L7, L9, L13], és egy poszter került bemutatásra nemzetközi konferencián [P4]. A témában meghívást kaptunk a brit Royal Society of Chemistry krisztallográfiai folyóirata, a Crystal Engineering Communication (CrystEngComm) Structural Macrocyclic Supramolecular Chemistry című különszámába, melyet 2014-ben, a Krisztallográfia Nemzetközi Évében jelentettek meg. A cikk kiemelt, „highlight” minősítést kapott, és a címlapra került [7].

Munkánkra felfigyelt az ICSU/IUPAC által szervezett CONVINCE projekt (CONcepts and terMIology in Crystal Engineering) (IUPAC Project No 2012-044-1-100), melynek célja a „crystal engineering” területén a megfelelő terminológia kialakítása. Az általunk javasolt „synthon engineering” kifejezést és definícióját (a molekulák elrendeződésének irányítása a szupramolekuláris kölcsönhatásokon keresztül) a bizottság 2015-ös munkaértekezletén megvitatta, használata gyorsan terjed, már száznál is több cikkben fordul elő.

A polimorfoknál kimutatott molekuláris nem-krisztallográfiai elfordulások csak flexibilitásukban korlátozott molekuláknál eredményezhetnek új módosulatokat. Korlátozottan hajlékony, Piedfort-komplexekeket alkotó, 2,4,6-triariloxi-1,3,5-triazin molekulákat vizsgáltunk, melyek nem-krisztallográfiai

elfordulások sorozatával létesítenek homológok (F, Cl, Br, I) és izomerek (orto, meta és para) között morfoftróp kapcsolatot. A morfoftrópia fogalmát Kálmán Alajos vezette be bő egy évtizeddel ezelőtt. Ezen projekt keretében kimutattuk, hogy a morfoftrópia nem-krisztallográfiai elfordulásokra való felbontásának, még korlátozottan merev molekulák esetében is, határt szab a szubsztituensek mérete és a molekulaszimmetria sérülése. Az izostrukturalitás és a morfoftrópia között elválaszthatatlan a kapcsolatot: a szoros illeszkedés mértékének szubsztitúció(k) okozta, 60% alá való csökkenését nem-krisztallográfiai elfordulások, esetleg translációk kompenzálják. A téma egy cikkben [11], és két előadáson [L16, L18] került bemutatásra.

Szerkezeti vizsgálatainkat para-NO<sub>2</sub> és -COOMe, egyúttal különböző meta-szubsztituált biszfenol F származékok molekuláris izometricitásának összehasonlítására is kiterjesztettük az izostruktúrális rendszerek tűrőképességének megismerésére. A szubsztituensek hatását láttuk a konformációra és az illeszkedési mintázatokra. A konformációs vizsgálatainkat kiterjesztettük szubsztituált ε-kaprolaktámokra is. A C2, C6 és N helyzetű szubsztitúciónak a kaprolaktám gyűrű konformációjára gyakorolt hatására voltunk kíváncsiak. -COOMe kapcsolással változtattuk a héttagú gyűrű geometriáját. A diffrakcióval meghatározott, szilárd állapotban megvalósuló konformációt összehasonlítottuk az NMR módszerrel vizsgált, oldatban lévő molekulageometriával. A szintéziseket Freibergben és Oxfordban hajtották végre, a szerkezetvizsgálat Budapesten készült. Az eredményeinket két cikkben és egy konferencia poszteren tettük közzé [5, 8, P3].

A heterociklusos, imidazol tartalmú molekulák biológiai rendszerekben megtalálhatók. Fenilbenzimidazol és származékainak homológ sorával végeztünk kísérleteket a másodlagos kölcsönhatások erősségének finomhangolása és a sztérikus és elektrosztatikus hatások fokozatos, lépcsőzetes változtatása céljából. A vizsgált rendszer különböző típusú másodlagos kölcsönhatások, hidrogénhidak és esetenként halogén kölcsönhatások tanulmányozását tette lehetővé, miközben zárványvegyületei izostruktúrálisak maradnak, ill. a változás egy bizonyos mértékén túl polimorf átalakuláson esnek át. Az eredmények egy poszteren kerültek eddig bemutatásra [P6], publikáció előkészítése folyamatban van.

