

## ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

**Όνομα :** Γεώργιος Α. ΣΠΥΡΟΥΛΙΑΣ

**Ημερομηνία Γέννησης :** 16 Οκτωβρίου 1965, Θεσσαλονίκη

**Οικογενειακή Κατάσταση :** Έγγαμος (1 παιδί)

**Διεύθυνση:** Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Πατρών,  
Πανεπιστημιούπολη- Ρίον, 26504 Πάτρα  
**Τηλ. :** 2610.962.350, -1, -2 **Fax :** 2610.997.693  
**e-mail :** [G.A.Spyroulias@upatras.gr](mailto:G.A.Spyroulias@upatras.gr)  
[www.bionmr.upatras.gr](http://www.bionmr.upatras.gr)

**Διεύθυνση Κατοικίας :**

Αγίας Τριάδος 3  
Ψαθόπυργος Αχαΐας  
26505 Πάτρα  
**Τηλ:** 2610.932.133

**Εκπαίδευση :**

- Σεπτέμβριος 1989 : **Πτυχίο Χημείας**, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης.
- Φεβρουάριος 1992 : **Μεταπτυχιακός Τίτλος Εξειδίκευσης στην Χημεία (Master)**, « Βιοανόργανη Χημεία Ενώσεων Συναρμογής », Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης.
- Φεβρουάριος 1995 : **Διδακτορική Διατριβή στην Χημεία (Ph.D.)**, « Πορφυρινικά Σύμπλοκα της Σειράς των Λανθανιδών με π-π Αλληλεπιδράσεις. Σύνθεση και Φυσικοχημικός τους Χαρακτηρισμός », Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης.

**Τρέχουσα Επαγγελματική Κατάσταση :**

- Σεπτέμβριος 2014 : **Καθηγητής**, Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Πατρών  
Σχεδιασμός/Προσομοίωση Βιοδραστικών Μορίων Φαρμακευτικής Σημασίας

**Ερευνητική & Επαγγελματική Εμπειρία :**

- Ιούλιος 1987 : **«ΕΚΟ» Ανώνυμος Εταιρεία (2 μήνες)**.  
Τομέας Ποιοτικής Ανάλυσης, Τμήμα Χημικών Διεργασιών, Θεσσαλονίκη.
- Μάιος 1995 : **Μικρής Διάρκειας Μεταδιδακτορική Έρευνα** (Συνεργάτης : Καθ. I. Bertini)  
- FLORMARPARM Large Scale Facility Network/ Σύμβαση N° : ERBCHGECT 940060.  
Università degli Studi di Firenze, **Firenze, Italia**.
- Ιούνιος 1995 : **Μικρής Διάρκειας Μεταδιδακτορική Έρευνα** (Συνεργάτης : Καθ. R. Poilblanc)  
- Διμερής Συνεργασία Ελλάδος-Γαλλίας « PLATON » Πρόγραμμα : REF. PAI/GRC 9508.  
Laboratoire de Chimie de Coordination, C.N.R.S, **Toulouse, France**
- Οκτώβριος 1995 : **Μεταδιδακτορική Έρευνα** (Συνεργάτης : Dr. Daniel Mansuy)  
- Human Capital & Mobility Network/ Σύμβαση N° : ERBCHRXCT 9460492.  
Université René Descartes, Paris V, C.N.R.S. URA 400, **Paris, France**.
- Ιανουάριος 1997 : **Μεταδιδακτορική Έρευνα** (Συνεργάτης : Καθ. Ivano Bertini)  
- NMR PARABIO Large Scale Facility Network/Σύμβαση N° : ERBFMGECT 950033.  
- Marie-Curie Research Grant (B30-24 months)/Σύμβαση N° : ERBFMBICT 972477.  
- Training & Mobility of Researchers Fellowship/ Σύμβαση N° : FMGE-CT98-0107.  
Università degli Studi di Firenze & CERM, **Firenze, Italia**.
- Μάιος 2000 : **Μεταδιδακτορική Έρευνα** (Συνεργάτης : Καθ. Παύλος Κορδοπάτης)  
- Marie Curie Research Grant (R-12 Months)/ Contract N° : HPMF-CT-1999-00344.  
Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Φαρμακευτικής, **Πάτρα**.
- Μάιος 2001 : **Συνεργαζόμενος Ερευνητής** (Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Πατρών)  
- Υποτροφία Μεταδιδακτορικού Συνεργάτη «Κ. Καραθεοδωρή» (Νοέμβριος 2001/24 μήνες).
- Αύγουστος 2003 : **Επίκουρος Καθηγητής**, Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Πατρών  
Σχεδιασμός/Προσομοίωση Βιοδραστικών Μορίων Φαρμακευτικής Σημασίας
- Δεκέμβριος 2009 : **Αναπληρωτής Καθηγητής**, Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Πατρών

### Ερευνητικές Δραστηριότητες και Ενδιαφέροντα:

- **Σχεδιασμός/Προσομοίωση Βιοδραστικών Μορίων και μελέτες της Σχέσης Δομής-Δραστικότητας** σε πρωτεΐνες και πεπτίδια (ορμόνες όπως Αγγειοτενσίνη, Βραδυκίνη, Ωκυτοκίνη, Σωματοστατίνη, LHRH, και επίτοποι των Myelin Basic Protein, HIV-1 gp120 κ.α.).
- **NMR Διαμορφωτική Ανάλυση Βιομορίων και Βιομοριακών Συμπλόκων σε Διάλυμα**, όπως μεταλλοπρωτεΐνες (κυτοχρώματα, καλμοδουλίνη, Καταλυτικά Κέντρα Zn-μεταλλοπρωτεασών, E3 λιγάσες ουβικιτίνης κ.λ.π.), πεπτίδια, σύμπλοκα πρωτεϊνών-πεπτιδίων (καλμοδουλίνη-sk2-πεπτίδια, CCR5-V3 gp120 πεπτίδια, καταλυτικά κέντρα ενζύμων με υποστρώματα κ.λ.π.).
- **Προσεγγίσεις στην Δομική Βιοπληροφορική** για την προσομοίωση 3D δομών βιομορίων, την μελέτη αλληλεπίδρασης πρωτεϊνών-πρωτεϊνών/πεπτιδίων μέσω μοριακής δυναμικής και προσομοίωσης σύμπλεξης, την αναζήτηση βιοδραστικών μορίων μέσω *in silico* σχεδιασμού και ανάπτυξης νέων μορίων και μελέτη της συγγένειας δέσμευσής τους (virtual screening) κ.λ.π.
- **Μοριακή Βιολογία** για την συστηματική μελέτη των κατάλληλων συνθηκών έκφρασης, εμπλουτισμού και απομόνωσης πρωτεϊνών, εμπλουτισμένες σε <sup>15</sup>N και <sup>13</sup>C για δομικές μελέτες μέσω Φασματοσκοπίας NMR.

### Υποτροφίες και Βραβεία :

- « **Ειδικός Μεταπτυχιακός Υπότροφος - Ε.Μ.Υ** », Υποτροφία Μεταπτυχιακών Σπουδών του Υπουργείου Εθνικής Παιδείας και Θρησκευμάτων ΥΠΕΠΘ (1/11/1989-31/10/1994).
- « **ERASMUS** » Υποτροφία (ICP-92-G-2002/13. U Paul Sabatier, Toulouse, **FRANCE** ; 11/1992-4/1993),).
- « **DIGITAL CORPORATION** » Βραβείο Μεταπτυχιακών Σπουδών, Πανεπιστήμιο Κρήτης (7/1993).
- « **CLAUDE BERNARD Fondation** » (U René Descartes, **Paris, FRANCE** ; 11-12/1996).
- « **PLATON Program** » Διακρατική Επιστημονική Συνεργασία **ΕΛΛΑΔΑΣ-ΓΑΛΛΙΑΣ**, REF. PAI/GRC 9508. **1994-1995**, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας & L.C.C., C.N.R.S, Toulouse, **FRANCE**.

### Συμμετοχή σε Ερευνητικά Προγράμματα (Μεταδιδακτορική Έρευνα) :

1. **Human Capital & Mobility**, Université René Descartes, Paris V, Laboratoire De Chimie et Biochimie, C.N.R.S. URA 400, Paris, **FRANCE** :
  - Σύμβαση N° : ERBCHRXCT 9460492, “*Transition Metals In Supramolecular Catalysis*”, **1995-1996**.
2. **Training & Mobility of Researchers**, Università degli Studi di Firenze, Laboratorio di Chimica Inorganica e Bioinorganica, Florence, **ITALY**:
  - Σύμβαση N° : CHRX-CT 940540, “*Structure –Function Relationships in Haemoproteins*”, **1997**.
  - Σύμβαση N° : FMGE-CT98-0107, “*Development of NMR Instrumentation and Software to Achieve Excitation and Detection of Large Bandwidths and Dipolar Couplings in High Resolusion Spectra at High-Field*”, **2000**.

### Έγκριση Προτάσεων για Χρήση Μεγάλης Κλίμακας Ερευνητικού Εξοπλισμού :

1. **FLORMARPARM Large Scale Facility** - Σύμβαση N° : ERBCHGECT 940060. **1995**, Università degli Studi di Firenze, Laboratorio di Chimica Inorganica e Bioinorganica, Florence, **ITALY**.
2. **NMRPARABIO Large Scale Facility** - Σύμβαση N° : ERBFMGECT 950033. **1997**, Università degli Studi di Firenze, Laboratorio di Chimica Inorganica e Bioinorganica, Florence, **ITALY**.
3. **NMRPARABIO Large Scale Facility** - Σύμβαση N° : HPRI-CT-1999-00009. **2000-2003**, Università degli Studi di Firenze, Laboratorio di Chimica Inorganica e Bioinorganica, Florence, **ITALY**.
4. **EU-NMR Access to Large Scale Infrastructure** – Σύμβαση N° : RII3-026145. **2008-2010**, Center of Magnetic Resonance (**CERM**), Florence, **ITALY** & RALF-NMR, Centre de Resonance Magnétique Nucléaire à Très Hauts Champs (**CRMN**) in Lyon, **FRANCE**.

### Ανταγωνιστικά Ερευνητικά Προγράμματα :

- 1. Marie Curie Research Training Grant**, Università degli Studi di Firenze, Laboratorio di Chimica Inorganica e Bioinorganica, Florence, **ITALY**:
  - Σύμβαση N° : ERBFMBICT 972477, *"NMR Spectroscopy to study the factors controlling the folding/unfolding process in Paramagnetic Metalloproteins"*, **1997-1999**.
- 2. Marie Curie Research Grant**, Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Φαρμακευτικής
  - Σύμβαση N° : HPMF-CT-1999-00344, *"NMR Structural Studies of Chemically Modified c-Cytochromes as a probe of Protein Folding Pathways"*, **2000-2001**.
- 3. «Κ. Καραθεοδωρή» Ερευνητικό Πρόγραμμα Μεταδιδακτορικών Συνεργατών**, Επιτροπή Ερευνών, Πανεπιστήμιο Πατρών
  - Πρόγραμμα No 2790, *"Συμβολή στην Διερεύνηση του Συστήματος Ρενίνης-Αγγειοτενσίνης"*, **2001-2003**.
- 4. EMBO Short-term Research Grant**, Center of Magnetic Resonance, Florence, **ITALY**.
  - Σύμβαση N° : ASTF 53-2003, *"NMR Structure Elucidation of Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE) Catalytic Sites and Their Complexes With Angiotensin-I"*, **2003**.
  - Σύμβαση N° : ASTF 99-2004, *"Mapping the Contact Interface of HIV gp120 V3 and CD4+ T-Cell CCR5 N-terminal Peptides through NMR Spectroscopy : Implications for HIV Inhibitors Design"*, **2004**.
- 5. IKYDA Διακρατική Επιστημονική Συνεργασία ΕΛΛΑΔΑΣ-ΓΕΡΜΑΝΙΑΣ 2003-2005**, Πανεπιστήμιο Πατρών & University of Freiburg, **GERMANY**, Επιστημονικός Υπεύθυνος
  - *"Interaction between Calmodulin and a Cam Binding Peptide of SK2 Potassium Channels by NMR"*, **2003-2006**.
- 6. «ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ» Ερευνητικό Πρόγραμμα** (Υπουργείο Εθνικής Παιδείας & Θρησκευμάτων), Πανεπιστήμιο Πατρών, Συνεργαζόμενος Ερευνητής
  - *«Δομική Μελέτη ανασυνδυασμένων τμημάτων εξωκυττάρων περιοχών του Υποδοχέα της Ακετυλοχολίνης»*, **2004-2005**.
- 7. EQUAL/e-ΠΙΜΕΝΩ Πρόγραμμα** (Υπουργείο Απασχόλησης & Κοινωνικής Προστασίας), Πανεπιστήμιο Πατρών, Συνεργαζόμενος Ερευνητής – Αναπληρωτής Ιδρυματικός Υπεύθυνος,
  - *«Ενίσχυση των Δεξιοτήτων ατόμων με Νευρομυϊκές Παθήσεις μέσω ενός Προγράμματος Εκπαίδευσης από Απόσταση»*, **2005-2008**.
- 8. Πρόγραμμα Ενίσχυσης Ερευνητικού Δυναμικού - "ΠΕΝΕΔ 2003"** (ΓΓΕΤ, Υπουργείο Ανάπτυξης), Πανεπιστήμιο Πατρών, Συνεργαζόμενος Ερευνητής
  - *«Μελέτη της σχέσης δομής-δράσης του αυξητικού παράγοντα πλειοτροπίνη για τον προσδιορισμό της μικρότερης πεπτιδικής δομής με αντικαρκινική δράση»*, **2005-2008**.
- 9. Spanish Ministry of Education and Science Research Grant**, Universidad Miguel Hernández, Alicante, **SPAIN** & Πανεπιστήμιο Πατρών, Συνεργαζόμενος Ερευνητής
  - Σύμβαση N°: CTQ2005-00360/BQU, *"Caracterizacion Mediante Resonancia Magnetica Nuclear del Extremo C-terminal del Receptor Vaniloide Y de Proteinas Helice-Lazo-Helice Implicadas en el Crecimiento del Sistema Neuronal"*, **2006-2008**.
- 10.«INNO-FARM – Κοινοπραξίες Έρευνας & Τεχνολογικής Ανάπτυξης Δυτικής Ελλάδας»** (ΓΓΕΤ, Υπουργείο Ανάπτυξης), Πανεπιστήμιο Πατρών, Συνεργαζόμενος Ερευνητής
  - *«Σχεδιασμός, Ανάπτυξη και Θεραπευτική Αξιοποίηση νέων Βιομορίων»*, **2006-2008**.
- 11.«Κοινό Ερευνητικό & Τεχνολογικό Πρόγραμμα ΕΛΛΑΔΑΣ-ΙΣΠΑΝΙΑΣ»**, (ΓΓΕΤ, Υπουργείο Ανάπτυξης), Πανεπιστήμιο Πατρών, Επιστημονικός Υπεύθυνος
  - *«Αποσαφήνιση των αμινοξέων που ενέχονται στη σταθερότητα της Blue Copper πρωτεΐνης Rusticyanin και στη μεταφορά ηλεκτρονίων»*, **2005-2008**.
- 12."FP6-LIFESHEALTH-2005-1.2.5-2. Life Sciences, genomics & biotechnology for health"** (European Union), Πανεπιστήμιο Πατρών, Συνεργαζόμενος Ερευνητής
  - Integrated Project, Contract N° LSHB-CT-2007-037592, *"Applied Venomics of the Cone Snail Species Conus Consors for the Accelerated, Cheaper, Safer and More Ethical Production of Innovative Biomedical Drugs (CONCO)"*, [www.conco.eu](http://www.conco.eu), **2007-2011**.

