

ΑΛΕΞΙΟΣ ΓΡΗΓΟΡΟΠΟΥΛΟΣ

ΖΗΝΟΔΟΤΟΥ 15 • ΑΘΗΝΑ • 11634

ΤΗΛ: +30 213 0145046 • ΚΙΝΗΤΟ: +30 6945 582879

E-MAIL: GRIGOROP@GMAIL.COM

ΠΡΟΣΩΠΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

- **Εθνικότητα:** Ελληνική
- **Ημερομηνία και Τόπος Γέννησης:** 16 Φεβρουαρίου 1976, Αθήνα
- **Οικογενειακή Κατάσταση:** Έγγαμος με δύο παιδιά
- **Στρατιωτική Θητεία:** Πολεμικό Ναυτικό, Μηχανικός Γ΄

ΑΚΑΔΗΜΑΙΚΕΣ ΣΠΟΥΔΕΣ

- **2007: Διδακτορικό Δίπλωμα, PhD**, Χημεία. (Βαθμός: “Άριστα”) Τίτλος Διδακτορικής Διατριβής: “Σύμπλοκα του Μολυβδαινίου και Εφαρμογή τους σε Καταλυτικές Πορείες Μεταφοράς Ατόμου Οξυγόνου”, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας
- **2001: Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης, MSc**, Ανόργανη Χημεία και Τεχνολογία (Βαθμός: 9.67/10). Τίτλος Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης: “Σύμπλοκα του Μολυβδαινίου και του Βολφραμίου και Εφαρμογή τους στις Αντιδράσεις Μεταφοράς Ατόμου Οξυγόνου”, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας
- **1998: Πτυχίο**, Χημεία (Βαθμός: “Λίαν Καλώς”). Τίτλος Πτυχιακής Εργασίας: “Σύνθεση Συμπλόκων του Ρουθηνίου με νουκλεοζίτες ως υποκαταστάτες,” Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας
- **1988-1993:** Απολυτήριο Λυκείου (Βαθμός: 18/20), Κολλέγιο Αθηνών

ΚΥΡΙΑ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ

Βιοανόργανη Χημεία

- Σύνθεση και χαρακτηρισμός όξο-συμπλόκων του Mo και του W ως βιομιμητικά μοντέλα των ενζύμων μολυβδαινίου και βολφραμίου και μελέτη της καταλυτικής τους δραστηριότητας έναντι αντιδράσεων Μεταφοράς Ατόμου Οξυγόνου
- Σύνθεση και χαρακτηρισμός συμπλόκων του Mn, Co, Ni και Zn με “non-innocent” υποκαταστάτες θείου ως δομικά μοντέλα των πρωτεϊνών που φέρουν την MS₄ ομάδα
- Σύνθεση και χαρακτηρισμός πλειάδων Fe-S (Fe-S clusters) ως βιομιμητικών μοντέλων των ενζύμων FeFe-υδρογενάση και νιτρογενάση

Φασματοσκοπία

- Χαρακτηρισμός ανόργανων ενώσεων με φασματοσκοπία UV-Vis, IR και NMR
- Κινητικές μελέτες αντιδράσεων με φασματοσκοπία UV-Vis και NMR
- Φασματοσκοπική μελέτη των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων για την παραγωγή υδρογόνου
- Φασματοσκοπία Απορρόφησης Ακτίνων-X (XAS) για τον πειραματικό προσδιορισμό της ομοιοπολικότητας δεσμών μετάλλου-υποκαταστάτη σε ανόργανα σύμπλοκα

Υπολογιστική Χημεία

- Γνώση και χρήση των περισσότερων μεθόδων υπολογιστικής χημείας (Molecular Mechanics, Hartree-Fock, Density Functional Theory, CASSCF, MP2 και Configuration Interaction) καθώς και των περισσότερων αντίστοιχων προγραμμάτων (Gaussian, ADF και ORCA).
- Πρόβλεψη ηλεκτρονικών ιδιοτήτων και ομοιοπολικότητας δεσμών μετάλλου-υποκαταστάτη σε ανόργανα σύμπλοκα
- Μελέτη του μηχανισμού του ενεργού κέντρου ενζύμων

- Φασματοσκοπική βελτίωση συναρτησιοειδών με την προσθήκη HF exchange
- Σύγκριση διαφόρων μεθόδων ανάλυσης πληθυσμών (MPA, NPA, AIM)
- Μελέτη του antiferromagnetic coupling πλειάδων σιδήρου-θείου

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗ – ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