A gyógyszerhatóanyagok biológiai hasznosulása, oldhatóságának növelése, esetlegesen több hatóanyag egyszerre történő bevitelle a szervezetbe volna megvalósítható kokristály képzésen keresztül. Új, gyakran királis, biológiailag aktív vegyület másodlagos kötésrendszerét igyekeztünk átalakítani kokristály képzéssel, az intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolásán keresztül, s ezáltal a fizikai-kémiai tulajdonságukat megváltoztatni. A kísérleteink során azonban a kokristályok előállítása nehézségekbe ütközött. Egy gyógyszerhatóanyag szerkezetét tudtuk egykristályából meghatározni [14, L17].

A kokristályok előállítására tett erőfeszítéseink során olyan kristályszerkezetek kerültek a figyelmünk középpontjába, melyek bemutatják, hogy az FDA által 2012-ben kiadott kokristály definíció finomításra szorul. A szakmában zajló vitához egy poszter bemutatásával [P1] és két előadás tartásával [L5, L8] járultunk hozzá. A projekt témájából az ECM27 konferencián bemutatott poszter az MTA TTK Kutatóközponti Tudományos Napok poszter díját is elnyerte.

A fémorganikus vegyületek körében a lítium és a foszfor közötti kölcsönhatást vizsgáltuk szisztematikusan olyan sorozatban, melyben az ionos vegyülettől a semleges molekuláig lévő anyagok voltak. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen előállított vegyületek szerkezeti elemzése, a Li és P közötti kölcsönhatás fokozatos változása, szilárd és folyadékállapotban egykristály röntgendiffrakció és NMR módszerekkel történt. Egy cikkben [4] és egy poszteren [P5] mutattuk be az eredményeket.

Eredetileg a kerék-tengely típusú szerves ill. fémorganikus gazdák zárványvegyületeinek szupramolekuláris aspektusait a Pármai Egyetemen együttműködve terveztük vizsgálni. Az olasz csatlakozó pályázatot nem nyertük el. Ezért a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen előállított, „szendvics típusú” komplexek kristályszerkezetét vizsgáltuk. A klórszilolokból előállított η<sup>1</sup>-szilolil-FeCp(CO)<sub>2</sub> komplexek az első Fe-Si kovalens kötésű szilolil komplexek. Szerkezeti vizsgálataink, melyeket az egyetemen elméleti számításokkal is kiegészítettünk, tárta fel, hogy ennek a kötésnek a

nagy stabilitása az oka annak, hogy nem sikerült a vegyületeket szilaferrrocénekké továbbalakítani. A munkát egy cikkben [12] és egy nemzetközi előadásban mutattuk be [L22].

Királis vegyületek másodlagos kölcsönhatásainak, a királis szétválasztódás szupramolekuláris aspektusainak és kristálystabilitásának megértése céljából két rendszert vontunk be vizsgálatainkba. Választottunk egy enantiomer tiszta és racém nitroalkán származékot, a vizsgálatot pordiffrakciós, FTIR, olvadáspont és DSC vizsgálatokkal tettük teljessé [6, L11]. Az  $\alpha$ -metoxifenilecetsav királis és racém kristályában a szupramolekuláris kölcsönhatások rendszere nagyon hasonló, amely megnehezíti a királis szétválasztást. A királis és racém savak, valamint ciklohexiletilaminos diasztereomer sópárok szerkezetének ismeretében biner és terner T-x fázisdiagramok készültek [15, L15].

Az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontjában Pekker Sándorral és csoportjával kezdett a konjugált  $\pi$  elektron rendszerrel bíró gazda-vendég és kokristályos fullerén komplexek szerkezetvizsgálatának elővizsgálatai során bebizonyosodott, hogy egykristály előállítása a közel szférikus és erősen forgó rendszerből meglehetősen nehéz. Időközben az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontjában egy új egykristály diffraktométert installáltak. Ezért ezt a kutatási irányt leállítottuk.