- 13. «Κ. Καραθεοδωρή» Ερευνητικό Πρόγραμμα**, Πανεπιστήμιο Πατρών, Επιστημονικός Υπεύθυνος  
 - Πρόγραμμα Νο C.181, «*NMR Δομική Μελέτη των HDM2 & HDMX Ring Finger Τομέων ως Παραγόντων ρύθμισης της Ογκο-Κατασταλτικής Πρωτεΐνης p53*», **2007-2010**.
- 14. «FP7-HEALTH-2007-2.1.1-5. Structure-function analysis of membrane-transporters and channels for the identification of potential drug target sites»**, Πανεπιστήμιο Πατρών, Ε.Υ. Ερευνητικής Ομάδας Π. Πατρών  
 - CP-Collaborative Project, Contract N° HEALTH-F4-2008-202088, «*NeuroCypres - Neurotransmitter Cys-loop receptors: structure, function and disease*», [www.neurocypres.eu](http://www.neurocypres.eu), **2008-2011**.
- 15. «FP7-INFRA-2008-1.1.1. Capacities – Research Infrastructures»**, Ε.Υ. Ερευνητικής Ομάδας Π. Πατρών  
 - Integrated Activities, Contract N° CP-CSA-Infra-228461, «*EAST-NMR - Enhancing Access and Services To East European users towards an efficient and coordinated pan-European pool of NMR capacities to enable global collaborative research and boost technological advancements*», [www.eastnmr.eu](http://www.eastnmr.eu), **2009-2012**.
- 16. Ενδοπανεπιστημιακά Δίκτυα** Πανεπιστημίου Πατρών, Συνεργαζόμενο Μέλος δύο δικτύων  
 - Πρόγραμμα Νο C.766, «*METSNET: Δίκτυο Μελέτης των Μοριακών Μηχανισμών που ενέχονται στην Εμφάνιση των Συστατικών Στοιχείων του Μεταβολικού Συνδρόμου*», **2009-2012**.  
 - Πρόγραμμα Νο C.787, «*Δίκτυο Ανάπτυξης και Βιολογικής Αποτίμησης Πολυδύναμων Αντιφλεγμονωδών και Αντιμικροβιακών Φαρμακευτικών Προϊόντων*». **2009-2012**.  
 - Πρόγραμμα Νο C.851, «*ΦARMA-NET: Δίκτυο Δομικής και Λειτουργικής Μελέτης Μορίων Φαρμακευτικού Ενδιαφέροντος*». **2009-2012**.
- 17. «Διμερείς, Πολυμερείς και Περιφερειακές Ε & Τ Συνεργασίες»/«Διμερής Ε & Τ Συνεργασία Ελλάδας – Τουρκίας 2010-2011»** (ΓΓΕΤ, Υπουργείο Ανάπτυξης), Πανεπιστήμιο Πατρών, Επιστημονικός Υπεύθυνος  
 - «*Διερεύνηση της σχέσης Δομής-Δράσης μιας νέας E3 λιγάσης ουβικιτίνης με ρυθμιστικό ρόλο στο σηματοδοτικό μονοπάτι της TGF-β και στην ογκοκαταστολή*», **2010-2012**.
- 18. «ΗΡΑΚΛΕΙΤΟΣ II: Ενίσχυση του Ανθρώπινου Ερευνητικού Δυναμικού μέσω της Υλοποίησης Διδακτορικής Έρευνας»** (Υπουργείο Εθνικής Παιδείας & Θρησκευμάτων), Πανεπιστήμιο Πατρών, Επιστημονικός Υπεύθυνος  
 - «*Παρασκευή, χαρακτηρισμός και δομική μελέτη μέσω Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού του καταλυτικού κέντρου της μεταλλοπρωτεάσης “Θανατηφόρος Παράγοντας του Bacillus anthracis”*», **2010-2013**.
- 19. «ΘΑΛΗΣ: Ενίσχυση της Διεπιστημονικής ή και Διδρυματικής έρευνας και καινοτομίας»** (Υπουργείο Παιδείας), Συντονιστής: Καθ. Α. Παπαπετρόπουλος, Εργαστήριο Μοριακής Φαρμακολογίας, Προϋπολογισμός: 500ΚΕυros, Συνεργαζόμενος Ερευνητής.  
 - «*Υδρόθειο (H<sub>2</sub>S) ένας νέος ενδογενής ρυθμιστής της αγγειογένεσης: μελέτες σηματοδότησης, φυσιολογικοί και παθοφυσιολογικοί ρόλοι και ανάπτυξη φαρμακολογικών αναστολέων*», **2011-2015**.
- 20. «FP7-REGPOT-2011-1. Capacities – Research Potential»**, Πανεπιστήμιο Πατρών, Επιστημονικός Υπεύθυνος  
 - Coordination & Supporting Actions, Contract N° CT-2011-285950, «*SEE-DRUG – Establishment of a centre of Excellence for Structure-based Drug target Characterization: Strengthening the Research Capacity of South-Eastern Europe*», [www.seedrug.upatras.gr](http://www.seedrug.upatras.gr), **2012-2015**.
- 21. «Κ. Καραθεοδωρή 2013» Ερευνητικό Πρόγραμμα για τη Μεταδιδακτορική Έρευνα**, Πανεπιστήμιο Πατρών, Προϋπολογισμός 51,5 Κ€ Επιστημονικός Υπεύθυνος  
 - Πρόγραμμα Νο 2013-6661, «*Urine Metabolite analysis through high-resolution homo-/hetero-nuclear NMR-based metabolomics*», **2014-2016**.
- 22. ΑΡΙΣΤΕΙΑ II**, (Επ. Υπ. Δρ. Ειρήνη Μαργιωλάκη), Προϋπολογισμός 136 Κ€, Συνεργαζόμενος Ερευνητής  
 - Πρόγραμμα Νο 4659, «*Biophysics-DRUGS: Diffraction and NMR experimental platform for drug screening*», **2014-2015**.
- 23. Εθνικός Χάρτης Ερευνητικών Υποδομών** - Γενική Γραμματεία Έρευνας & Τεχνολογίας  
 - Ερευνητική Υποδομή “INSPIRED”, MIS-5002550 – Υπεύθυνος Υποέργων Π. Πατρών (Υποέργα 02, 16 & 17) Συντονιστής της Υποδομής του Πανεπιστημίου Πατρών “UPAT-RISF”, ενός εκ των δύο πυλώνων της ερευνητικής υποδομής INSIPRED:  
[http://www.gsrt.gr/News/Files/New987/road-map-web\\_version\\_final.pdf](http://www.gsrt.gr/News/Files/New987/road-map-web_version_final.pdf) (σελίδα #51)  
 - Ερευνητική Υποδομή “OMICS-ENGINE” MIS-5002636 – Υπεύθυνος Υποέργου Π. Πατρών (Υποέργο 03) & Επιστημονικός Υπεύθυνος Ερ. Ομάδας Π. Πατρών.

24. **H2020 - H2020-BG-2014-2**, BG-03-2014 - Novel marine derived biomolecules and industrial biomaterials (European Union), “MARISURF: Novel, Sustainable marine Bio-surfactant / Bio-emulsifiers for commercial exploitation”, Contract N° 635340, **2015-2020**. University of Patras (Total budget: 571KEuros), E.Y. Ερευνητικής Ομάδας Π. Πατρών.
25. **H2020 — H2020-INFRAIA-2014-2015** - Integrating and opening existing national and regional research infrastructures of European interest, “iNEXT: Infrastructure for NMR, EM and X-ray crystallography for translational research”, Contract N° 285950, **2015-2020**. University of Patras (Total budget: 31.5KEuros), E.Y. Ερευνητικής Ομάδας Π. Πατρών.
26. **COST Action – CA15133 — FesBioNET, 2014-2015 - (European Union)**, “The Biogenesis of Iron-sulfur Proteins: form Cellular Biology to Molecular Aspects”, Contract No 653706, **2015-2020**. University of Patras (<http://www.fesbionet.eu/index.php>). UPAT Team Leader & Vice-Chair of the action.
27. **ΕΛΙΔΕΚ «Ενίσχυση Υποψηφίων Διδασκόντων»**, Επιβλέπων των ερευνητικών προγραμμάτων των κάτωθι Υπ. Διδασκόντων για την εκπόνηση Διαδακτορικής Διατριβής:
- 1<sup>η</sup> Προκήρυξη, 2016 - **Αικατερίνη Τσίκα** (κωδ. 2430), 08/2017-11/2018, “Μελέτη του Δομικού πλαισίου της λειτουργίας πρωτεϊνικών τομέων του αντιγραφικού συμπλέγματος των άλφα ιών μέσω φασματοσκοπίας NMR”
  - 2<sup>η</sup> Προκήρυξη, 2018 - **Στυλιανή Χασάπη** (κωδ. 1019), 10/2019-05/2021, “Ανάλυση και μελέτη βιομορίων και βιοδεικτών μέσω φασματοσκοπίας NMR”
  - 2<sup>η</sup> Προκήρυξη, 2018 - **Μαρία Πολίτη** (κωδ. 663), 10/2019-10/2022, “Εκφραση, απομόνωση, φυσικοχημικός χαρακτηρισμός και μελέτη της Σχέσης Δομής-Λειτουργίας ανασυνδυασμένων πολυπεπτιδίων του αντιγραφικού συμπλέγματος του ιού της Ηπατίτιδας Ε (HEV1)”
28. **IKY PhD-Research Scholarships** “Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας MIS 5000432”, **2018**, Επιβλέπων του ερευνητικού προγράμματος για την εκπόνηση Διαδακτορικής Διατριβής:
- **Γαρυφαλλιά Μακρυνίτσα** (11852), 04/2018-04/2021, “Μελέτη της διαμόρφωσης και της δυναμικής Η-NOX πρωτεϊνών και των συμπλόκων τους με σηματοδοτικά μόρια”
29. **ΕΔΜΒ34 - «Υποστήριξη ερευνητών με έμφαση στους Νέους Ερευνητές», ΕΣΠΑ 2014-2020** Επιχειρησιακό Πρόγραμμα «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση»: “Ο ρόλος της καταλυτικής περιοχής της Ε3 λιγάσης ουβικιτίνης Arkadia στη ρύθμιση της δράσης του ενζύμου και στη διάγνωση”, **2018-2019**, Πανεπιστήμιο Πατρών, Επιστημονικός Υπεύθυνος.
30. **ΕΛΙΔΕΚ «Ενίσχυση Μεταδιδακτόρων Ερευνητών/τριών»**, «ECHNO: Enlightening the Conformational Changes of HNOX domain of soluble guanylate cyclase (sGC) by discrimination of diatomic gases», **2018-2021**, Επιστημονική Υπεύθυνη: Δρ. Αικατερίνη Ζώμπρα. Επιστημονικός Υπεύθυνος Συντονιστή Φορέα.
31. **H2020-MSCA-IF-2017 - MARIE SKŁODOWSKA-CURIE ACTIONS (European Union)**, “**NMRSIGN: NMR insights on the soluble Guanylyl Cyclase conformational dynamics to illuminate the SIGNaling pathway**” Contract No 795175, **2018-2020**, (Grant Holder: Dr. George Dalkas), Επιστημονικός Υπεύθυνος Συντονιστή Φορέα.
32. **“IKY Υποτροφίες Μεταδιδακτόρων Ερευνητών, 2019”**, Supervisor of the Post-Doctoral Young Investigators Research Grants:
- Δρ. **Αικατερίνη Αργυρίου** (18646) 02/2020-02/2022, “Μελέτη των δομικών και φυσικοχημικών παραγόντων αναγνώρισης και δέσμευσης RNA του ιού Ηπατίτιδας C από την La πρωτεΐνη μέσω Φασματοσκοπίας NMR”
  - Δρ. **Μαρία Μπίρκου** (16984) 02/2020-02/2022, “Μελέτη του μηχανισμού δράσης της πρωτεΐνης Arkadia ως RING E3 λιγάση στο μονοπάτι της ουβικιτινίωσης”

### Εκπαιδευτική Εμπειρία :

- **Νοέμβριος 1989 - Φεβρουάριος 1994 : Τμήμα Χημείας – Πανεπιστήμιο Κρήτης**
  - Γενική Χημεία Θεωρία (11/1989–01/1990) ; Εργαστηριακές Ασκήσεις (09/1993–01/1994)
  - Οργανική Χημεία Εργαστηριακές Ασκήσεις (02/1990–06/1990)
  - Ανόργανη Χημεία Θεωρία (09/1990–01/1991) ; Εργαστηριακές Ασκήσεις (02/1991–06/1994)
- **Ιούνιος 2000 - Σεπτέμβριος 2004 : Σύμβουλος/Καθηγητής στο Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο**
  - Πρόγραμμα “Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες” (Θ.Ε. Γενική και Ανόργανη Χημεία)
- **Αύγουστος 2003 - : Τμήμα Φαρμακευτικής – Πανεπιστήμιο Πάτρας**
  - Γενική Χημεία - Εργαστηριακές Ασκήσεις (2003 –σήμερα)
  - Απομόνωση/Καθαρισμός Φυσικών Προϊόντων (2003-2006)
  - Φασματοσκοπία NMR (2003 –σήμερα)
  - Βιοχημεία I & II (2003 –σήμερα)
  - Πληροφορική (2006 –σήμερα)
  - Βιοανόργανη Χημεία – Μοριακή Προσομοίωση (2008-σήμερα)

### Εκπαιδευτικές Δραστηριότητες σε Μεταπτυχιακά Ερευνητικά Προγράμματα & Καθοδήγηση Ερευνητών

- ✦ **Καθοδήγηση/Επίβλεψη 9** Μεταδιδακτορικών/Εμπειρων Ερευνητών (Δρ. Α. Παπακυριακού 2006-7, Δρ. Χ. Χασάπης 2008-, Δρ. Π. Γαλανάκης 2010-11, Δρ. Γ. Δάλκας 2011, Δρ. Σ. Μπαριάμης, Δρ. Μ.-Τ. Ματσούκας, Δρ. Α. Ζώμπρα, Δρ. Μ. Μπίρκου, Δρ. Α. Αργυρίου).
- ✦ **Επιβλέπων Καθηγητής 6** φοιτητών για την απόκτηση Διδακτορικού Διπλώματος (Δρ. Π. Γαλανάκης, Οκτώβριος 2009, Δρ. Γ. Δάλκας, Δρ. Ζ. Σπυράντη, Δεκέμβριος 2010, Δρ. Δ. Βούρτσης Οκτώβριος 2015, Δρ. Μ. Μπίρκου Δεκέμβριος 2018, Δρ. Α. Αργυρίου Μάϊος 2019), 24 φοιτητών για την απόκτηση Μεταπτυχιακού Τίτλου Εξειδίκευσης και ~100 φοιτητών για την εκπόνηση Διπλωματικών εργασιών.
- ✦ **Μέλος Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής** 16 φοιτητών για την απόκτηση Μεταπτυχιακού Τίτλου Εξειδίκευσης και 11 φοιτητών για απόκτηση Διδακτορικού Τίτλου.
- ✦ **Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής** 25 φοιτητών για την απόκτηση Διδακτορικού Τίτλου.
- ✦ **Σε εξέλιξη:** Επιβλέπων Καθηγητής 5 φοιτητών για απόκτηση Διδακτορικού Τίτλου, 10 φοιτητών για απόκτηση Μεταπτυχιακού Τίτλου Εξειδίκευσης και 10 φοιτητών για εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής 2 φοιτητών για την απόκτηση Διδακτορικού Διπλώματος.

### Μέλος:

- Ένωση Ελλήνων Χημικών,
- Marie-Curie Fellowship Association (Ελληνικός Σύλλογος MCFA: Μέλος, 2004-2006 Μέλος Ελεγκτικού Συμβουλίου, 2006-2008 Αντιπρόεδρος),
- European Peptide Society,
- Ελληνική Εταιρία Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας.
- Ελληνική Εταιρία Υπολογιστικής Βιολογίας.
- Ελληνική Εταιρία Κρυσταλλογραφίας.

### Γλώσσες:

Αγγλικά, Γαλλικά, Ιταλικά.