- **2007–2010: Μεταδιδακτορικός Συνεργάτης, Department of Chemistry and Biochemistry, Astrobiology Geocatalysis Research Centre, Montana State University, Μοντάνα, Η.Π.Α.** Υπεύθυνος για τον εξολοκλήρου εξοπλισμό νέου εργαστηρίου ανόργανης χημείας κατάλληλο για σύνθεση air-sensitive χημικών ενώσεων (schlenk-lines, glovebox). Σύνθεση πλειάδων σιδήρου-θείου που προσομοιάζουν το ενεργό κέντρο των ενζύμων υδρογενάσης. Μελέτη αυτών με τη βοήθεια φασματοσκοπίας απορρόφησης ακτίνων-Χ (XAS) και θεωρητική ανάλυση (DFT και ab initio) για την βελτιστοποίηση του μηχανισμού παραγωγής υδρογόνου.
- **2008–2010: Επιστημονικός Επισκέπτης, Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL), Stanford, Καλιφόρνια, Η.Π.Α.** Συλλογή δεδομένων φασματοσκοπίας απορρόφησης ακτίνων-Χ κατά τη διάρκεια πέντε διαφορετικών επισκέψεων στον επιταχυντή σωματιδίων του SSRL που βρίσκεται στο πανεπιστήμιο του Stanford.
- **2006–2007: Επιστημονικός Συνεργάτης, Τομέας Ανόργανης Χημείας και Τεχνολογίας, Τμήμα Χημείας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.** Σύνθεση και φασματοσκοπική μελέτη (NMR, IR, UV-Vis, EPR) συμπλόκων ροδίου, κοβαλτίου και νικελίου με “non-innocent” υποκαταστάτες. Θεωρητική ανάλυση με τη χρήση μεθόδων υπολογιστικής χημείας (DFT και ab initio).
- **2001-2006: Υποψήφιος Διδάκτωρ, Τομέας Ανόργανης Χημείας και Τεχνολογίας, Τμήμα Χημείας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.** Σύνθεση όξο-συμπλόκων του μολυβδαινίου και του βολφραμίου. Θεωρητική ανάλυση με τη χρήση μεθόδων υπολογιστικής χημείας (DFT).
- **2005-2006: Εργαστηριακός Ερευνητής, Πολεμικό Ναυτικό.** Χημική Ανάλυση λιπασμάτων και καυσίμων.
- **1999-2001: Ερευνητής, Επιχειρησιακό Πρόγραμμα Έρευνας & Τεχνολογίας, ΕΠΕΤ II της Ε.Ε. (Υποπρόγραμμα I – Ενίσχυση Ε&Τ δραστηριοτήτων), Ελλάδα.** X-Ray Fluorescence φασματοσκοπία για την ανάλυση δειγμάτων που χρησιμοποιούνται ως καταλύτες στην ανάπτυξη τεχνολογιών υδρογόνου.

ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

- **2008-2009: Μάθημα Αστροβιολογίας.** Σειρά διαλέξεων πάνω στη σύνθεση πλειάδων σιδήρου-θείου στο Montana State University, MT, Η.Π.Α.
- **2007-2010: Επίβλεψη και Διδασκαλία Υποψηφίων Διδακτορικών Φοιτητών.** Επίβλεψη ερευνητικής ομάδας που αποτελείται από τρεις υποψήφιους διδάκτορες στο Montana State University, MT, Η.Π.Α.
- **2001-2005: Επίβλεψη και Διδασκαλία Μεταπτυχιακών Φοιτητών.** Οργάνωση και επίβλεψη ερευνητικής ομάδας που αποτελείτο από τρεις υποψήφιους μεταπτυχιακούς φοιτητές στο Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας.
- **2001-2005: Εργαστήριο Γενικής Χημείας I και II, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας.** Διδασκαλία και επίβλεψη του εργαστηρίου.

ΕΡΓΑΣΙΑΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

- **2010-2011:** Εξωτερικός συνεργάτης για τη ρύθμιση της διαχείρισης αποβλήτων, ΒΙΟΠΟΛ Α.Ε., Ελλάδα.
- **2006-2007:** Αναλυτής ISO9001, Ελλάδα.
- **1998-1999:** Βοηθός Διεύθυνσης Παραγωγής, ΔΕΛΤΑ Α.Ε., Ελλάδα.