Kutatásunk a szupramolekuláris kölcsönhatásoknak az egy- és többkomponensű rendszerek felépítésében betöltött szerepét vizsgálta különböző vegyületcsaládokban: kalixarénekben, triazin származékokban, biológiailag aktív szerves valamint fémorganikus vegyületekben, királis vegyületek esetén. Az OTKA által támogatott kutatás eredményei felkeltették a szakemberek figyelmét. Ezt bizonyítja a fent már említett meghívás a Crystal Engineering Communication folyóirat Structural Macrocyclic Supramolecular Chemistry című különszámába [7]. A Nemzetközi Krisztallográfiai Unió által 2014-ben alapított IUCrJ folyóiratot a krisztallográfiai újságok legfőbb fórumának szánják. Innen érkezett a felkérés, hogy „Szupramolekuláris kölcsönhatások a szilárd fázisban” címmel összefoglaló cikket készítsünk [10], benne a bevezetést, összefoglalást és a polimorfiaival foglalkozó részt írtam meg. A Crystallographic Reviews folyóirat megkeresésére készült, megjelenés alatt lévő összefoglaló cikk [16] az elmúlt években gyűjtött tapasztalatokra támaszkodva az izostrukturalitás és a polimorfia közötti határvonal létezésének kérdését feszegeti, az izostrukturalitás és a polimorfia megjelenésében a szupramolekuláris kölcsönhatások és a szimmetriák szerepét elemzi. Ez a munka kerül még bemutatásra az ICCOSS XXIII konferencián meghívott előadás formájában 2017-ben [L23].

Az OTKA által támogatott kutatásról előadásban Németországban, Franciaországban, Svájcban, Finnországban, Dél-Afrikában és Magyarországon, poszteren Kanadában, az Egyesült Királyságban, Németországban, Norvégiában, Horvátországban és Magyarországon számoltunk be. Két konferencián elnökként vezethettem mikroszimpóziumot a témában: Norvégiában „Többkomponensű kristályok tervezése, szerkezete és szerepe”, Kanadában „Szupramolekuláris kölcsönhatások a szilárd fázisban” címmel. Szintén a fenti kutatómunka elismerése, hogy az Európai Krisztallográfiai Szövetség „Molekuláris szerkezet és kémiai tulajdonságok” bizottságát (SIG13) 2015. óta társelnökként vezethetem.

Az ENSz a 2014-es évet a Krisztallográfia Nemzetközi Évének nyilvánította. Az ünnepi év lehetőséget teremtett számos tudományos, valamint ismeretterjesztő előadás tartására [L1, L6, L10], cikkek megjelentetésére [3, 9, 13], melyekben az OTKA keretében végzett kutatások is szerepeltek.

Az OTKA pályázati forrás tette lehetővé részleges vagy teljes támogatás révén, hogy a kutatási eredményeket nemzetközi és hazai konferenciákon bemutathassuk: 2012 Indaba7 Skukuza Dél-Afrika (vezető kutató); 2013 ECM28 Warwick UK (vezető kutató); 2014 IUCrXXIII Montreal Kanada (vezető kutató); 2015 ECM29 Rovinj Horvátország (vezető kutató, Holczbauer Tamás, May Nóra); 2016 ECM30 Basel Svájc (vezető kutató); valamint hogy az MTA Munkabizottsági üléseken, és az MKE Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztálya éves kerekasztal konferenciáin csoportunk részt vehessen.

Hallgatók bevonásával igyekeztünk a kutatómunkát hatékonyabbá tenni, s egyben hozzájárulni a jövő generációjának oktatásához, krisztallográfiai ismereteinek bővítéséhez. A kutatómunkába több hallgatót vontunk be kokristályok előállítására, kristályok tesztelésére, diffrakciós mérések és értékelésük területén: Lovász Ádám BME témalabor, Tóth Viola Róza PhD, Pogány Péter postdoc, Gál Tamás PhD munka keretében vett részt a feladatok elvégzésében.