### Προφορικές Παρουσιάσεις - Διαλέξεις :

- (1) **05/09/1991** - « *Σύνθεση και Φυσικοχημικός Χαρακτηρισμός Πορφυρινικών Διμερών Συμπλόκων με «ελαφρά» ιόντα Λανθανιδών* ». **13<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας**, Αθήνα.
- (2) **10/07/1995** - « *Synthesis and Spectroscopy of Lanthanide Mono- and Bis- Porphyrinates* ». **Προσκεκλημένος του Καθ. René Poilblanc**. Laboratoire de Chimie de Coordination, C.N.R.S, 205 route de Narbonne, 31077 Toulouse Cedex, FRANCE.
- (3) **23/04/1996** - « *Lanthanide Sandwich-like Porphyrin Complexes with Strong π-π Interactions. Synthesis, Structure and Properties* ». **Προσκεκλημένος του Καθ. Jean-Claude Marchon**. Laboratoire de Chimie de Coordination. CNRS N°1194, CEA/Grenoble-DRFMC/SCIB, 17, rue des Martyrs, 38054 Grenoble Cedex 9, France.
- (4) **12/11/1999** - « *Δομή Κυτοχρώματος c (Horse Heart). Ανίχνευση Δομικών Διαφορών μεταξύ των δύο Οξειδωτικών του καταστάσεων* ». Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Ηράκλειο..
- (5) **23/12/1999** - « *3-D Δομή σε Διάλυμα Fe(III) και Fe(II) Κυτοχρώματος c (Horse Heart) με χρήση φασματοσκοπίας NMR* ». Τμήμα Χημείας. Εθνικό Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο, Αθήνα.
- (6) **02/03/2001** - « *Conformational Analysis of Biomolecules in Solution: NMR - 3D Structures - Biological Implications* » **2<sup>nd</sup> Conference in Medicinal Chemistry**, Πάτρα.
- (7) **16/05/2001** - « *3D Δομή σε διάλυμα Συνθετικών Αναλόγων της CRH μέσω φασματοσκοπίας NMR* » **4<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας**, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα.
- (8) **05/12/2001** - « *Πειραματική Μελέτη Βιομοριακών Συστημάτων* » Τμήμα Επιστήμης των Υλικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα.
- (9) **8/03/2002** - « *Folding and Redox-State Dependent Structural Changes of Electron Transfer Haem Proteins* » **3<sup>rd</sup> Conference in Medicinal Chemistry: Drug Design & Development**, Πάτρα.
- (10) **12/04/2002** - « *Διαμορφωτική Μελέτη Συνθετικών Πεπτιδίων που Αντιπροσωπεύουν τα Ενεργά Κέντρα του Μετατρεπτικού Ενζύμου της Αγγειοτενσίνης (ACE)* » **3<sup>rd</sup> Hellenic Forum on Bioactive Peptides**, Πάτρα.
- (11) **08/11/2002** - « *Δομικά Χαρακτηριστικά των Καταλυτικών Κέντρων του Μετατρεπτικού Ενζύμου της Αγγειοτενσίνης-I (ACE)* » **19<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας**, Ηράκλειο Κρήτης.
- (12) **14/03/2003** - « *NMR Δομικά Μοντέλα των Καταλυτικών Κέντρων του Μετατρεπτικού Ενζύμου της Αγγειοτενσίνης-I* » **4<sup>th</sup> Conference in Medicinal Chemistry**, Πάτρα.
- (13) **11/02/2003** - « *Σχεδιασμός/Προσομοίωση Βιοδραστικών Μορίων με Φαρμακευτική Σημασία* » Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα.
- (14) **12/06/2003** - « *NMR Models of the Angiotensin-I Converting Enzyme Zn(II) Catalytic Sites : The basis for a structural study on the enzyme-substrate interaction* » **7<sup>th</sup> FIGIPS (Invited Lecture)**, Lisbon, PORTUGAL.
- (15) **11/03/2004** - « *Monitoring the interaction between the HIV-1 gp120 V3-loop and the N-terminal CCR5 peptide constructs through NMR Spectroscopy* » **5<sup>th</sup> Conference in Medicinal Chemistry**, Πάτρα.
- (16) **10/05/2004** - « *Solid-phase synthesis and Conformational Properties of peptide models that represents the active sites of Angiotensin-I Converting Enzyme* » **9<sup>th</sup> Naples Workshop – Peptides as therapeutics diagnostics & vaccines**, Anacapri, ITALY.
- (17) **10/03/2005** - « *Molecular Modeling & NMR conformational Analysis applied in the study of Zn(II) binding sites of Biomolecules* » **6<sup>th</sup> Conference in Medicinal Chemistry**, Πάτρα.
- (18) **09/03/2006** - « *Structure and Dynamics of E3 Ubiquitin Ligases Hdm2 & Hdmx tumor-suppressor protein p53 regulators* » **7<sup>th</sup> Conference in Medicinal Chemistry: Drug Design & Development**, Πάτρα.
- (19) **16/05/2006** - « *NMR Study of Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE) Synthetic Peptide-based Catalytic Site Maquettes (CSM) and CSM – Substrate/Inhibitor Interaction* » **5<sup>th</sup> Hellenic Forum on Bioactive Peptides**, Πάτρα.
- (20) **25/10/2006** – « *Λατορ Μοριακή Προσομοίωση – In silico Αναδίπλωση Αμινοξικών Ακολουθιών σε Τρισδιάστατη και Λειτουργική δομή* » **Εκδήλωση για την Υποδοχή των Πρωτοετών Φοιτητών του Τμήματος Φαρμακευτικής 2006**, Συνεδριακό Κέντρο Πανεπιστημίου Πατρών, Πάτρα
- (21) **16/03/2007** - « *Study of Anthrax Lethal Factor – peptide substrate Interaction: Implications for Structure-Guided Design of Bioactive Molecules* » **8<sup>th</sup> Conference in Medicinal Chemistry**, Πάτρα.
- (22) **26/06/2007** - « *Anthrax Lethal Factor: A Platform for Computational & Experimental Structure-Guided Design of Bioactive Molecules* » **Προσκεκλημένος του Δρ. Ν. Οικονομάκου**, Διευθυντή ΙΟΦΧ, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Αθήνα.

- (23) **20/10/2007** - « *Protein Data Bank and Structure Quality Assessment* » **Workshop on “Bioinformatics - Computational Methods in Biological Data Mining”**, 5th General Meeting of the International Proteolysis Society (IPS2007), Πάτρα.
- (24) **15/11/2007** - « *A residue specific view of Anthrax Lethal Factor – peptide substrate Interaction: Implications for Structure-Guided Design of Bioactive Molecules* » **Προσκεκλημένος του Καθ. M. Grötl, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο του Göteborg, Σουηδία.**
- (25) **14/03/2008** - « *An atomic level insight into Anthrax Lethal Factor(LF) –substrate selectivities* » **Προσκεκλημένος της Οργανωτικής Επιτροπής του 13<sup>ου</sup> Πανελληνίου Συμποσίου Φαρμακοχημείας, Αθήνα.**
- (26) **21/05/2008** « *Conformational properties of Proteins & Biomolecular Simulations* » Προσκεκλημένος της Οργανωτικής Επιτροπής, **Workshop - 4<sup>th</sup> CONCO Consortium Meeting, Πάτρα.**
- (27) **04/06/2008** - « *NMR-based structure determination of biomolecules – Part I & II* » & « *Practical session: Analysis of 2D Homonuclear NMR Data* » **Προσκεκλημένος της Οργανωτικής Επιτροπής, 1<sup>st</sup> Workshop on Structure-Based Drug Design, Αθήνα.**
- (28) **26/09/2008** - « *NMR insights into the concerted action of a Sco1 and a putative copper chaperone to the CuA assembly mechanism* » Προσκεκλημένος της Οργανωτικής Επιτροπής, **4th Conference of the Hellenic Crystallographic Association, Αθήνα.**
- (29) **30/10/2008** - « *Docking and Molecular Dynamics Simulations to gain an atomic level insight into Anthrax Lethal Factor (LF) Substrate interaction* » **3rd Conference of the Hellenic Society for Computational Biology and Bioinformatics HSCBB08, ΕΚΕΤΑ, Θεσσαλονίκη.**
- (30) **30/10/2008** - « *Conformational Plasticity of Ring finger E3 Ubiquitin ligases of p53 tumor suppressor protein* » **3rd Conference of the Hellenic Society for Computational Biology and Bioinformatics HSCBB08, ΕΚΕΤΑ, Θεσσαλονίκη.**
- (31) **30/01/2009** – « *Computational Insights into the conformational dynamics of nAChR 5mer and  $\alpha$ 1-toxin complexes – Preliminary NMR studies of nAChR subunits* » **1<sup>st</sup> Annual meeting - EU FP7 Neurocypres. Ελληνικό Ινστιτούτο Pasteur, Αθήνα.**
- (32) **31/01/2009** - « *Preliminary NMR studies of a Cys-loop family prokaryotic homologue* » **1<sup>st</sup> Annual meeting - EU FP7 Neurocypres. Ελληνικό Ινστιτούτο Pasteur, Αθήνα.**
- (33) **01/02/2009** - « *1. NMR Screening of ligand-AChR interaction, first results; 2. Virtual screening of 400 di-peptides on nAChR* » **1<sup>st</sup> Annual meeting - EU FP7 Neurocypres. Ελληνικό Ινστιτούτο Pasteur, Αθήνα.**
- (34) **18/03/2009** – « *Structure-Activity Relationship in Biomolecules through NMR* » **Προσκεκλημένος του Αν. Καθηγητή Κ. Κυπραίου, Τμήμα Ιατρικής, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα.**
- (35) **30/03/2009** – « *Structural bioinformatics at University of Patras. Biomolecular simulations & NMR applications to study protein architecture and socialization* » **HSCBB – GSRT – ELIXIR meeting, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών. Αθήνα.**
- (36) **08/05/2010** – « *NMR studies of GLIC prokaryotic AChR homologue and current progress in labeling strategies towards a complete resonance assignment and structure determination* » **2<sup>nd</sup> Annual meeting - EU FP7 Neurocypres, 7-9 Μαΐου 2010, Μασσαλία, ΓΑΛΛΙΑ.**
- (37) **17/06/2010** – « *Βιοανόργανη Χημεία του Zn(II)-NMR Μελέτη της Σχέσης Δομής-Λειτουργίας Ογκοπρωτεϊνών και Ογκοκαταστολέων* » **Ημερίδα Τμήματος Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών “Σύγχρονες Τάσεις και Προοπτικές στην Ανόργανη Χημεία”, 17 Ιουνίου 2010, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα.**
- (38) **24/09/2010** – « *Structure-Activity Relationship of Arkadia ring finger E3 ubiquitin ligase through NMR spectroscopy* » **18<sup>th</sup> Euro QSAR, 19-24 Σεπτεμβρίου 2010, Ρόδος.**
- (39) **01/10/2010** – « *Structure-Activity Relationship of Arkadia ring finger E3 ubiquitin ligase through NMR spectroscopy* » **EAST-NMR 1st Young Investigators Meeting, 29 Σεπτεμβρίου έως 1 Οκτωβρίου 2010, Κωνσταντινούπολη, ΤΟΥΡΚΙΑ.**
- (40) **02/11/2010** – « *NMR insights into the conformational dynamics of native and engineered forms of Arkadia E3 Ubiquitin ligase C-terminal Domain* » **"NMR in Life Sciences" – 3<sup>rd</sup> International Symposium on Organic Chemistry, 30 Οκτωβρίου έως 2 Νοεμβρίου, Σόφια, ΒΟΥΛΓΑΡΙΑ.**
- (41) **17/01/2011** – « *Διαμόρφωση, Δυναμική και Αλληλεπίδραση πεπτιδίων και πρωτεϊνών μέσω Φασματοσκοπίας NMR* » **Ημερίδα Μεταπτυχιακών Φοιτητών Τμήματος Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Πάτρας 17 Ιανουαρίου 2011, Πάτρα.**



- (42) **19/09/2011** – «*NMR Structural Biology at University of Patras*» **GREEK NMR Users Meeting**, Διοργάνωση από εταιρία BRUKER Biospin (Γερμανία) & FP7 EAST-NMR, 19-20 Σεπτέμβριος 2011, Αθήνα.
- (43) **08/10/2011** – «*NMR-driven docking of protein partners involved in ubiquitination pathway*», **6th Conference of the Hellenic Society for Computational Biology and Bioinformatics - HSCBB11**, Πανεπιστήμιο Πατρών, 7-9 Οκτωβρίου 2011.
- (44) **17/10/2011** – «*Διερεύνηση της σχέσης Δομής-Δραστηκότητας φυσικού τύπου και μεταλλαγμάτων του C-τελικού τομέα της E3 λιγάσης ουβικτίνης και ογκοκαταστολέα, Arkadia, μέσω Φασματοσκοπίας NMR*» Προσκεκλημένος του Καθηγητή **Χ. Καλόφωνου**, Τμήμα Ιατρικής, Τομέας Ογκολογίας, Πανεπιστήμιο Πατρών.
- (45) **04/11/2011** – «*Δομική Βιολογία μέσω Φασματοσκοπίας Βιομοριακού NMR*» Προσκεκλημένος της Διευθύντριας του Ινστιτούτου Βιολογίας, **Δρ. Ε. Τσιλιμπάρη**. Ερευνητικό Κέντρο Ε.ΚΕ.ΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ», 04 Νοέμβριος 2011, Αθήνα.
- (46) **07/11/2011** – «*NMR Structural Biology at University of Patras – The SEE-DRUG project*» **Structure– & Computer– Aided Design Workshop: Bioactive Molecules & Materials & INSTRUCT-EL Meeting**, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, 07 Νοέμβριος 2011, Αθήνα.
- (47) **11/12/2011** – «*NMR μελέτη του μονομερούς εξωκυττάρου τομέα ενός προκαρυωτικού ομολόγου του νικοτινικού υποδοχέα της ακετυλοχολίνης (nAChR)*» **62<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Ελληνικής Εταιρίας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας**, 9-11 Δεκεμβρίου 2011, Αθήνα.
- (48) **11/01/2012** – «*Διαμορφωτική ευελιξία πολυπεπτιδίων μέσω Φασματοσκοπίας Βιομοριακού NMR*», Προσκεκλημένος του Καθ. **Θ. Μαυρομούστακου**, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών.
- (49) **17/04/2012** – «*NMR study of Arkadia E3 ubiquitin ligase domain to correlate Zn(II) coordination with protein architecture, dynamics and function*» **12<sup>th</sup> EURASIA Conference in Chemical Sciences**, 16-21 Απρίλιος 2012, Κέρκυρα.
- (50) **19/05/2012** – «*Conformational Dynamics and Drug Design Approaches through NMR - Basics and Applications* » **2nd Summer School of Proteins**, Invited by **Prof. C. Vorgias**, Department of Biology, University of Athens, 18-20 May 2012, Athens, GREECE.
- (51) **26/05/2012** – «*Identifying functionally important residues of Arkadia E3 Ubiquitin Ligase RING Domain in E2 Recruitment and E3-E2 Interaction*» **15th Symposium on Medicinal Chemistry**, 25-27 May 2012, Athens, GREECE.
- (52) **28/05/2012** – «*NMR Conformational Dynamics and SAR studies of biologically relevant macromolecules*» **3<sup>rd</sup> ARCADE Workshop**, National Hellenic Research Foundation, 28-30 May 2012, Athens GREECE.
- (53) **04/06/2012** – «*The SEE DRUG Project at University of Patras*» **WIRE2012 – Week of Innovative Regions in Europe**, Invited by the **WIRE2012 Organizing Committee & REGPOT Program Officer**, 03-05 June 2012, Krakow, POLLAND.
- (54) «*Insights on the conformational exchange properties of GLIC ECD by solution NMR - Implications on 5/6mer subunit socialization*». **4<sup>th</sup> Annual meeting - EU FP7 Neurocyprus**, 07-10 June, Vienna, AUSTRIA.
- (55) **22/06/2012** – «*Elucidating the intrinsic plasticity of the extracellular domain of a prokaryotic nAChR homologue by solution NMR - implications on 5/6mer subunit socialization*», Invited by **Prof. Anna-Maria Papini**, Department of Chemistry, University of Florence, ITALY.
- (56) **04/09/2012** – «*Selective amino acid isotope labeling strategies for solution NMR studies of high-molecular-weight protein drug-targets*» **32<sup>nd</sup> European Peptide Symposium**, 04 September 2012, Athens, GREECE.
- (57) **29/09/2012** – «*NMR-driven Structure Function Correlation studies of Arkadia E3 Ubiquitin Ligase RING domain*», **6<sup>th</sup> Conference of the Hellenic Crystallographic Association**, 28-29 September, Athens, GREECE.
- (58) **09/11/2012** – «*Conformational Dynamics & Function of Proteins by Solution NMR*», Προσκεκλημένος του Καθηγητή **Μ. Ορφανόπουλου**, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης.
- (59) **10/11/2012** – «*NMR Insights on the functional modulation of the RING domain of Arkadia tumor suppressor*», **63<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Ελληνικής Εταιρίας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας**, 9-11 Νοεμβρίου 2012, Ηράκλειο.
- (60) **15/11/2012** – «*NMR Structural Biology at University of Patras & the SEEDRUG Project* », **3rd EAST-NMR Annual User Meeting**, 13-16 November 2012, Lasko, SLOVENIA.
- (61) **08/12/2012** – «*Solution NMR Studies of E3 Ub Ligase RING and Alphaviruses MACRO Domains*», **Turkish NMR Meeting**, 07-09 December 2012, Istanbul, TURKEY.
- (62) **19/03/2013** – «*Conformational Dynamics of Proteins, Biomolecular Interactions and Drug Design Efforts using NMR*», **Π.Μ.Σ. «Πληροφορική Επιστημών Ζωής»**, Σχολή Ιατρικής, Πάτρα.