- “In silico Evaluation of Proposed Biosynthetic Pathways for the Unique Dithiolate Ligand of the H-Cluster of [FeFe]-hydrogenase” **A. Grigoropoulos**, R. K. Szilagyi, *Journal of Computational Chemistry*, (2011), *in press*
- “Electron and Spin Density Topology of the H-Cluster and Its Biomimetic Complexes” L. J. Giles, **A. Grigoropoulos**, R. K. Szilagyi, *European Journal of Inorganic Chemistry*, (2011), 2677-2691
- “Evaluation of Biosynthetic Pathways of the Dithiolate Ligand of the FeFe-Hydrogenase H cluster” **A. Grigoropoulos**, R. K. Szilagyi, *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, (2010), 1117-1182
- “Tetrahedral and square planar $Ni[(SPR_2)_2N]_2$ complexes, R = Ph & *i*Pr revisited: Experimental and theoretical analysis of interconversion pathways, structural preferences and spin density delocalization” D. Maganas, **A. Grigoropoulos**, S. Staniland, Spyros D. Chatziefthimiou, A. Harrison, N. Robertson, P. Kyritsis, Frank Neese, *Inorganic Chemistry*, (2010), 5079-5093
- “Synthesis and characterization of new Rh(I) complexes bearing CO, PPh_3 and chelating P,O- or Se,Se- ligands: Application to hydroformylation of styrene” K. Chatziapostolou, K. Vallianatou, **A. Grigoropoulos**, C. Raptopoulou, A. Terzis, I. Kostas, P. Kyritsis, G. Pneumatikakis; *Journal of Organometallic Chemistry*, (2007), **692**, 4129-4138.
- “Structural, spectroscopic and magnetic properties of $M[R_2P(E)NP(E)R_2]_2$ complexes, M = Co, Mn, E = S, Se and R, R = Ph or *i*Pr. Covalency of M–S bonds from experimental data and theoretical calculations” D. Maganas, S. Staniland, **A. Grigoropoulos**, F. White, S. Parsons, N. Robertson, P. Kyritsis and G. Pneumatikakis; *Dalton Transactions*, (2006), 2301-2315.
- “Effect of π -back-bonding in the catalytic properties of Rh(I) complexes bearing disulfidoimidodiphosphinato ligands” **A. Grigoropoulos**, D. Maganas, D. Symeonidis, P. Giastas, A. Cowley, P. Kyritsis and G. Pneumatikakis, *European Journal of Inorganic Chemistry*, (2011), *submitted*.
- “Experimental evaluation of the effect of the size and composition of the dithiolate bridging ligand of the H-cluster from sulfur K-edge X-Ray Absorption Spectroscopy” – *manuscript in preparation*
- “Molybdenum dioxo-complexes bearing 2-mercapto-N-heterocyclic ligands, as structural analogues of molybdenum enzyme active sites”, **A. Grigoropoulos**, D. Maganas, A. Cowley, P. Kyritsis and G. Pneumatikakis – *manuscript in preparation*.

ΠΡΟΦΟΡΙΚΕΣ & ΕΝΤΥΠΕΣ ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΕΙΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ

- 239th American Chemical Society Conference, 20-26 Μαρτίου 2010, San Francisco, California, ΗΠΑ, **Ομιλία**: “Theoretical evaluation of biosynthetic pathways for the unique dithiolate ligand of the H-cluster in [FeFe]-hydrogenases”, A. Grigoropoulos, R.K. Szilagyi
- 237th American Chemical Society Conference, 22-26 Μαρτίου 2009, Salt Lake City, Utah, ΗΠΑ, **Poster**: “Computational Level of Theory Dependence on the Electronic Structures of properties of Biomimetic 2Fe-clusters of the FeFe-hydrogenase H-cluster”, A. Grigoropoulos, L.J. Giles, R.K. Szilagyi
- 237th American Chemical Society Conference, Salt Lake City, Utah, ΗΠΑ, Μάρτιος 2009, **Poster**: “Multi-edge X-ray Absorption Spectroscopic Characterization of Biomimetic Analogues of the H-cluster of FeFe-hydrogenases”, L.J. Giles, A. Grigoropoulos, D.J. Gardenghi, R.K. Szilagyi
- Summer 2008 Gordon Conference in Iron-Sulfur Enzymes, 8-13 Ιουνίου 2008, Colby-Sawyer College, New London, New Hampshire, ΗΠΑ, **Poster**: “Electronic structure studies of synthetic analogues of the catalytic H-cluster of Fe-only hydrogenases”, A. Grigoropoulos, L.J. Giles, D.J. Gardenghi, R.K. Szilagyi