Az elmúlt években célunk volt a szilárd anyagok, egy- és többkomponensű rendszerek termikus viselkedése, fázisátalakulások, bomlási folyamatok tanulmányozását lehetővé tevő infrastruktúra bővítése. 2012-ben a Chinoin-Sanofi Zrt kutatási részlegének felszámolása során lehetőség nyílt a gyártól egy DSC készülék megvásárlására, mely alkalmas egyaránt hűtésre és fűtésre (-80°C - +350°C). Amíg ennek pénzügyi háttere nem tisztázódott, nem akartuk a fűthető tárgyasztal beszerzését megkezdeni. A DSC készülék értékét végül úgy állapították meg, hogy azt, valamint az áttelepítés költségét Prof Czugler Mátyás a K75869 számú OTKÁ-ból fedezni tudta. A jelen projektben tervezett mikroszkópra szerelhető hűthető-fűthető (-180°C - + 350°C) tárgyasztal beszerzését a második projektévben indítottuk el. A projektpályázat beadása után tapasztalt áremelkedés miatt a tárgyasztal árát megosztva Czugler Mátyás K75869 számú OTKÁ-jából (1 117 219 Ft) és a jelen OTKA (4 156 577 Ft) költségkeretéből fedeztük. Az MTA Természettudományi Kutatóközpont költözése miatt a tárgyasztal installálására már nem került sor a Pusztaszeri úti telephelyen, hanem azt 2014. márciusában az új légymányosi épületben helyezték üzembe. A pénzügyi tervben szereplő egyéb beruházások (számítógép és röntgenső beszerzése) és külföldi iskolán való részvétel az árak emelkedése miatt már nem tudott megvalósulni. A két beruházás a munkavégzés fenntarthatósága érdekében kutatóközponti támogatással megtörtént. A megvalósult beruházás jelentős infrastrukturális fejlődés a laboratórium életében.

Az MTA Természettudományi Kutatóközpont költözése a 2014-es év meghatározó eseménye volt. Az egykristály röntgendiffraktométer költözése a fogadó laboratórium kialakításával együtt kilenc hónapot, a 2014. januárjától szeptember végéig tartó időszakot vette igénybe. Ez alatt mérni és hallgatót fogadni nem tudtunk. Emiatt kértük a kutatási projekt fél évvel való meghosszabbítását, kiterjesztését 2016. augusztus 31-ig.

A kutatási projektet két kutató kezdte: Bombicz Petra és Kálmán Alajos; a projekt utolsó évében csatlakozott két kutató: Holczbauer Tamás és May Nóra. A projekt teljes időtartama alatt az FTE érték így 5,11-ről 6,65-re nőtt. A kutatók csatlakozását a kutatócsoport átszervezése tette lehetővé. A szerződmódosítás a kérelem pozitív elbírálásakor megtörtént.

A projekt keretében megvalósult kutatás a szupramolekuláris kölcsönhatásoknak, és egyben ezeknek a szilárd fázisban a molekulák elrendeződésére gyakorolt hatásának mélyebb megértését tették lehetővé. Ennek a gyógyszer-, a biológiai-, kémiai- és anyagtudományokban egyaránt jelentősége van. Ezek a kutatások betekintést engedtek számos kémiai folyamat mechanizmusába, mint a molekuláris felismerés, zárványképzés, királis megkülönböztetés stb., hozzájárulnak a tudatos kristálytervezéshez, kristályszerkezet jósláshoz, megkívánt tulajdonságú anyagok előállíthatóságához. Az OTKA projekt keretében elért eredményekre alapozva további kutatómunka építhető.

A projekt résztvevői köszönetüket fejezik ki az NKFIH / OTKA hivatalnak a támogatásért.