- (63) **12/04/2013** – «Σύγχρονος Πυρηνικός Μαγνητικός Συντονισμός (NMR) στην υπηρεσία των Επιστημών Υγείας», 1<sup>ο</sup> Forum Υγείας, Πάτρα.
- (64) **31/05/2013** – «Υψηλής ανάλυσης μελέτη της διαμόρφωσης, της δυναμικής και της αλληλεπίδρασης πρωτεϊνών μέσω φασματοσκοπίας βιομοριακού NMR », «**NANOTHEO**» Workshop, Πανεπιστήμιο Πατρών.
- (65) **24/09/2013** – « *NMR conformational dynamics of proteins & protein complexes* », IAEA Meeting, **University of Patras, Greece.**
- (66) **26/09/2013** – «*Conformational Dynamics and Drug Design Approaches through NMR*», **5th BBBB International Conference 2013, 26-28 September, Athens, Greece.**
- (67) **11/10/2013** – «*SEEDRUG Biomolecular 700MHz NMR Facility*», **Inauguration of the SEEDRUG Biomolecular NMR Facility, Rion, Greece**
- (68) **06/04/2014** - «*Structural Biology by NMR: Knowledge transfer from EU RIs to Greece* », **ICRI-2014 – Strategic pipeline planning: from sample preparation to 3D structure determination with bio SAXS and other biophysical techniques**, National Hellenic Research Foundation, Athens, **Greece.**
- (69) **20/05/2014** – «*Insights on the conformational plasticity of drug-targets proteins*» **32<sup>nd</sup> Cyprus – Noordwijkerhout – Camerino Symposium – Trends in Drug Research**, May 18-23, 2014, Limassol, Cyprus.
- (70) **28/05/2014** - «Διερεύνηση σε ατομικό επίπεδο, της Δομής, της Δυναμικής & της Αλληλεπίδρασης πρωτεϊνών μέσω Βιομοριακού NMR», Προσκεκλημένος του Καθηγητή Δ. Λεωνίδα, Τμήμα Βιοχημείας & Βιοτεχνολογίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Λάρισα.
- (71) **21/09/2014** - «*NMR Conformational Dynamics of La and RRM1 Motifs of La Protein*», CTSB & HeCrA7, **FORTH-IMBB**, Heraklion Crete, Greece.
- (72) **9-11/10/2014** «Εφαρμογές της Φασματοσκοπίας NMR στη μελέτη βιομορίων & φαρμακευτικών στόχων», **2ο Συνέδριο Φαρμακευτικών Επιστημών**, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα
- (73) **13/10/2014** - «*Atomic-level investigation of Structure, Dynamics & Interactions of proteins, through Biomolecular NMR*», **Greek NMR Users Meeting**, Athens, Greece.
- (74) **13/02/2015** - «*Conformation, Plasticity and Socialization of biomolecules through NMR* » invited by Iro Georgoussi, **NCSR Demokritos**, Institute of Biosciences & Applications, Athens, GREECE.
- (75) **26/04/2015** – «*Μέθοδολογία Βιομοριακού NMR για την μελέτη βιομορίων και συμπλόκων/συμπλεγμάτων τους* » Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης, Αλεξανδρούπολη.
- (76) **27/05/2015** – «*NMR insights into the Conformational Dynamics and interaction of biomolecules with therapeutic interest*» invited by the Organizing Committee of the **1<sup>st</sup> International Conference of Controlled Release Society**, Athens, GREECE.
- (77) **26/06/2015** – «*High Resolution solution NMR studies of Biomacromolecules*», Ημερίδα στη Μνήμη του Καθ. Ιωάννη Ελεμέ (1962-2014), Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.
- (78) **09/10/2015** – «*NMR Spectroscopy Applications to study biomolecules and biomolecular drug targets* », 17<sup>th</sup> Greek National Pharmaceutical Conference, Athens.
- (79) **21/04/2016** – «*NMR Insights on the conformational plasticity and interaction of biomolecules*», **REGPOT-InnovCrete Seminars**, FORTH-IMBB, University of Crete, Heraklion, Crete, Greece
- (80) **14/05/2016** – “Εφαρμογές Φασματοσκοπίας NMR για την μελέτη βιομορίων – φαρμακευτικών στόχων”, **2ο Συνέδριο Εφηρμοσμένης Φαρμακευτικής**, Θεσσαλονίκη.
- (81) **21/05/2016** – «*Μέθοδολογία Βιομοριακού NMR για την μελέτη βιομορίων και συμπλόκων/συμπλεγμάτων τους* » Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης, Αλεξανδρούπολη.
- (82) **08/06/2016** -« *NMR conformational dynamics & RNA recognition properties of La protein domains La, RRM1 and RRM2*», **Chianti Workshop 2016**, June 5-10, 2016, Grosseto, Italy
- (83) **23/06/2016** – «*NMR insights into the Conformational Dynamics and interaction of biomolecules with therapeutic interest*» invited by the Organizing Committee of the **2<sup>nd</sup> International Conference of Controlled Release Society**, Athens, GREECE.
- (84) **02/12/2016** – “Φασματοσκοπία Βιομοριακού NMR για τη μελέτη της διαμόρφωσης, δυναμικής και αλληλεπίδρασης βιομορίων”, Προσκεκλημένος από την Αν. Καθ. Λευκοθέα Παπαδοπούλου, Τμήμα Φαρμακευτικής, **Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης**.

- (85) **03/12/2016** - “*Η Φασματοσκοπία NMR στην Χημεία, Βιολογία, Σχεδιασμό Φαρμάκων και Διαγνωστική*”, **22<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας**, 2-4 Δεκεμβρίου, Θεσσαλονίκη.
- (86) **18/02/2017** - “*Συνεισφορά της Φασματοσκοπίας NMR στις Επιστήμες Υγείας*”, **3<sup>ο</sup> Συνέδριο Φαρμακευτικών Επιστημών**, 18-19 Φεβρουαρίου, Θεσσαλονίκη.
- (87) **12/03/2017** – «*Εφαρμογές της Φασματοσκοπίας NMR στη μελέτη βιομορίων & φαρμακευτικών στόχων*», ΠΜΣ «**Μεταφραστική έρευνα στη Βιοιατρική**», Τμήμα Μοριακής Βιολογίας και Γενετικής, Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης, Αλεξανδρούπολη.
- (88) **27/04/2017** – “*Targeting the architecture, the plasticity and the socialization determinants of biomolecules with pharmaceutical interest by NMR*”, Invited by Prof. Steve Euston, **Heriot-Watt University, Edinburgh, UK**.
- (89) **05/05/2017** – “*NMR προσεγγίσεις στην Δομική Βιολογία και στον Σχεδιασμό Βιοδραστικών ενώσεων*”, Ημερίδα “**Βιοχημεία & Υγεία: Από το κύτταρο στη θεραπεία**”, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Λάρισα.
- (90) **06/05/2017** – “*Σύγχρονες NMR προσεγγίσεις στο Σχεδιασμό Φαρμάκων και στη Μεταβολομική Ανάλυση*”, **3ο Συνέδριο Εφηρμοσμένης Φαρμακευτικής**, Θεσσαλονίκη.
- (91) **20/05/2017** – «*Εφαρμογές του Πυρηνικού Μαγνητιού Συντονισμού (NMR) στην υπηρεσία των Επιστημών Υγείας*», **5<sup>ο</sup> Forum Υγείας**, Πάτρα.
- (92) **26/06/2017** – “*NMR studies of RNA and ADP-ribose binding proteins*”, Invited by Prof. Michael Sattler, Chair for Biomolecular NMR Spectroscopy, **Technical University of Munich, STB Institute of Structural Biology**, Bavarian NMR Center (BNMRZ), Munich, Germany.
- (93) **02/10/2017** – “*Gas sensing in a heme protein monitored through NMR*”, **2<sup>nd</sup> COST “FesBioNet” Meeting**, Trest 1-4 October 2017, Czech Republic.
- (94) **04/05/2018** – “*NMR Applications in Metabolomic Analysis of Bio-fluids/tissues and Diagnostics*”, **4<sup>th</sup> Greek Conference of Applied Pharmacy**, Thessaloniki, Greece.
- (95) **21/04/2018** - “*NMR Studies of Heme Proteins*”, **2<sup>nd</sup> Synthetic & Medicinal Chemistry Symposium**, Department of Pharmacy, U of Patras, Greece
- (96) **30/05/2018** - «*Gas-inflow triggered stimulation of a heme enzyme monitored by NMR*», **EMBO Workshop - Challenges for magnetic resonance in life sciences**, 27-31 May 2018, Grosseto, Italy.
- (97) **22/09/2018** - “*NMR insights into the activation mechanism of homologous to human HNOX heme-containing gas-sensing domain*” Invited Lecture, “**Chemistry at the interface of Biology and Medicine**”, 21-25 September 2018, Heraklion - Crete, Greece
- (98) **06/10/2018** - “*NMR conformational Dynamics of RNA- and nucleotide- binding proteins*”, Invited Lecture **HeCrA9**, 6-8 October, Patras, Greece
- (99) **25/11/2018** – “*The structural and dynamic basis for the function of biological molecules through solution NMR spectroscopy*”, Invited Keynote Lecture, **69th Conference of the Hellenic Society of Biochemistry & Molecular Biology**, November 23-25, 2018 Hotel Imperial, Larissa, Greece
- (100) **14/12/2018** – «*Μελέτη της διαμόρφωσης και της δυναμικής συμπεριφοράς βακτηριακών ομολόγων της διαλυτής γουανυλικής κυκλάσης (soluble guanylate cyclase, sGC) μέσω Φασματοσκοπίας NMR – Συμπεράσματα για την ενεργοποίηση του ενζύμου*», Προσκεκλημένος της Αν. Καθ. Λευκοθέας Παπαδοπούλου, Τμήμα Φαρμακευτικής, **Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης**.
- (101) **13/02/2019** – «*Σύγχρονες Ερευνητικές Προσεγγίσεις στην υπηρεσία των Επιστημών Υγείας*», **Διακίδειος Σχολή Λαού**, Πάτρα.
- (102) **15/03/2019** - «*Μελέτη της διαμόρφωσης και της δυναμικής συμπεριφοράς βακτηριακών ομολόγων της διαλυτής γουανυλικής κυκλάσης (soluble guanylate cyclase, sGC) μέσω Φασματοσκοπίας NMR – Συμπεράσματα για την ενεργοποίηση του ενζύμου*», Προσκεκλημένος της Αν. Καθ. Αγλαΐας Παππά, Τμήμα Μοριακής Βιολογίας & Γενετικής, **Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης**, Αλεξανδρούπολη
- (103) **04/09/2019** – “*NMR insights on the activation mechanism of a heme enzyme*” Invited Lecture, **Central European NMR Symposium & Bruker users meeting**, University of Belgrade, Faculty of Chemistry, 04-05 September 2019, Serbia
- (104) **17/09/2019** – “*NMR studies of RNA- and nucleotide- binding proteins*”, **4<sup>nd</sup> COST “FesBioNet” Meeting**, Gdansk 16-19 September 2019, Poland.

**(105) 12/10/2019 – “NMR studies of RNA- and nucleotide- binding proteins”, Hellenic Bioinformatic Conference 2019, Heraklion Crete, 10-13 October, Greece.**

## Δημοσιεύσεις (με υπογράμμιση ως συγγραφέας αλληλογραφίας - ετεροαναφορές >700) :

1. A.G. Coutsolelos, **G.A. Spyroulias**. *Dysprosium Metallation to Substituted Tetraaryl-porphyrin Complexes; Synthesis and Spectroscopic Characterization*. *Polyhedron*, 13, 647-653 (1994). (I.F. 1,957).
2. E.M. Davoras, **G.A. Spyroulias**, E. Mikros, A.G. Coutsolelos. *<sup>1</sup>H NMR Spectroscopic Elucidation of Stereochemical Effects of Substituted Cerium Porphyrin Double-Deckers*. *Inorganic Chemistry*, 33, 3430-3434 (1994) (I.F. 3,851).
3. **G.A. Spyroulias**, A.G. Coutsolelos. *Synthesis and Spectroscopic studies of Lanthanide monoporphyrinates with meso-tetra-aryl porphyrinate Bearing Bromides on β-Pyrrole Positions or Fluorines on phenyl groups*. *Polyhedron*, 14, 2483-2490 (1995) (I.F. 1,957).
4. **G.A. Spyroulias**, A.G. Coutsolelos, C.P. Raptopoulou, A. Terzis. *Synthesis, Characterization, and X-ray Study of a Heteroleptic Sm(III) Porphyrin Double Decker Complex*. *Inorganic Chemistry*, 34, 2476-2479 (1995) (I.F. 3,851).
5. **G.A. Spyroulias**, M.P. Sioubara, A.G. Coutsolelos. *Cationic Lanthanide Monoporphyrinates with Sm, Eu, Gd and Tb. Synthesis and Spectroscopic Properties in Aqueous and Non Aqueous Media*. *Polyhedron*, 14, 3563-3571 (1995) (I.F. 1,957).
6. **G.A. Spyroulias**, A.G. Coutsolelos. *Evidence of Protonated and Deprotonated Forms of Symmetrical and Asymmetrical Lutetium(III) Porphyrin Double-Deckers by <sup>1</sup>H NMR Spectroscopy*. *Inorganic Chemistry*, 35, 1382-1385 (1996) (I.F. 3,851).
7. **G.A. Spyroulias**, A.G. Coutsolelos, D. de Montauzon, R. Poilblanc. *Electrochemical Studies of Protonated and Deprotonated Forms of Heteroleptic & Homoleptic Europium and Dysprosium Porphyrin Double-Deckers*. *Journal of Coordination Chemistry*, 39, 89-96 (1996) (I.F. 1,003)
8. I. Bertini, A.G. Coutsolelos, A. Dikiy, C. Luchinat, **G.A. Spyroulias**, A. Troganis. *Structural and Dynamic Information on Double-Decker Yb<sup>3+</sup> and Dy<sup>3+</sup> Porphyrin Complexes in Solution through <sup>1</sup>H NMR*. *Inorganic Chemistry*, 35, 6308-6315 (1996) (I.F. 3,851).
9. P. Battioni, E. Cardin, M. Louloudi, B. Schöllhorn, **G.A. Spyroulias**, D. Mansuy, T.G. Traylor. *Metalloporphyrinosilicas : A New Class of Hybrid Organic-Inorganic Materials Acting as Selective Biomimetic Oxidation Catalysts*. *J. Chem. Soc., Chemical Communications*, 2037-2038 (1996) (I.F. 4,426).
10. **G.A. Spyroulias**, A.P. Despotopoulos, C.P. Raptopoulou, A. Terzis, A.G. Coutsolelos. *First X-ray Crystal Structure of a lanthanide(III) monoporphyrinic complex using non-planar porphyrin rings*. *J. Chem. Soc., Chemical Communications.*, 783-784 (1997) (I.F. 4,426).
11. **G.A. Spyroulias**, D. de Montauzon, A. Maisonnat, R. Poilblanc, A.G. Coutsolelos. *Synthesis, UV-visible and electrochemical studies of lipophilic and hydrophilic lanthanide(III), bis(porphyrinates)*. *Inorganica Chimica Acta* 275-276, 182-191 (1998). (I.F. 1,606).
12. L. Banci, I. Bertini, **G.A. Spyroulias**, P. Turano. *The Conformational flexibility of Oxidized Cytochrome c, studied through its interaction with NH<sub>3</sub> and at High Temperatures*. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 583-591 (1998) (I.F. 2,514).
13. D. Deniaud, **G.A. Spyroulias**, J.-F. Bartolli, P. Battioni, D. Mansuy, C. Pinel, F. Odobel, B. Bujoli. *Shape selectivity for alkane hydroxylation with a new class of phosphonate-based heterogenised manganese porphyrins*. *New Journal of Chemistry*, 901-906 (1998) (I.F. 2,574).
14. L. Banci, S. Berners-Price, I. Bertini, V. Clementi, C. Luchinat, **G.A. Spyroulias**, P. Turano. *Water-Protein interaction in native and partially unfolded equine cytochrome c*. *Molecular Physics* 95(5), 797-808 (1998). (I.F. 1,351).
15. **G.A. Spyroulias**, C.P. Raptopoulou, D. de Montauzon, A. Mari, R. Poilblanc, A. Terzis, A.G. Coutsolelos. *Synthesis and Physicochemical Characterization of Protonated and Deprotonated Forms in Heteroleptic Lanthanide(III), Porphyrinate Double-Deckers. X-Ray Structure of Gd<sup>III</sup>H(oep)(tpp) at 298 and 21K*. *Inorganic Chemistry*, 38, 1683-1696 (1999) (I.F. 3,851).
16. L. Banci, I. Bertini, J.G. Huber, **G.A. Spyroulias**, P. Turano. *Solution Structure of reduced horse heart cytochrome c*. *Journal of Biological Inorganic Chemistry*. 4, 21-31 (1999) (I.F. 3,224).
17. V. Tangoulis, D. Malamataris, **G.A. Spyroulias**, C.P. Raptopoulou, A. Terzis, D.P. Kessissoglou. *An EPR and <sup>1</sup>H NMR Active Mixed-Valence Manganese(III/II/III) Trinuclear Compound*. *Inorganic Chemistry*, 39, 2621-2630 (2000) (I.F. 3,851).