- 2^ο εργαστήριο Βορείου Αμερικής-Ελλάδας-Κύπρου σε παραμαγνητικά υλικά, Σύρος, Ελλάδα, 18-21 Ιουνίου 2007, **Ομιλία**: "Electronic properties of $[M^{\text{II}}\{R_2P(S)NP(S)R_2\}]$ complexes (M = Mn, Fe, Co, Mo, Ni, Cu, Zn; R = Ph, *i*Pr", D. Maganas, A. Grigoropoulos, S. Milikisyants, E. J. J. Groenen, S. Staniland, N. Robertson, P. Kyritsis.
- Spectroscopy and Theory year conference, Lunteren, Ολλανδία, Ιανουάριος 2006, **Poster**: "Structural, spectroscopic and magnetic properties of $M[R_2P(E)NP(E)R'_2]_2$ complexes, M = Co, Mn, E = S, Se and R, R' = Ph or *i*Pr. Covalency of M–S bonds from experimental data and theoretical calculations", D. Maganas, S. Staniland, A. Grigoropoulos, S. Milikisyants, N. Robertson, E. Groenen, P. Kyritsis.
- Recent Progress in Magnetic Resonance Methods, Hirschegg, Αυστρία, 18-22 Σεπτεμβρίου 2005, **Ομιλία**: "Structural, spectroscopic and theoretical studies on $M^{\text{II}}S_4$ cores in model transition metal complexes (M = Mn, Co, Ni), with respect to the covalent character of M–S bonds", D. Maganas, S. Staniland, A. Grigoropoulos, S. Milikisyants, N. Robertson, E. Groenen, P. Kyritsis.
- 8^ο Ετήσιο Συνέδριο Χημείας, Θεσσαλονίκη, 10–14 Νοεμβρίου 2004, **Poster**: "Διόξο-σύμπλοκα του Μολυβδαινίου με υποκαταστάτες 2-μερκάπτο-N-ετεροκυκλικές ενώσεις ως δομικά ανάλογα του ενεργού κέντρου των ενζύμων μολυβδαινίου", A. Γρηγορόπουλος, Δ. Μαγγανάς, A. Cowley, Π. Κυρίτσης, Γ. Πνευματικάκης.
- 2^ο Συνέδριο της Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας, 15-16 Οκτωβρίου 2004, Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ, Αθήνα. **Poster**: "Structural, spectroscopic and theoretical studies on $M(II)S_4$ (M = Mn, Co, Ni) and $Cu(I)S_3$ containing complexes", Δ. Μαγγανάς, A. Γρηγορόπουλος, S. Staniland, N. Robertson, Π. Κυρίτσης, Γ. Πνευματικάκης.
- 19^ο Ελληνικό Συνέδριο Χημείας, Ηράκλειο, 6-10 Νοεμβρίου, 2002. **Poster**: "Synthesis of molybdenum mononuclear complexes bearing the $[N(SPh)_2]^-$ ligand", K. Βαλλιαντάου, Δ. Μαγγανάς, A. Γρηγορόπουλος, Π. Κυρίτσης, Γ. Πνευματικάκης.
- XX^ο Διεθνές Συνέδριο Οργανομεταλλικής Χημείας, 7-12 Ιουλίου 2002 Κέρκυρα. **Poster**: "Rh(I) complexes with the ligand imidobis(diphenylphosphine sulphide) and their catalytic activity in the hydroformylation of styrene", D. Simeonidis, A. Grigoropoulos, I.D. Kostas, P. Kyritsis, S. Koinis and G. Pneumatikakis.
- Inorganic Reaction Mechanisms Meeting 2003, 8-10 Ιανουαρίου 2004, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών – συμμετοχή.

ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ, ΒΡΑΒΕΙΑ & ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ

- **NASA Astrobiology Institute Node**, Grant NNA08C-N85A
- **Επιχειρησιακό Πρόγραμμα Έρευνας & Τεχνολογίας, ΕΠΕΤ II της Ε.Ε.** (Υποπρόγραμμα I – Ενίσχυση Ε&Τ δραστηριοτήτων)
- **Αργυρό Μετάλλιο, Καλύτερη Έντυπη Δημοσίευση**, 2^ο συνέδριο της Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας 15-16 October 2004
- **Υποτροφία για την απόκτηση Διδακτορικού Διπλώματος από το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών** (2001-2004)

ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΕΤΑΙΡΙΕΣ

- Μέλος της Ένωσης Ελλήνων Χημικών
- Μέλος του American Chemical Society

ΑΤΟΜΙΚΕΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΕΣ ΚΑΙ ΙΚΑΝΟΤΗΤΕΣ

- **Ξένες Γλώσσες**: Αγγλικά (Αρίστη), Γαλλικά (Μετρία).
- **Γνώσεις Η/Υ και Προγραμματισμός**: Άριστη γνώση υπολογιστών με operational systems Linux και Windows και εμπειρία στον προγραμματισμό.