## Az OTKA 100801 projekt témájában megjelent publikációk, előadások és poszterek

### Publikációk:

1. Conrad Fischer, Petra Bombicz,\* Wilhelm Seichter, Felix Katzsch, Edwin Weber:  
Bridge-disubstituted calix[4]arenes in the rare 1,2-alternate conformation - Control of the inclusion behaviour depending on the bridge substituents.  
*Crystal Growth and Design*, 12, 2445-2454, 2012.
2. Conrad Fischer, Petra Bombicz, Wilhelm Seichter, Edwin Weber:  
Finetuning of packing architecture: symmetrically bridge-disubstituted tetramethoxycalix[4]arenes  
*Structural Chemistry*, 24, 535-541, 2013.
3. Bombicz Petra,\* Kálmán Alajos:  
A 100 éves röntgendiffrakció a gyógyszerkutatásban.  
*Magyar Kémiai Folyóirat*, 119(1), 10-15, 2013.
4. Ewald Sattler, Eberhard Matern, Alexander Rothenberger, Alexander Okrut, Petra Bombicz, Ignacio Fernández, Ilona Kovács:  
From Ionic to Neutral Species: Syntheses, X-ray Crystallographic and Multinuclear NMR Spectroscopic Studies of Li...P(SiMe<sub>3</sub>)-PtBu<sub>2</sub> and its Solvent Complexes  
*European Journal of Inorganic Chemistry*, 221-232, 2014.
5. Tobias Gruber, Robert Nestler, Wilhelm Seichter, Petra Bombicz:  
Crystal Structures and Isometricity Comparison of Bisphenol F Derivatives  
*Journal of Molecular Structure*, 1056-1057, 319-325, 2014.
6. Katalin Gönczi, Veronika Kudar, Zsuzsa Jászay, Petra Bombicz, Ferenc Faigl, János Madarász:  
Solid state structural relation and binary melting phase diagram of (S-) and racemic 2-(2-nitro-1-phenylethyl)-1,3-diphenyl-propane-1,3-dione.  
*Thermochimica Acta*, 580, 46-52, 2014.
7. Petra Bombicz,\* Tobias Gruber, Conrad Fischer, Edwin Weber, Alajos Kálmán:  
Fine tuning of crystal architecture by intermolecular interactions: synthon engineering  
*CrystEngComm*, 16 (18), 3646 - 3654, 2014. invited paper, highlight paper, cover page
8. Tobias Gruber, Amber L. Thompson, Barbara Odell, Petra Bombicz, Christopher J. Schofield:  
Conformational studies on substituted ε-caprolactams by X-ray crystallography and NMR spectroscopy.  
*New Journal of Chemistry*. 38(12), 5905-5917, 2014.
9. Bombicz Petra\*:  
Kémiai Kristallográfia: Kristály Építészet.  
*Magyar Kémiai Folyóirat*. 120(4), 171-175, 2014.
10. Giuseppe Resnati, Elena Boldyreva, Petra Bombicz,\* Masaki Kawano:  
Supramolecular Interactions in the Solid State  
*IUCrJ*, 2, 675-690, 2015. Feature article
11. Petra Bombicz,\* Nikoletta B. Báthori, Alajos Kálmán:  
Non-Crystallographic Symmetries Observed Between the Isostructural Groups of 2,4,6-triaryloxy-1,3,5-triazines  
*Structural Chemistry*, 26, 1611-1619, 2015.
12. Csaba Fekete, Réka Mokrai, Petra Bombicz, László Nyulászi, Ilona Kovács:  
η<sup>1</sup>-silolyl-FeCp(CO)<sub>2</sub> complexes. Is there a way to sila-ferrocene?  
*Journal of Organometallic Chemistry*, 199-800, 291-298, 2015.
13. Bombicz Petra\*:  
Gyógyszeralapanyagok kristallográfiai vizsgáló módszerei.  
*Gyógyszerészet*. 60. 133-139. 2016.
14. Gyula Tamás Gál, Nóra Veronika May, Petra Bombicz\*:  
Crystal structure of S-3-(2-Methoxy-10-phenothiazinyl)-N,N,2-trimethyl-propanamine maleate.  
*Acta Cryst.* E72, 612-615, 2016.

**15.** Amit D. Zodge, Petra Bombicz, Edit Székely, György Pokol, János Madarász:  
Structural and DSC Study on Resolution of 2-Methoxy-2-phenylacetic Acid with Chiral 1-Cyclohexylethylamines through Gas-Antisolvent Precipitation  
*Thermochimica Acta*, 2016, közlésre elfogadva

**16.** Petra Bombicz\*:

The way from isostructurality to polymorphy. Where are the borders? The role of supramolecular interactions and crystal symmetries.