18. L. Banci, I. Bertini, B. Branchini, P. Hajjeva, **G.A. Spyroulias**, P. Turano. *Dimethyl propionate ester heme-containing cytochrome b<sub>5</sub>: structure and stability*. **Journal of Biological Inorganic Chemistry**, 6, 490-503 (2001) (I.F. 3,224).
19. S. Babajilov, A.G. Coutsolelos, A. Dikiy, **G.A. Spyroulias**. *Intramolecular Dynamics of Asymmetric Lanthanide(III) Porphyrin Sandwich Complexes in Solution*. **European Journal of Inorganic Chemistry**, 303-306 (2001) (I.F. 2,514).
20. A.K. Boudalis, N. Lalioti, **G.A. Spyroulias**, C.P. Raptopoulou, A. Terzis, V. Tangoulis, S.P. Perlepes. *Tetranuclear iron(III) carboxylate clusters with 1,10-phenanthroline, and 2,2'-bipyridine: a new [Fe<sub>4</sub>(μ<sub>4</sub>-OHO)(μ-OH)<sub>2</sub>]<sup>7+</sup> core*. **J. Chem. Soc., Dalton Transaction**, 955-957 (2001) (I.F. 3,003).
21. J.-H. Agondanou, **G.A. Spyroulias**, J. Purans, G. Tsikalas, C. Souleau, A. Coutsolelos, S. Benazeth. *XAFS Study of Gadolinium and Samarium Bisporphyrinate Complexes*. **Inorganic Chemistry**, 40, 6088-6096 (2001) (I.F. 3,851).
22. **G.A. Spyroulias**, A.P. Despotopoulos C.P. Raptopoulou, A. Terzis, D. de Montauzon, R. Poilblanc, A.G. Coutsolelos. *Comparative Study of Structure-Properties relationship for Novel β-Halogenated Lanthanide Porphyrins and their Nickel and Free Bases Precursors, as a function of number and nature of Halogens atoms*. **Inorganic Chemistry**, 41, 2648-2659 (2002) (I.F. 3,851).
23. **G.A. Spyroulias**, S. Papazacharias, G. Pairas, P. Cordopatis. *Monitoring the Structural Consequences of Phe12DPhe12 and Leu15Aib15 substitution in h/r Corticotropin Releasing Hormone: Implications for Design of CRH antagonists*. **Eur. J. Biochemistry** 269, 6009-6019 (2002) (I.F. 3,164)
24. A.K. Boudalis, N. Lalioti, **G.A. Spyroulias**, C.P. Raptopoulou, A. Terzis, A. Bousseksou, V. Tangoulis, J.-P. Tuchagues, S. P. Perlepes. *Novel Rectangular [Fe<sub>4</sub>(μ<sub>4</sub>-OHO)(μ-OH)<sub>2</sub>]<sup>7+</sup> versus "Butterfly" [Fe<sub>4</sub>(μ<sub>3</sub>-O)<sub>2</sub>]<sup>8+</sup> Core Topology in the Fe<sup>III</sup> /RCO<sub>2</sub>/phen Reaction Systems (R=Me, Ph; phen=1,10-Phenanthroline): Preparation and Properties of [Fe<sub>4</sub>(OHO)(OH)<sub>2</sub>(O<sub>2</sub>CMe)<sub>4</sub>(phen)<sub>4</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>, [Fe<sub>4</sub>O<sub>2</sub>(O<sub>2</sub>CPh)<sub>7</sub>(phen)<sub>2</sub>](ClO<sub>4</sub>), and [Fe<sub>4</sub>O<sub>2</sub>(O<sub>2</sub>CPh)<sub>8</sub>(phen)<sub>2</sub>]*. **Inorganic Chemistry**, 41, 6474-6487 (2002) (I.F. 3,851).
25. **G.A. Spyroulias**, P. Nikolakopoulou, A. Tzacos, I. Gerothanassis, V. Magafa, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Comparison of the Solution Structures of Angiotensin I & II: Implication for Structure-Function Relationship*. **European Journal of Biochemistry**, 270, 2163-2173 (2003) (I.F. 3,164).
26. A. Galanis, **G.A. Spyroulias**, R. Pieratelli, A. Tzacos, A. Troganis, I.P. Gerothanassis, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Zinc-Binding in Peptide Models of ACE Active Sites studied through <sup>1</sup>H NMR & Chemical Shift Perturbation Mapping*. **Biopolymers**, 69, 244-252 (2003) (I.F. 2,545).
27. A. Tzacos, A. Galanis, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis, E. Manessi-Zoupa, I.P. Gerothanassis. *Structure-function discrimination of the N- and C- catalytic domains of human angiotensin-converting enzyme: Implications for Cl- activation and peptide hydrolysis mechanisms*. **Protein Engineering**, 16, 993-1003 (2003) (I.F. 2,664).
28. **G.A. Spyroulias**, A.S. Galanis, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Structural Features of Angiotensin-Converting Enzyme Catalytic Sites : Conformational Studies in Solution, Homology Models and Comparison With Other Zinc Metallopeptidases*. **Current Topics in Medicinal Chemistry**, 4, 403-429 (2004) (I.F. 4,400).
29. S.J. Berners-Price, I. Bertini, H.B. Gray, **G.A. Spyroulias**, P. Turano. *The stability of the cytochrome c scaffold as revealed by NMR spectroscopy*. **Journal of Inorganic Biochemistry**, 98, 814-823 (2004) (I.F. 2,423).
30. A.S. Galanis, **G.A. Spyroulias**, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Solid Phase Synthesis and Conformational Properties of ACE catalytic site peptides: The basis for a structural study on the enzyme-substrate interaction*. **Biopolymers**, 76, 512-526 (2004) (I.F. 2,545).
31. **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *Current Inhibition Concepts of Zinc Metallopeptidases involved in Blood Pressure Regulation*. **Current Enzyme Inhibition**, 1, 29-42 (2005).
32. P. Galanakis, **G.A. Spyroulias**, A.K. Rizos, P. Samolis, E. Krambovitis. *Conformational Properties of HIV-1 gp120/V3 Immunogenic Domains*. **Current Medicinal Chemistry**, 12, 1551-1568 (2005) (I.F. 4,904).

33. A.S. Galanis, D. Vahliotis, P. Sotiriou, **G.A. Spyroulias**, A. Nikolopoulou, B. Nock, T. Maina, P. Cordopatis. *3D Solution Structure of Tyr3 Octreotate derivatives in DMSO: Structure differentiation of peptide core due to chelate group attachment and biologically active conformation.* **Medicinal Chemistry** 1, 487-499 (2005).
34. A. Zompra, V. Magafa, F.N. Lamari, A. Nikolopoulou, B. Nock, T. Maina, **G.A. Spyroulias**, N. Karamanos, P. Cordopatis. *New GnRH Analogues containing conformationally restricted amino acids in positions 3 and 6: Direct Antiproliferative Effect on Breast Cancer Cells and Pituitary Binding Affinity.* **Journal of Peptide Research** 66, 57-64 (2005) (I.F. 1,741).
35. A.K. Rizos, I. Tsikalas, E. Krambovitis, M. Sioumpara, D. Morikis, P. Galanakis, **G.A. Spyroulias**. *Characterization of the interaction between peptides derived from the gp120/V3 domain of HIV-1 and the amino terminal of the chemokine receptor CCR5 by NMR spectroscopy and light scattering.* **Journal of Non-Crystalline Solids** 352, 4451-4458 (2006) (I.F. 1,264).
36. L. Banci, S. Ciofi-Baffoni, I. Bertini, N.G. Kandias, N. J. Robinson, **G.A. Spyroulias**, X.-C. Su, M. Vanarotti. *The delivery of thylakoid-copper observed by protein NMR.* **Proc. Natl Acad Sci. U.S.A.** 103, 8320-8325 (2006) (I.F. 10,231).
37. I. Bertini, I. Felli, L. Gonelli, R. Pieratelli, Z. Spyranti, **G.A. Spyroulias**. *Mapping protein-protein interaction by <sup>13</sup>C-detected heteronuclear NMR spectroscopy.* **J. Biomol NMR** 36, 111-122 (2006) (I.F. 2,180).
38. A.A. Zompra, F.N. Lamari, A.S. Galanis, V. Magafa, B. Nock, **G.A. Spyroulias**, T. Maina and P. Cordopatis. *Differential Impact on Pituitary Binding Affinity and Direct Antiproliferative Effect on Breast Cancer Cells of GnRH Analogues.* **Chemistry Today (Chimica Oggi)** 24, 16-18 (2006) (I.F. 0,318).
39. S.-S. M. Vamvakas, L. Leontiadis, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *Expression, purification and physicochemical characterization of the N-terminal active site of human Angiotensin Converting Enzyme (ACE).* **Journal of Peptide Science** 13, 31-36 (2007) (I.F. 1,803).
40. A. Vourekas, D. Kalavrizioti, I.K. Zarkadis, **G.A. Spyroulias**, C. Stathopoulos, D. Drinas. *A 40.7 kDa Rpp30/Rpp1p homologue is a protein subunit of Dictyostelium discoideum RNase P holoenzyme.* **Biochimie** 89, 301-310 (2007). (I.F. 2,899).
41. G.S. Papaefstathiou, A. Sofetis, C.P. Raptopoulou, A. Terzis, **G.A. Spyroulias**, T.F. Zafiropoulos. *2,2'-bipyridine, 1,10-phenanthroline and 2,2':6',2''-terpyridine in gallium(III) chemistry: Complexes containing the {Ga<sup>III</sup><sub>2</sub>(μ-OH)<sub>2</sub>}<sup>4+</sup> core.* **Journal of Molecular Structure** 837, 5-14 (2007). (I.F. 1,440).
42. A.A. Zompra, V. Magafa, D.G. Chryssanthi, F.N. Lamari, **G.A. Spyroulias**, T. Maina, B. Nock, N.K. Karamanos, P. Cordopatis. *Synthesis and Biological Evaluation of new GnRH Analogues on Pituitary and Breast Cancer cells.* **Int. J. Pept. Res. & Theur.** 13, 143-149 (2007).
43. A. Papakyriakou, **G.A. Spyroulias**, E. Sturrock, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Simulated Interactions between Angiotensin-Converting Enzyme and Substrate Gonadotropin-Releasing Hormone: Novel Insights into Domain-Selectivity.* **Biochemistry** 46, 8753-8765 (2007). (I.F. 3,368).
44. J. H. Agondanou, I. Nicolis, E. Curis, J. Purans, **G.A. Spyroulias**, A. G. Coutsolelos, S. Bénazeth. *Gadolinium Acetylacetonate Tetraphenyl Monoporphyrinate Complex and Some of its Derivatives: EXAFS Study and Molecular Dynamics Simulation.* **Inorganic Chemistry** 46, 6871-6879 (2007). (I.F. 4.123).
45. Z. Spyranti, G.A. Spyroulias, **G.A. Spyroulias**, E.D. Matzourani, T. Mavromoustakos, I. Friligou, T. Tselios, J. Matsoukas. *Bioactive Conformations of Cyclic Myelin Basic Protein (MBP) Peptide Analogues: Exploring the Structural Requirements for Experimental Autoimmune Encephalomyelitis (EAE) Reversal.* **Journal of Medicinal Chemistry** 50, 6039-6047 (2007). (I.F. 5,115).
46. M.A. Fousteris, A. Papakyriakou, A. Koutsourea, M. Manioudaki, E. Lampropoulou, E. Papadimitriou, **G.A. Spyroulias**, S.S. Nikolaropoulos. *Pyrrolo[2,3-a]carbazoles as potential CDK1 inhibitors. Synthesis, preliminary biological evaluation and binding mode through docking simulations.* **Journal of Medicinal Chemistry** 51, 1048-1052 (2008). (I.F. 4.898).
47. G. Dalkas, A. Papakyriakou, A. Vlamis-Gardikas, **G.A. Spyroulias**. *Low molecular weight inhibitors of the protease Anthrax Lethal Factor.* **Mini Reviews in Medicinal Chemistry** 8, 290-306 (2008). (I.F. 3,132).

48. M. Chondrou, A.D. Papanastasiou, **G.A. Spyroulias**, I.K. Zarkadis. *Three isoforms of Complement Properdin Factor P in trout. Cloning, Expression, Gene Organization and Constrained Modeling. **Developmental & Comparative Immunology** 12, 1454-1466 (2008).* (I.F. 2,833)
49. Z. Zhou, A. Pyriochou, A. Kotanidou, G.A. Dalkas, M. van Eickels, **G.A. Spyroulias**, C. Roussos A. Papapetropoulos. *Soluble guanylyl cyclase (sGC) activation by HMR-1766 (ataciguat) in cells exposed to oxidative stress. **American Journal of Physiology, Heart & Circulatory Physiology** 295, H1763-1771 (2008).* (I.F. 3,643)
50. L.A. Abriata, L. Banci, I. Bertini, S. Ciofi-Baffoni, P. Gkazonis, **G.A. Spyroulias**, A.J. Vila, S. Wang. *Mechanism of CuA assembly. **Nature Chemical Biology** 4, 599-601 (2008).* (I.F. 14,612)
51. N.G. Kandias, C.T. Chasapis, D. Bentrop, V. Episkopou, **G.A. Spyroulias**. *High-yield expression and NMR characterization of Arkadia E3 Ubiquitin Ligase RING-H2 finger domain. **Biochemical and Biophysical Research Communications** 378, 498-502 (2009).* (I.F. 2,648)
52. P.A. Galanakis, N.G. Kandias, A. Rizos, D. Morikis, E. Krambovitis, **G.A. Spyroulias**. *NMR evidence of charge-dependent interaction between various PND V3 and CCR5 N-terminal peptides. **Biopolymers – Peptide Science** 92, 94-109 (2009).* (I.F. 2,823).
53. G.A. Dalkas, A. Papakyriakou, A. Vlamis-Gardikas, **G.A. Spyroulias**. *Insights into the anthrax lethal factor-substrate interaction and selectivity using docking and molecular dynamics simulations. **Protein Science** 18, 1774-1785 (2009).* (I.F. 3,115)
54. S.-S.M. Vamvakas, L. Leondiadis, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *Folding in Solution of the C - Catalytic Protein Fragment of Angiotensin Converting Enzyme. **Journal of Peptide Science** 15, 504-510 (2009).* (I.F. 1,807)
55. C.T. Chasapis, **G.A. Spyroulias**. *E3 Ring Finger Ubiquitin ligases: Structure and Drug Design. **Current Pharmaceutical Design** 15, 3716-3731 (2009).* (I.F. 4,399)
56. G.A. Dalkas, D. Marchand, J.-C. Galleyrand, J. Martinez, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis, F.Cavelier. *A lipophilic captopril analogue binds to ACE with a lowest docking energy. **Journal of Peptide Science**, 16, 91-97 (2010).* (I.F. 1,807)
57. Z. Spyranti, T. Tselios, G. Deraos, J. Matsoukas, **G.A. Spyroulias**. *NMR Structural Elucidation of Myelin Basic Protein epitope 83-99 implicated in Multiple Sclerosis. **Amino Acids** 38, 929-936 (2010).* (I.F. 4,132)
58. N. Dimitropoulos, A. Papakyriakou, G.A. Dalkas, E.D. Sturrock, **G.A. Spyroulias**. *A Computational Approach to the Study of the Binding Mode of Dual ACE / NEP Inhibitors. **Journal of Chemical Information and Modeling** 50, 388-396 (2010).* (I.F. 3.643)
59. Z. Spyranti, M. Fragiadaki, V. Magafa, L. Borovickova, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis, J. Slaninova. *In position seven L- and D-Tic-substituted oxytocin and deamino oxytocin. NMR study and conformational speculations. **Amino Acids** 39, 539 - 548 (2010).* (I.F. 4,132)
60. A.S. Galanis, Z. Spyranti, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *Synthetic Peptides as Catalytic Site Maquettes of Angiotensin-I Converting Enzyme Catalytic Sites. **Bioinorganic Chemistry Applications** 2010, Article ID 820476, 13 pages (2010).* (I.F. 1,265)
61. P. Gkazonis, G.A. Dalkas, C. Chasapis, A. Vlamis-Gardikas, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *Purification and Biophysical Characterization of the Core Protease Domain of Anthrax Lethal Factor. **Biochemical and Biophysical Research Communications** 396, 643-647 (2010).* (I.F. 2,648)
62. S. Papazacharias, V. Magafa, N. Bernad, G. Pairas, **G.A. Spyroulias**, J. Martinez, P. Cordopatis. *Synthesis and Biological Evaluation of New CRH Analogues. **Bioinorganic Chemistry Applications** 2010, Article ID 252348, 8 pages (2010).* (I.F. 1,265)
63. C. Chasapis, A. Loutsidou, M.G. Orkoulas, **G.A. Spyroulias**. *Metal binding studies of native and engineered RING fingersdomains of Arkadia E3 ubiquitin ligase. **Bioinorganic Chemistry Applications** 2010, Article ID 323152, 7 pages (2010).* (I.F. 1,265)
64. G.A. Dalkas, C. Chasapis, P. Gkazonis, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *The NMR Conformational Dynamics of the Anthrax Lethal Factor (LF) catalytic center. **Biochemistry ACS** 49, 10767-10769 (2010).* (I.F. 3,226)
65. E.V. Pappa, A.A. Zompra, Z. Spyranti, Z. Diamantopoulou, G. Pairas, F.N. Lamari, P. Katsoris, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *Enzymatic Stability, Solution Structure, and Antiproliferative Effect on Prostate Cancer Cells of Leuprolide and New GnRH Peptide Analogs. **Biopolymers – Peptide Science** 96, 260-272 (2011).* (I.F. 2,823).



66. N. Dimitropoulos, A. Papakyriakou, G.A. Dalkas, C. Chasapis, K. Poulas, **G.A. Spyroulias**. *The role of glycosylation in toxin binding studied through in silico conformational dynamics on nAChR  $\alpha$ 1 subunit – toxin complexes*. **Proteins: Structure, Function & Bioinformatics** 79, 142-152 (2011). (I.F. 3,085)
67. P.A. Galanakis, F.N. Bazoti, J. Bergquist, K. Markides, **G.A. Spyroulias**, A. Tsaropoulos. *Study of the Interaction between the Amyloid Beta Peptide (1-40) and Antioxidant Compounds by NMR Spectroscopy*. **Biopolymers – Peptide Science** 96, 316-327 (2010). (I.F. 2,823).
68. C. Mikelis, M. Lamprou, M. Koutsoumpa, A.G. Koutsoubas, Z. Spyranti, A.A. Zompra, N. Spiliopoulos, A.A. Vradis, P. Katsoris, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis, J. Courty, E Papadimitriou. *A peptide corresponding to the C-terminal region of pleiotrophin inhibits angiogenesis in vivo and in vitro*. **Journal of Cellular Biochemistry** 112, 1532-1543 (2011). (I.F. 2,935).
69. C.T. Chasapis, A. Argyriou, P.-J. Corringer, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *Unraveling the conformational plasticity of the extracellular domain of a prokaryotic nAChR homologue in solution by NMR*. **Biochemistry ACS** 50, 9681-9683, (2011). (I.F. 3.422)
70. C.T. Chasapis, N.G. Kandias, V. Episkopou, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *NMR-based insights into the Conformational & Interaction properties of Arkadia RING-H2 E3 Ub Ligase*. **Proteins: Structure, Function & Bioinformatics** 80, 1484-1489 (2012). (I.F. 3.392)
71. E.V. Pappa, A.A. Zompra, Z. Spyranti, Z. Diamantopoulou, F.N. Lamari, P. Katsoris, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *Structure-Activity Studies of IGnRH-III through rational amino acid substitution and NMR conformational studies*. **Biopolymers – Peptide Science** 98, 525-534 (2012). (I.F. 2.870)
72. A. Asimakopoulou, P. Panopoulos, C.T. Chasapis, C. Coletta, Z. Zhou, G. Cirino, A. Giannis, C. Szabo, **G.A. Spyroulias**, A. Papapetropoulos. *Selectivity of commonly used pharmacological inhibitors for cystathionine beta synthase (CBS) and cystathionine gamma lyase (CSE)*. **British Journal of Pharmacology** 169, 922-932, (2013). (I.F. 4,409).
73. M. von Wantoch Rekowski, V. Kumar, Z. Zhou,; M. Bantzi, A. Marazioti, J. Moschner, **G.A. Spyroulias**, F. van den Akker, A. Giannis, A. Papapetropoulos. *Insights into soluble guanylyl cyclase activation derived from improved heme-mimetics*. **Journal of Medicinal Chemistry** 56, 8948–8952 (2013). (I.F. 5,614).
74. K.F. Konidaris, G.A. Dalkas, E. Katsoulakou, G. Pairas, C.P. Raptopoulou; F.N. Lamari; **G.A. Spyroulias**; E. Manessi-Zoupa. *ZnII/pyridyloxime complexes as potential reactivators of OP-inhibited acetylcholinesterase: in vitro and docking simulation studies* **Journal of Inorganic Biochemistry** 134, 12-19, (2014)
75. M. Apostolidi, D. Vourtsis, C.T. Chasapis, C. Stathopoulos, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**.  $^1\text{H}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{13}\text{C}$  assignment and secondary structure determination of two domains of La protein from *D. discoideum*. **Biomol NMR Assignments** 8, 47-(2014). (I.F. 0,720).
76. D. Vourtsis, C.T. Chasapis, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *NMR Conformational dynamics of an Anthrax Lethal Factor domain studied by multiple amino acid-selective labeling*. **Biochemical and Biophysical Research Communications** 450, 335-40 (2014).
77. S. Melekis, A.C. Tsika, C.T. Chasapis, I. Margiolaki, N. Papageorgiou, B. Coutard, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *NMR study of non-structural proteins Part I –  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  backbone and side-chain resonance assignment of macro domain from Mayaro virus (MAYV)*. **Biomol NMR Assignments** 9, 191-195 (2015).
78. A. Argyriou, C.T. Chasapis, M. Apostolidi, P. Konstantinidou, C. Stathopoulos, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *Solution NMR assignment and secondary structure determination of RRM2 domain from a lower eukaryote*. **Biomol NMR Assignments** 9, 219-222 (2015).
79. G. Makrynitsa, D. Ntonti, K. Marousis, A.C. Tsika, J. Lichière, N. Papageorgiou, B. Coutard, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *NMR study of non-structural proteins Part II –  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  backbone and side-chain resonance assignment of macro domain from Venezuelan Equine Encephalitis virus (VEEV)*. **Biomol NMR Assignments** 9, 247-251 (2015).
80. C.T. Chasapis, A. Argyriou, M. Apostolidi, P. Konstantinidou, D. Bentrop, C. Stathopoulos, **G.A. Spyroulias**.  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$  Backbone and side-chain resonance assignment of the LAM-RRM1 N-terminal module of La protein from *Dictyostelium discoideum*. **Biomol NMR Assignments** 9, 303-307 (2015).

81. I. Sharina, M. Sobolevsky, A. Papakyriakou, N. Rukoyatkina, **G.A. Spyroulias**, S. Gambaryan, E. Martin. *The fibrate gemfibrozil is an NO- and heme-independent activator of soluble guanylyl cyclase: in vitro studies.* **British Journal of Pharmacology** 172, 2316-29 (2015).
82. D. Liourdi, P. Kallidonis, I. Kyriazis, A. Tsamandas, D. Karnabatidis, P. Kitrou, **G.A. Spyroulias**, O.N. Kostopoulou, K. Marousis, D.L. Kalpaxis, D.S. Goumenos, E. Liatsikos. *Evaluation of the distribution of Paclitaxel by Immunohistochemistry and Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy after the application of Drug-eluting balloon in porcine ureter.* **Journal of Endourology** 29, 580-9 (2015).
83. L.L. Eggink, **G.A. Spyroulias**, N.G. Jones, C.V. Hanson J.K. Hooper. *A peptide mimetic of 5-acetylneuraminic acid-galactose binds with high avidity to siglecs and NKG2D.* **PLoS One** 10, e0130532 (2015)
84. T. Katsila, **G.A. Spyroulias**, G.P. Patrinos, M.-T. Matsoukas. *Computational approaches in target identification and drug discovery* **Computational and Structural Biotechnology Journal** 14, 177-84, (2016).
85. A. Tsika, D.S. Chatzileontiadou, D. Leonidas, **G.A.Spyroulias**. <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C and <sup>15</sup>N Backbone and side-chain resonance assignment of human Angiogenin **Biomol NMR Assignments** 10, 379-383 (2016).
86. I.I. Alexandropoulos, A. Argyriou, K. Marousis, S. Topouzis, A. Papapetropoulos, **G.A.Spyroulias**. <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C and <sup>15</sup>N backbone and side-chain resonance assignment of Nostoc sp. C139A variant of the Heme-Nitric Oxide/Oxygen Binding(H-NOX) domain. **Biomol NMR Assignments** 10, 395-400 (2016).
87. D. Ntountaniotis, M. Vanioti, G.G. Kordopati, T.F. Kellici, K.D. Marousis, T. Mavromoustakos, **G.A. Spyroulias**, S.Golic Grdadolnik, T.V. Tselios. *A combined NMR and molecular dynamics simulation study to determine the conformational properties of rat/mouse 35-55 Myelin Oligodendrocyte Glycoprotein epitope implicated in the induction of Experimental Autoimmune Encephalomyelitis,* **Journal of Biomolecular Structure & Dynamics** 35, 1559-67 (2017).
88. M. Suarez-Diez, J. Adam, J. Adamski, S.A. Chasapi, C. Luchinat, A. Peters, C. Prehn, C. Santucci, A. Spyridonidis, **G.A. Spyroulias**, L. Tenori, R. Wang-Sattler, E. Saccenti. *Plasma and serum metabolite association networks: comparability within and between studies using NMR and MS profiling* **Journal of Proteome Research** 16, 2547-2559, (2017).
89. M-T. Matsoukas & **G.A. Spyroulias**. *Molecular determinants and dynamic properties of the Growth Hormone Releasing Hormone Receptor (GHRHR), a class B GPCR, bound to GHRH* **Molecular BioSystems** 13, 1313-1322 (2017).
90. M. Birkou, A. Loutsidou, C.T. Chasapis, D. Bentrop, M. Leli, T. Herrmann, V. Episkopou, **G.A. Spyroulias**. *A residue-specific insight into the Arkadia E3 ubiquitin ligase activity and conformational plasticity.* **Journal of Molecular Biology** 429, 2373-2386 (2017).
91. E. Zvintzou, M. Lhomme, S.A. Chasapi, S. Filou, V. Theodoropoulos, E. Xapapadaki, A. Kontush, **G.A. Spyroulias**, K.E. Kypreos. *Pleiotropic Effects of Apolipoprotein C3 on HDL Functionality and Adipose Tissue Metabolic Activity.* **Journal of Lipid Research** 58, 1869-1883, (2017).
92. M. Lykouras, A.C. Tsika, J. Lichièrre, N. Papageorgiou, B. Coutard, **G.A. Spyroulias**. *NMR study of non-structural proteins Part III – : <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N backbone and side-chain resonance assignment of macro domain from Chikungunya virus (VEEV).* **Biomol NMR Assignments** 12, 31-35, (2018).
93. D.S.M. Chatzileontiadou, A.C. Tsika, Z. Diamantopoulou, J. Delbé, J. Badet, J. Courty, V. Parmenopoulou, D. Komiotis, J.M. Hayes, **G.A. Spyroulias**, D.D. Leonidas. *Triazole pyrimidine nucleosides are potent inhibitors of human Angiogenin in vivo. Evidence for novel action at the cell binding site revealed by heteronuclear NMR spectroscopy and modelling studies.* **ChemMedChem** 13, 259-269 (2018).
94. iNEXT Consortium. *iNEXT: a European facility network to stimulate translational structural biology.* **FEBS Lett** 592, 1909-1917 (2018).