*Crystallography Reviews*, közlésre elfogadva

#### **Előadások:**

1. Bombicz Petra, Kálmán Alajos:  
A 100 éves röntgendiffrakció a gyógyszerkutatásban.  
Gyógyszerkutatás Műszeres Módszerei. A Kémiai Tudományok Osztályának az MTA 2012. évi rendes közgyűléséhez kapcsolt tudományos ülészsaka.  
2012. május 9. Meghívott előadás.
2. Petra Bombicz, Tobias Gruber, Conrad Fischer, Edwin Weber:  
Tailor Made Calixarenes.  
Indaba7 Insight from structures. Skukuza, 2-7 September 2012. South Africa.
3. Bombicz Petra:  
Crystal engineering: fine tuning of intermolecular interactions.  
Extraordinary double bill seminar.  
University of Cape Town. South Africa, 27 Aug 2012. Invited lecture
4. Bombicz Petra:  
Supramolecular aspects in structural chemistry.  
Free State University, Bloemfontein, South Africa, 30 Aug 2012. Invited lecture.
5. Bombicz Petra, Petra Smie, Ewald Sattler:  
Minek nevezzetek: egykomponensű ko-kristály?  
MTA Szervetlen és Fémorganikus Kémiai Munkabizottság és az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság Közös Munkabizottsági Ülése. 2012. október 12–14. Szedres, Magyarország.
6. Bombicz Petra, Kálmán Alajos:  
100 éves a röntgendiffrakció. Alkalmazások a modern gyógyszerkutatásban.  
MKE Kristályosítási szakosztály Őszi Kerekasztal Konferencia, Balatonszemes, 2012. október 26-27.  
Abstract p 11.
7. Petra Bombicz:  
Chirality and polymorphy in crystals and co-crystals of pharmaceutical interest.  
Technische Universität Bergakademie Freiberg, Frühjahrssymposium, 22 March 2013. Invited lecture.
8. Bombicz Petra:  
A kokristály definíciója.  
MKE Kristályosítási szakosztály Őszi Kerekasztal Konferencia, Balatonalmádi, 2013. szept. 6-7.  
Abstract pp 13-14.
9. Bombicz Petra:  
Az intermolekuláris kölcsönhatások finomhangolása: úton a tudatos kristálytervezés felé.  
Az MTA Szerves és Biomolekuláris Kémiai Bizottság „Bruckner termi előadás” sorozata.  
2013. szeptember 27. ELTE Kémiai Intézet, Bruckner terem. Meghívott előadás
10. Bombicz Petra:  
Kémiai krisztallográfia: kristály építéset.  
A fizikai, a kémiai és a biológiai tudományok osztályának közös tudományos ülése.  
A krisztallográfia nemzetközi éve: 2014. MTA, 2014. május 8.