95. K.D. Marousis, A.C. Tsika, M. Mbirou, M.-T. Matsoukas, **G.A. Spyroulias**. *Lead Identification through the synergistic action of Biomolecular NMR and in silico methodologies*. **Methods in Molecular Biology** 1824, 299-316, (2018).
96. M.S. Twigg, L. Tripathi, A. Zompra, K. Salek, V.U. Irorere, T. Gutierrez, **G.A. Spyroulias**, R. Marchant, I.M. Banat. *Identification and Characterisation of Short Chain Rhamnolipid Production in a Previously Uninvestigated, Non-Pathogenic Marine Pseudomonad*. **Applied Microbiology and Biotechnology** 102, 8537–8549, (2018).
97. G. Makrynitsa, A. Argyriou, A. Zompra, **G.A.Spyroulias**, S. Topouzis. *Therapeutic Targeting of the Soluble Guanylate Cyclase*. **Current Medicinal Chemistry**, 26, 2730-2747, (2019)
98. V. Magafa, M.-T. Matsoukas, V. Karageorgos, E. Dermitzaki, R. Exarchakou, E.K. Stylos, M. Pardalos, A.N. Margioris, G. Varvounis, A.G. Tzakos, **G.A. Spyroulias**, G. Liapakis. *Novel stable analogues of the Neurotensin C-terminal hexapeptide containing unnatural amino acids*. **Amino Acids** 51, 1009-1022, (2019).
99. L. Tripathi, M. Twigg, A. Zompra, K. Salek, V.U. Irorere, T. Gutierrez, **G.A. Spyroulias**, R. Marchant, I.M. Banat. *Biosynthesis of rhamnolipid by a Marinobacter species expands the paradigm of biosurfactant synthesis to a new genus of the marine microflora*. **Microbial Cell Factories**, 18, 164, (2019).
100. G.I. Makrynitsa, D. Ntonti, K.D. Marousis, M. Birkou, M.-T. Matsoukas, S. Asami, D. Bentrop, N. Papageorgiou, B. Canard, B. Coutard, **G.A. Spyroulias**. *Conformational plasticity of the VEEV macro domain is important for binding of ADP-ribose*. **Journal of Structural Biology** 206, 119-127, (2019).
101. A. Tsika, S. Melekis, S.-A. Tsatsouli, N. Papageorgiou, M.J. Maté, B. Canard, B. Coutard, D. Bentrop, **G.A. Spyroulias**. *Deciphering the nucleotide and RNA binding selectivity of the Mayaro virus macro domain*. (2019) **Journal of Molecular Biology** 431, 2282-2296, (2019).
102. K. Marousis, M. Birkou, A. Asimakopoulou **G.A. Spyroulias**. *<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C and <sup>15</sup>N Backbone and side-chain resonance assignment of Ubch7 E2 Ubiquitin Conjugating Enzyme* **Biomol. NMR Assign.** 00, 000-000, (2020). 10.1007/s12104-019-09923-9
103. T. Mavromoustakos, V. Karageorgos, J. Andreadelis, E. Dermitzaki, G. Kordopati, E. Stylos, K. Spyridaki, S. Sakellaris, M. Vanioti, G. Leonis, K.D. Marousis, A. Kostagianni, G. Kokotos, M. Venihaki, **G.A. Spyroulias**, T. Tselios, A. Tzakos, A. Margioris, G. Liapakis. *Design, synthesis and pharmacological evaluation of a tripeptide targeting the extracellular N-domain of CRF1 receptor*. (2019). **Amino Acids**, submitted
104. I. Georgakopoulou, S.A. Chasapi, S.E. Bariamis, A. Varvarigou, M. Spraul, **G.A. Spyroulias**. *Metabolic changes in early neonatal life: NMR analysis of the neonatal metabolic profile to monitor postnatal metabolic adaptations*. (2019). **Metabolomics**, under revision
105. Y. Hiruma, M-T Matsoukas, W. G. Touw, **G.A. Spyroulias**, G. Kops, M. Ubbink, A. Perrakis. *The MPS1 kinase NTE region has helical propensity and preferred conformations towards the TPR domain* Submitted for publication
106. E. Kaliatsi, A. Sokat, A. Argyriou, G. Bouras, **G.A. Spyroulias**, C. Stathopoulos. *Modulatory effects of human La protein overexpression in cancer cell lines under stress conditions*. (2019) To be submitted.
107. G.I. Makrynitsa, A. Argyriou, M. Bantzi, S. Topouzis, Sandner, A. Giannis, A. Papapetropoulos, G.A.Spyroulias. *HNOX abolishes plasticity upon the replacement of the heme by cinaciguat*. Manuscript in preparation

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1799-3312>

**Συγγραφέας Αλληλογραφίας (από το 2003) : 38 @ 101**

**Σύνολο Ετεροαναφορών : >2370 & h-index 27, h10-index 55**



**PDB – Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org/pdb/>)**

- (1) **1GIW** Solution Structure of reduced Horse Heart cytochromes c, NMR, Minimized Average Structure (**1998**)
- (2) **2GIW** Solution Structure of reduced Horse Heart cytochromes c, NMR, 40 structures (**1998**).
- (3) **1GO9** Monitoring the structural consequences of Phe12->Dphe12 and Leu15->Aib15 substitution in h/r Corticotropin Releasing Hormone: Implications for design of CRH antagonists, NMR Minimized Average Structure (**2001**)
- (4) **1GOE** Monitoring the structural consequences of Phe12->Dphe12 and Leu15->Aib15 substitution in h/r Corticotropin Releasing Hormone: Implications for design of CRH antagonists, NMR 40 Structures (**2001**)
- (5) **1MNY** Dimethyl propionate ester heme-containing cytochrome b5 (**2002**).
- (6) **1N9U** Differences and Similarities in Solution Structures of Angiotensin I & II: Implication for Structure-Function Relationship (Angiotensin-I), NMR 21 structures (**2003**).
- (7) **1N9V** Differences and Similarities in Solution Structures of Angiotensin I & II: Implication for Structure-Function Relationship (Angiotensin-II), NMR 21 structures (**2003**).
- (8) **1YL8** 3D Solution Structure of [Tyr3]Octreotate derivatives in DMSO, NMR 21 Structures (**2005**).
- (9) **1YL9** 3D Solution Structure of [Tyr3]Octreotate derivatives in DMSO, NMR 21 Structures (**2005**).
- (10) **1YY1** NMR Conformational Analysis of LHRH and its analogues, NMR 21 Structures (**2006**).
- (11) **1YY2** NMR Conformational Analysis of LHRH and its analogues, NMR 21 Structures (**2006**).
- (12) **2GCF** Solution structure of the N-terminal domain of the copper(I) ATPase PacS in its apo form, NMR 21 Structures (**2006**).
- (13) **2K6W** Solution structures of apo PCuA (*trans* conformation of the peptide bond involving the nitrogen of P14) (**2008**).
- (14) **2K70** Solution structures of copper loaded form PCuA (*cis* conformation of the peptide bond involving the nitrogen of P14), NMR 31 Structures (**2008**).
- (15) **2K6Y** Solution structures of apo form PCuA (*cis* conformation of the peptide bond involving the nitrogen of P14), NMR 31 Structures (**2008**).
- (16) **2K6Z** Solution structures of copper loaded form PCuA (*trans* conformation of the peptide bond involving the nitrogen of P14), NMR 31 Structures (**2008**).
- (17) **2K6V** Solution structures of apo Sco1 protein from Thermus Thermophilus, NMR 31 Structures (**2008**).
- (18) **2KIZ** Solution structure of Arkadia RING-H2 finger domain, NMR 31 Structures (**2009**).
- (19) **2LOR** NMR structure of the C-terminal Catalytic core domain of Anthrax Lethal Factor, 31 models (**2010**).
- (20) **2M5W** NMR Solution structure of the La motif of Dictyostelium discoideum La protein (**2013**).
- (21) **5IQ5** NMR solution structure of Mayaro virus macro domain (**2016**).
- (22) **5ISN** NMR solution structure of macro domain from Venezuelan equine encephalitis virus (**2016**).
- (23) **5LG0** Solution NMR structure of Tryptophan to Alanine mutant of Arkadia RING domain, 31 models (**2016**).
- (24) **5LG7** Solution NMR structure of Tryptophan to Arginine mutant of Arkadia RING domain, 31 models (**2016**).
- (25) **5MQX** NMR solution structure of macro domain from Venezuelan equine encephalitis virus (VEEV) in complex with ADP-ribose, 21 models (**2016**).
- (21) **00000** NMR Solution structure of the RRM1 domain of Dictyostelium discoideum La protein (**2015**).
- (22) **00000** NMR Solution structure of the RRM2 domain of Dictyostelium discoideum La protein (**2015**).
- (23) **00000** NMR Solution structure of the LAM-RRM1 domain of Dictyostelium discoideum La protein (**2015**).
- (24) **00000** Solution structure of Arkadia RING-H2 W972R finger domain, NMR 21 Structures (**2014**).
- (25) **00000** Solution structure of Arkadia RING-H2 W972A finger domain, NMR 21 Structures (**2014**).
- (26) **00000** Solution structure of Arkadia RING H962C domain, NMR 21 Structures (**2014**)
- (27) **00000** Solution structure of Arkadia RING H965C domain, NMR 21 Structures (**2014**)

**BMRB – Biological Magnetic Resonance Bank (<http://www.bmrwisc.edu/> )**

- (1) **4189** Cytochrome c reduced (from Horse heart) (1999)
- (2) **20015** NMR evidence of charge-dependent interaction between various PND V3 and CCR5 N-terminal peptides, SF2, NMR 21 structures (2008)
- (3) **20019** NMR evidence of charge-dependent interaction between various PND V3 and CCR5 N-terminal peptides, MN, NMR 21 structures (2008)
- (4) **20020** NMR evidence of charge-dependent interaction between various PND V3 and CCR5 N-terminal peptides, LAI, NMR 21 structures (2008)
- (5) **20062** 3D Solution Structure of MBP83-99 peptide in DMSO, NMR 21 structures (2008)
- (6) **15948**  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , and  $^{15}\text{N}$  Chemical Shift Assignments for the RING finger of the E3 ubiquitin ligase Arkadia (RNF111) (2008)
- (7) **16735** NMR resonance assignment of the apo C-terminal polypeptide of the Anthrax Lethal Factor catalytic domain (2010)
- (8) **17695** Backbone Chemical Shift Assignments of the Extracellular domain of GLIC, a prokaryotic nAChR homologue (2011)
- (9) **18620** NMR Chemical Shift Assignments of N terminal RRM domain of La protein (2012)
- (10) **18621** NMR Chemical Shift Assignments of N terminal La motif domain of La protein (2012)
- (11) **19803** NMR resonance assignment of the N-terminal polypeptide of the Anthrax Lethal Factor (2014)
- (12) **19927** NMR study of non-structural proteins –  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  resonance assignment of macro domain from Mayaro virus (MAYV) (2014)
- (13) **19967** NMR Chemical Shift Assignments of C terminal RRM domain of La protein from Dictyostelium Discoedium (2014)
- (14) **25132** NMR study of non-structural proteins – Part II.  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  backbone & side-chain resonance assignment of macro domain from Venezuelan Equine Encephalitis virus (VEEV) (2014)
- (15) **25239** NMR Chemical Shift Assignments of LAM-RRM1 of La protein (2014)
- (16) **25248**  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , and  $^{15}\text{N}$  Chemical Shift Assignments for the W972R mutant of Arkadia (RNF111) E3 RING domain (2014)
- (17) **25249**  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , and  $^{15}\text{N}$  Chemical Shift Assignments for the W972A mutant of Arkadia (RNF111) E3 RING domain (2014)
- (18) **25351**  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$  Chemical Shift Assignments for the H962C mutant of Arkadia (RNF111) E3 RING domain (2014)
- (19) **25392**  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$  Chemical Shift Assignments for the H965C mutant of Arkadia (RNF111) E3 RING domain (2014)
- (20) **26748** NMR study of Met-1 Human Angiogenin -  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  backbone and side chain resonance assignment (2016)
- (21) **26753** NMR study of non-structural proteins -  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  resonance assignment of macro domain from Venezuelan Equine Encephalitis virus (VEEV) in complex with ADP-ribose (2016)
- (22) **26048**  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  backbone and side-chain resonance assignment of *Nostoc sp.* C139A variant of the heme-nitric oxide/oxygen binding (H-NOX) domain (2016)
- (23) **00000** NMR study of non-structural proteins -  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  resonance assignment of macro domain from Mayaro virus (MAYV) in complex with ADP-ribose (2016)

## Λοιπές Δημοσιεύσεις - (Α) Βιβλία :

---

- A1.** A. Coutsolelos, **G.A.Spyroulias**. "Chapter 4: NMR of Organozinc compounds -  $^{67}\text{Zn}$  NMR, a tool for coordination chemistry problems".  
In "The Chemistry of Organic Zinc Compounds", Zvi Rappoport (Editor), Ilan Marek (Editor), John Wiley & Sons, Ltd., 2006.
- A2.** T. Mavromoustakos, S. Golic Grdadolnik, M. Zervou, P. Zoumpoulakis, C. Potamitis, A. Politi, E. Mantzourani, J. A. Platts, C. Koukoulitsa, P. Minakakis, G. Kokotos, T. Tselios, J. Matsoukas, S. Durdagi, M.G. Papadopoulos, D.P. Papahatjis, Z.S. Spyranti, G.A. Dalkas, **G.A. Spyroulias**,. **Chapter 7: Putative Bioactive Conformers of Small Molecules: A Concerted Approach Using NMR Spectroscopy and Computational Chemistry**.  
In "Medicinal Chemistry Research progress", Editors: G.P. Colombo & S. Ricci, Nova Science Publishers, Inc., 2008.
- A3.** **G.A. Spyroulias**. Peptide substrate selectivity and Dual Inhibitors of ACE and NEP vasopeptidases  
In "Essays on Contemporary Peptide Science": 75-94 ISBN: 978-81-308-0428-6. Editor: Paul Cordopatis, 2011.

## Λοιπές Δημοσιεύσεις - (Β) Πρακτικά Διεθνών Συνεδρίων & Βιβλία :

---

- B1.** A. Coutsolelos, **G.A.Spyroulias**, S. Benazeth, A. Gaudemer. *Exafs of Homoleptic and Heteroleptic bis-porphyrinates complexes, models for photosynthetic systems*  
**Abstr. Pap. Am. Chem. Soc.** 210: 562-Inorg Part 1, Aug 20, (1995).
- B2.** F. Arnesano, L. Banci, I. Bertini, I. Felli, P. Hajjeva, D. Koulougliotis, C. Luchinat, A. Rosato, **G. Spyroulias**, P. Turano, M.-S. Viezzoli. *Cytochrome b5*.  
**Journal of Inorganic Biochemistry** 86, 495, (2001).
- B3.** S. Papazacharias, V. Magafa, A. Gravanis, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *Synthesis, Biological Evaluation and Conformational Analysis of New h/r Corticotropin Releasing Hormone Analogues*.  
**Solid Phase Synthesis and Combinatorial Chemical Libraries** (R. Epton, Ed., Mayflower Worldwide Ltd., Kingswinford), p. 333, (2001).
- B4.** **G.A. Spyroulias**, S. Papazacharias, A. Galanis, P. Cordopatis. *Conformational Analysis of Biomolecules in Solution : NMR - 3D Structures - Biological Implications*.  
**Drug Discovery and Design-Medical Aspects**, (I. Matsoukas & T. Mavromoustakos, Eds, IOS Press), 188-204, (2002).
- B5.** A. Zompra, **G.A. Spyroulias**, V. Magafa, P. Cordopatis. *Synthesis and Structural Investigation of a Synthetic LHRH Analogue in Solution*.  
**Drug Discovery and Design-Medical Aspects**, (I. Matsoukas & T. Mavromoustakos, Eds, IOS Press), 205-216, (2002).
- B6.** M. Fragkiadaki, S. Koumentakos, D. Raptis, V. Magafa, **G.A. Spyroulias**, J. Slaninová, P. Cordopatis. *Synthesis, Biological Evaluation & NMR Solution Structural Models of New Oxytocin analogues*.  
**Drug Discovery and Design-Medical Aspects**, (I. Matsoukas & T. Mavromoustakos, Eds, IOS Press), 217-227, (2002).
- B7.** A.S. Galanis, A.G. Tzacos, **G.A. Spyroulias**, A.N. Troganis, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, I.P. Gerothanassis, P. Cordopatis. *Synthesis and Solution Structure of the Two Peptides that Represent the Active – Zinc Containing – Sites of Angiotensin Converting Enzyme (ACE)*.  
**Peptides 2002**, (E. Benedetti, C. Pedone, Eds.) 802-803.
- B8.** A. Zompra, **G.A. Spyroulias**, V. Magafa, P. Cordopatis. *Synthesis and Structural Studies of New Analogues of the Decapeptide Luteinizing Hormone-Releasing Hormone (LHRH)*.  
**Peptides 2002**, (E. Benedetti, C. Pedone, Eds.) 708-709.
- B9.** M. Fragiadaki, S. Koumentakos, V. Magafa, **G.A. Spyroulias**, E. Manessi-Zoupa, J. Slaninová, Paul Cordopatis. *Synthesis, Biological Activity and Conformational Study of New Oxytocin Analogues*.  
**Peptides 2002**, (E. Benedetti, C. Pedone, Eds.) 552-553.
- B10.** P. Sotiriou, A.S. Galanis, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis, B. Nock, A. Nikolopoulou, E. Chiotellis, T. Maina. *Conformational Studies of a new tetraamine-functionalized Tyr<sup>3</sup>-octreotate derivative (Demotate)*.  
**Peptides 2002**, (E. Benedetti, C. Pedone, Eds.) 706-707.

- B11. A.S. Galanis, P. Nikolakopoulou, **G.A. Spyroulias**, A. Tzakos, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, I. Gerothanassis, P. Cordopatis. *Conformational Studies of synthetic peptides that represent the apoform of the Angiotensin Converting Enzyme (ACE) Active Centers*. **3<sup>rd</sup> Hellenic Forum on Bioactive Peptides**, (P. Cordopatis, Ed.) 217-225, (2003).
- B12. P. Sotiriou, A.S. Galanis, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis, B. Nock, A. Nikolopoulou, E. Chiotellis, T. Maina. *Synthesis and Conformational Studies through NMR Spectroscopy of new Bioactive Somatostatin Analogues Bearing Chelate Substituents*. **3<sup>rd</sup> Hellenic Forum on Bioactive Peptides**, (P. Cordopatis, Ed.) 377-382, (2003).
- B13. A. Zompra, **G.A. Spyroulias**, V. Magafa, P. Cordopatis. *Design and Synthesis of a New Analogues of the Decapeptide Luteinizing Hormone-Releasing Hormone (LHRH)*. **3<sup>rd</sup> Hellenic Forum on Bioactive Peptides**, (P. Cordopatis, Ed.) 467-472, (2003).
- B14. A.Zompra, D. Vachliotis, **G.A. Spyroulias**, V. Magafa, P. Cordopatis. *Synthesis and Structural Investigation of New Leuprolide Analogues*. *Biologically Active Peptides VIII, Prague, 2003*, (Abstract Book, p. 51), **Collection Symposium Series (Vol. 6), Czech**, pp. 122-124, (2003).
- B15. A. Galanis, **G.A. Spyroulias**, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Structural Studies Through <sup>1</sup>H NMR Spectroscopy of Somatic Angiotensin Converting Enzyme (ACE) Active Sites and Comparison with Testis ACE Crystal Structure*. *Biologically Active Peptides VIII, Prague, 2003*, (Abstract Book, p. 21), **Collection Symposium Series (Vol. 6), Czech**, pp. 29-31, (2003).
- B16. **G.A. Spyroulias**, A. Galanis, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *NMR Models of the Angiotensin-1 Converting Enzyme Zn(II) Catalytic Sites: The Basis for a Structural Study on the Enzyme-Substrate Interaction*. **Peptides 2004**, (H. Gilon, M. Flegel, M. Friedkin and J. Slaninova, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 10*, 280 (2004).
- B17. A. Zompra, A. Nikolopoulou, **G.A. Spyroulias**, F. Lamari, V. Magafa, B. Nock, T. Maina, P. Cordopatis. *Influence on Binding Affinity of Leuprolide Analogues Modified in Position 6 with  $\alpha,\alpha$ -Dialkyl Amino Acids*. **Peptides 2004**, (H. Gilon, M. Flegel, M. Friedkin and J. Slaninova, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 10*, 240 (2004).
- B18. S. Vamvakas, L. Leondiadis, **G.A. Spyroulias**, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Overexpression of N-Terminal Active Site of Human Angiotensin Converting Enzyme (ACE 361-468) on E. Coli Cells*. **Peptides 2004**, (H. Gilon, M. Flegel, M. Friedkin and J. Slaninova, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 10*, 130 (2004).
- B19. **G.A. Spyroulias**, A.S. Galanis, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *NMR Models of the Angiotensin-1 Converting Enzyme Zn(II) Catalytic Sites : The basis for a structural study on the enzyme-substrate interaction*. **Peptides 2004**, (H. Gilon, M. Flegel, M. Friedkin and J. Slaninova, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 10*, 130 (2004).
- B20. G. Vlachopoulos, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *NMR Solution Structure Determination of Biomolecules and NMR-driven Docking Simulations of Biomolecular complexes*. **Lecture Series on Computer and Computational Sciences** pp. 1121-1125, (2004).
- B21. S. Vamvakas, L. Leondiadis, **G.A. Spyroulias**, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa and P. Cordopatis. *Biotechnological Production of a Human Angiotensin I-Converting enzyme Peptide*. **Natural Peptides to Drugs**, Zermatt, Switzerland, November 2004 (Abstract Book, p. 143).
- B22. G. Vlachopoulos, A. Papakyriakou, G. Dalkas, **G.A. Spyroulias**, P. Cordopatis. *In silico evaluation of bioactive compounds: Docking Simulations based Enzyme-Inhibitor Interaction compared with X-ray models*. **Lecture Series on Computer and Computational Sciences 4**, 1379-1382, (2005)
- B23. A. Zompra, E. Athanasopoulou, A. Thomopoulou, A. Nikolopoulou, B. Nock, Th. Maina, V. Magafa, F.N. Lamari, **G.A. Spyroulias**, N.K. Karamanos, P. Cordopatis. *Direct Antiproliferative Effect on Breast Cancer Cells of New Leuprolide Analogues with Modifications in Position 3 & 6*. **Peptides 2006**, (K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 12*, 102 (2006).
- B24. A. Papakyriakou, G.F. Vlachopoulos, **G.A. Spyroulias**, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE) – Substrate Interaction through Molecular Dynamics Simulations*. **Peptides 2006**, (K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 12*, 189 (2006).



- B25.** G.A. Dalkas, A. Papakyriakou, A. Vlamis-Gardikas, **G.A. Spyroulias**, G. Pairas, P. Cordopatis. *Anthrax Lethal Factor (ALF) – Substrate Interaction through Molecular Dynamics Simulations*. **Peptides 2006**, (K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 12*, 189 (2006).
- B26.** A. Papakyriakou, P. Galanakis, P. Gkazonis, **G.A. Spyroulias**. *Structure Variation in E3 Ligases Ubiquitination Platform*. **Peptides 2006**, (K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 12*, 191 (2006).
- B27.** P.A. Galanakis, N. Kandias, **G.A. Spyroulias**, M. Sioumbara, D. Morikis, A. Rizos, E. Krambovitis. *NMR Structural Analysis of the HIV-1 gp120 V3 – CCR5 co-receptor N-terminal interaction*. **Peptides 2006**, (K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 12*, 196 (2006).
- B28.** A. Galanis, Z. Spyraniti, N. Tsami, **G.A. Spyroulias**, E. Manessi-Zoupa, G. Pairas, I.P. Gerothanassis, P. Cordopatis. *An NMR Study of the Interaction between Bradykinin and Angiotensin-I and Synthetic Peptide-based Angiotensin-I Converting Enzyme Catalytic Site Maquettes (CSM)*. **Peptides 2006**, (K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 12*, 196 (2006).
- B29.** S. Vamvakas, L. Leondiadis, **G.A. Spyroulias**, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Secondary Structure Analysis of two recombinant peptides from active sites of Human Angiotensin Converting Enzyme (ACE)*. **Peptides 2006**, (K. Rolka, P. Rekowski, J. Silberring, Eds.), *J. Peptide Science, Suppl. Vol. 12*, 200 (2006).
- B30.** G.A. Dalkas, A. Papakyriakou, A. Vlamis-Gardikas, **G.A. Spyroulias**. *Docking and Molecular Dynamics Simulations to gain an atomic level insight into Anthrax Lethal Factor (LF) Substrate interaction*. **3rd Conference of the Hellenic Society for Computational Biology and Bioinformatics HSCBB08**, CERTH, Thessaloniki, GREECE, p.p. 43-45.
- B31.** P. Gkazonis, A. Papakyriakou, **G.A. Spyroulias**. *Conformational Plasticity of Ring finger E3 Ubiquitin ligases of p53 tumor suppressor protein*. **3rd Conference of the Hellenic Society for Computational Biology and Bioinformatics HSCBB08**, CERTH, Thessaloniki, GREECE, p.p. 51-53.
- B32.** N. Tsami, A. Galanis, **G.A. Spyroulias**, G. Pairas, E. Manessi-Zoupa, P. Cordopatis. *Angiotensin-I/Captopril Competitive Interaction Studies with 46-residues Catalytic Site Maquettes (CSM) of Angiotensin-I Converting Enzyme through NMR Studies*. **Peptides 2008**.
- B33.** **G.A. Spyroulias**, C.T. Chasapis, A. Argyriou, D. Bentrop. *Isotope labeling strategies for solution NMR studies of high-molecular-weight protein drug-targets*. **Peptides 2012**, (G. Kokotos, V. Constantinou-Kokotou, J. Matsoukas Eds.) p. 58-59.
- B34.** G. I. Makrynitsa, M. Lykouras, **G.A. Spyroulias**, M.-T. Matsoukas. *In silico drug design*. **eLS**, 0000, (2018)

### **Λοιπές Δημοσιεύσεις - (Γ) Πρακτικά Εθνικών Συνεδρίων & Βιβλία :**

- Γ1.** **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Α.Γ. Κουτσολέλος, *13<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Αθήνα, Σεπτέμβριος 1991*. Πορφυρινικά σύμπλοκα με ελαφρά ιόντα της σειράς των Λανθανιδών. Σεπτέμβριος 1991, Σελ.11-14.
- Γ2.** **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Σπ. Παπαζαχαρίας, Ε. Μάνεση-Ζούπα, Γ. Πάιρας, Π. Κορδοπάτης, *18<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Αθήνα, Μάρτιος 2001*. 3D Δομή σε διάλυμα συνθετικών αναλόγων της CRH μέσω φασματοσκοπίας NMR – Συμπεράσματα και Σχεδιασμός νέων αναλόγων. Σελ. 32-35.
- Γ3.** Μ. Φραγκιαδάκη, Σ. Κουμεντάκος, Π. Νικολακοπούλου, Ν. Ασημομύτης, Β. Μαγκαφά, **Γ. Α. Σπυρούλιας**, J. Sfanipona, Π. Κορδοπάτης, *18<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Αθήνα, Μάρτιος 2001*. Σύνθεση και Διαμορφωτική ανάλυση νέων αναλόγων της Ωκυτοκίνης με τροποποιήσεις στις θέσεις 8 και 9 του πεπτιδικού σκελετού. Σελ. 568-571.
- Γ4.** Σπ. Παπαζαχαρίας, **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Α. Γραβάνης, Π. Κορδοπάτης

**Φαρμακευτική, 15, 12-23, (2002).**

- Γ5. Α.Σ. Γαλάνης, **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Β. Μαγκαφά, Γ. Πάϊρας, Ε. Μάνεση-Ζούπα, Α. Τζάκος, Α. Τρογκάνης, Ι. Γεροθανάσης και Π. Κορδοπάτης, *10ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Φαρμακοχημείας, Αθήνα, Ιανουάριος 2002*, Διερεύνηση των Ενεργών Κέντρων του Μετατρεπτικού Ενζύμου της Αγγειοτενσίνης. Σελ. 48, Α29.
- Γ6. Α. Ζώμπρα, Γ. Μότσιος, **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Γ. Πάϊρας, Β. Μαγκαφά και Π. Κορδοπάτης, *10ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Φαρμακοχημείας, Αθήνα, Ιανουάριος 2002*.  
Βελτιωμένη Μέθοδος Σύνθεσης Αναλόγων της LHRH και Διαμορφωτική Μελέτη του [Aib<sup>6</sup>, desGly<sup>10</sup>]-LHRH-αιθυλαμιδίου. Σελ. 59.
- Γ7. Μ. Φραγκιαδάκη, Σ. Κουμεντάκος, Β. Μαγκαφά, **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Έ. Μάνεση-Ζούπα J. Slaninova, Π. Κορδοπάτης, *10ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Φαρμακοχημείας, Αθήνα, Ιανουάριος 2002*.  
Σχεδιασμός αναλόγων της Ωκυτοκίνης με ισχυρή ανασταλτική δράση. Σελ 36.
- Γ8. Α.Σ. Γαλάνης, Π. Σωτηρίου, **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Θ. Μάϊνα, Β. Nock, Α. Νικολοπούλου, Π. Κορδοπάτης, *5<sup>ο</sup> Συνέδριο Τμήματος Χημείας Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, Ιωάννινα, Οκτώβριος 2002*.  
Διαμορφωτικές Παρατηρήσεις σε Ανάλογα της Σωματοστατίνης Διαφορετικής Συγγένειας Σύνδεσης με τον Υποδοχέα. Σελ. 205, Π52.
- Γ9. Α.Σ. Γαλάνης, **Γ.Α. Σπυρούλιας**, R. Pieratelli, Α. Τζάκος, Ι.Π. Γεροθανάσης, Α. Τρογκάνης, Γ. Πάϊρας, Έ. Μάνεση-Ζούπα, Π. Κορδοπάτης, *5<sup>ο</sup> Συνέδριο Τμήματος Χημείας Πανεπιστημίου, Ιωάννινα, Οκτώβριος 2002*.  
Μελέτη NMR <sup>1</sup>H Συμπλοκοποίησης Ψευδαργύρου με Πεπτίδια των Ενεργών Περιοχών του Μετατρεπτικού Ενζύμου της Αγγειοτενσίνης Ι (ACE). Σελ. 139, Π19.
- Γ10. Α. Ζώμπρα, **Γ.Α. Σπυρούλιας**, Β. Μαγκαφά και Π. Κορδοπάτης, *5<sup>ο</sup> Συνέδριο Τμήματος Χημείας Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, Ιωάννινα, Οκτώβριος 2002*  
Ανάπτυξη νέων αναλόγων της Εκλυτικής Ορμόνης της Ωχρινοτρόπου ορμόνης (LHRH). Σελ. 197, Π48
- Γ11. **Γ. Α. Σπυρούλιας**, Α.Σ. Γαλάνης, Γ. Πάϊρας, Ε. Μάνεση-Ζούπα, Ι. Γεροθανάσης Π. Κορδοπάτης, *19<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Ηράκλειο Κρήτης, Νοέμβριος 2002*.  
Δομικά χαρακτηριστικά των καταλυτικών κέντρων του Μετατρεπτικού Ενζύμου της Αγγειοτενσίνης-Ι. Σελ. 528-531
- Γ12. Α. Zompra, E. Pappa, A. Tatsi, F. Lamari, V. Magafa, A. Spyroulias and P. Cordopatis.  
Synthetic Peptides of Luteinizing Hormone - Releasing Hormone (LHRH) as Active Pharmaceutical Ingredient (API). *BIO*, 21, 50, 2007.
- Γ13. Ναταλία Τσάμη, Αθανάσιος Παπακυριακού, Αθανάσιος Γαλάνης, **Γεώργιος Α. Σπυρούλιας** & Παύλος Κορδοπάτης.  
Σχεδιασμός Ενώσεων Φαρμακευτικής Σημασίας μέσω Φασματοσκοπίας NMR. *BIO*, 23, 62-67, 2007.

**Συμμετοχή σε Συμπόσια & Εκπαιδευτικά Σεμινάρια :**

- **7<sup>th</sup> Chianti Workshop on Magnetic Resonance – Nuclear and Electron Relaxation** Μάιος 25-31, 1997, San Miniato, Pisa, Italy.
- **Advanced Computing in NMR Spectroscopy** Σεπτέμβριος 20-27, 1997, University of Florence, Italy.
- **Advanced Computing in NMR Spectroscopy** Σεπτέμβριος 24-28, 1999, University of Florence, Italy.
- **8<sup>th</sup> Chianti Workshop on Magnetic Resonance** Μάιος 30- ούος 5, 1999, San Miniato, Pisa, Italy.

**Συμμετοχή σε Επιστημονικά Συνέδρια :**

Ενεργή συμμετοχή σε **76 Επιστημονικά Συνέδρια** εκ των οποίων τα **50 είναι Διεθνή** και τα **26 Εθνικά**, με συνολικό αριθμό **~200 Ανακοινώσεων και Εργασιών**.