11. György Pokol, János Madarász, Edit Székely, Béla Simándi, György Bánsághi, Imre M. Szilágyi, Petra Bombicz:  
Thermal analysis in the development of optical resolutions based on supercritical fluid technologies.  
11th Eur. Symp. on thermal Analysis and Calorimetry. 2014. Espoo Finland 17-21 August 2014.
12. Bombicz Petra:  
Izostrukturalitás – morfofotrópia – polimorfia és dezmotrópia.  
MTA AMMB, Mátrafüred, 2015. február 27-28.
13. Bombicz Petra:  
Tudatos kristálytervezés a szupramolekuláris kölcsönhatások felhasználásával.  
MKE Kristályosítási és gyógyszerformulálási szakosztály szeminárium. 2015. 03. 12. MTA TTK.
14. Bombicz Petra:  
Gyógyszeralapanyagok krisztallográfiai vizsgálati módszerei.  
Gyógyszeranalitikai Továbbképző Kollokvium. Balatonfüred. 2015. 04. 9-11.
15. Amit Zodge, Márton Kőrösi, Máté Tárkányi, Dávid Hunyadi, Petra Bombicz, János Madarász, Imre Miklós Szilágyi, Tamás Sohajda and Edit Székely:  
Enantioselective diastereomeric salt precipitation of 2-Methoxyphenylacetic acid using (R)-1-Cyclohexylethyl-amine with supercritical carbon dioxide.  
10<sup>th</sup> European Congress of Chemical Engineering , 27 Sept - 1 Oct 2015, Nice, France.
16. Petra Bombicz, Nikoletta B. Báthori, Alajos Kálmán:  
Symmetry-controlled rearrangements in Piedfort Units (PU) of 2,4,6-triaryloxy-1,3,5-triazines.  
Athene's Chemistry, international conference.  
Budapest University of Technology and Economics, Budapest, 27<sup>th</sup> Nov 2015. Invited lecture.
17. Gál Gyula Tamás, May Nóra Veronika, Holczbauer Tamás, Bombicz Petra:  
Gyógyszerhatóanyagok szerkezetének vizsgálata egykristály-röntgendiffrakcióval.  
I. Debreceni Röntgendiffrakciós Kerekasztal Konferencia. 2016. január 20. Debrecen.
18. Bombicz Petra, Báthori Nikoletta, Kálmán Alajos:  
Piedfort egységet alkotó 2,4,6-triariloxi-1,3,5-triazin származék kristályok szerkezeti összefüggései a rácsszimmetriák tükrében  
I. Debreceni Röntgendiffrakciós Kerekasztal Konferencia. 2016. január 20. Debrecen.
19. Bombicz Petra, Holczbauer Tamás, Gál Gyula Tamás, May Nóra:  
Kristályosodás – magyarázatok a szerkezet ismeretében.  
MKE Kerekasztal, Balatonszemes, 6-7 May 2016. Abstract book p 15.
20. Bombicz Petra:  
Az egykristály röntgendiffrakció alkalmazása a komplexek szerkezetkutatásában.  
MTA Komplexkémiái Munkabiz, Komplexkémiái Kollokvium Balatonvilágos, 2016. máj. 30 – jún. 1.
21. Bombicz Petra:  
Az egykristály röntgendiffrakció alkalmazása szerves molekulák és gyógyszerhatóanyagok szerkezetkutatásában.  
MTA Szerves- és gyógyszeranalitikai Munkabizottság ülése. Budapest, MTA Székház, 2016. jún. 28.
22. Petra Bombicz, Csaba Fekete, Réka Mokrai, László Nyulászi, Ilona Kovács:  
Silolyl-FeCp complexes: is there a way to sila-ferrocene?  
30<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting. Basel, 28. August – 2 September 2016.  
*Acta Cryst.* A72, s124, 2016.
23. Petra Bombicz:  
Is there a border between isostructurality and polymorphism?  
23<sup>rd</sup> International Conference on the Chemistry of the Organic Solid State.  
ICCOSSXXIII. Stellenbosch, South Africa, 2-7 April 2017. Invited Lecture.

**Poszterek:**

1. Petra Bombicz, Petra Smie, Ewald Sattler:  
Cocrystal constructed of one component?  
27<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting. August 6-11, 2012. Bergen, Norway.  
*Acta Cryst.* A68, s232, 2012.
2. Petra Bombicz, Petra Smie, Ewald Sattler:  
Cocrystal constructed of one component?  
Kutatóközponti Tudományos Napok. MTA KK. Budapest, 27-29 November 2012.
3. Tobias Gruber, Robert Nestler, Wilhelm Seichter, Petra Bombicz:  
Crystal Structures and Isometricity Comparison of Bisphenol F Derivatives.  
21<sup>st</sup> Annual Conference of the German Crystallographic Society, Freiberg, 19-22. March 2013.
4. Petra Bombicz, Conrad Fischer, Wilhelm Seichter, Edwin Weber:  
Fine tuning of the inclusion behaviour of calixarenes depending on the bridge substituents.  
28<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting. August 25-30, 2013. Warwick, UK.  
*Acta Cryst.* A69, s548, 2013.
5. Petra Bombicz, Ewald Sattler, Ilona Kovács, Alexander Rothenberger, Alexander Okrut:  
From Neutral to Ionic Species: Studies of Li...P(SiMe<sub>3</sub>)-PtBu<sub>2</sub> Complexes.  
XXIIIth Congress and General Assembly of IUCr. August 5-12, 2014. Montreal, Canada.  
*Acta Cryst.* A70, C640, 2014.
6. Petra Bombicz, Gyula Tamás Gál, Ádám Lovász, Nóra V. Nagy, Tamás Holczbauer:  
Intermolecular interactions of benzimidazole derivatives.  
29<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting. Rovinj, Horvátország, 23-28. August 2015.  
*Acta Cryst.* A71, s467, 2015.