

Ραφαήλ Λίγγας

Δρ. Υπολογιστικής Κβαντικής Χημείας, Α.Π.Θ. · Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ΕΚΕΤΑ

Email: rafaling@iti.gr

ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΦΙΛ

Φυσικός, με μεταπτυχιακό και διδακτορικό στην Υπολογιστική Κβαντική Χημεία από το Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης. Από τον Οκτώβριο του 2025 είναι Μεταδιδακτορικός Ερευνητής στο Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης (ΕΚΕΤΑ), με αντικείμενο την κβαντική υπολογιστική, όπου σχεδιάζει και αναπτύσσει ολοκληρωμένο εκπαιδευτικό πρόγραμμα Κβαντικής Υπολογιστικής. Έχει εργαστεί ως Principal Research Engineer στο Πανεπιστήμιο του Linköping (Σουηδία) και ως Data Scientist, με εξειδίκευση στην Python, στη μοντελοποίηση πρόβλεψης και στην ανάλυση δεδομένων. Διαθέτει επίσης διδακτική εμπειρία σε μαθηματικά, πληροφορική και αγγλικά στο Ηνωμένο Βασίλειο.

ΣΠΟΥΔΕΣ

07/2020 – 12/2023

Διδακτορικό Δίπλωμα στην Υπολογιστική Κβαντική Χημεία

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

- Θέμα: Ανάπτυξη και εφαρμογή λογισμικού για την ανάλυση και οπτικοποίηση του επαγόμενου μαγνητικού πεδίου στη θεωρητική μελέτη της αρωματικότητας οργανικών και ανόργανων μοριακών συστημάτων.
- Σχεδιασμός και υλοποίηση cross-platform επιστημονικού λογισμικού σε Python για κβαντοχημικούς υπολογισμούς, ανάλυση και οπτικοποίηση.
- Διαχείριση μεγάλων συνόλων δεδομένων και σύνθετων κβαντομηχανικών προσομοιώσεων σε συστοιχίες HPC, με βελτιστοποίηση απόδοσης.
- Αποκλειστικός προγραμματιστής εξειδικευμένου επιστημονικού λογισμικού που χρησιμοποιήθηκε σε πολλές δημοσιεύσεις σε έγκριτα επιστημονικά περιοδικά· υποστήριξη της χρήσης της από φοιτητές στις διπλωματικές τους εργασίες.

10/2017 – 06/2020

Μεταπτυχιακό Δίπλωμα στην Υπολογιστική Κβαντική Χημεία (βαθμός 9,5)

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

- Θέμα: Ανάλυση του επαγόμενου μαγνητικού πεδίου σε συνεισφορές φυσικά εντοπισμένων μοριακών τροχιακών.
- Ανάπτυξη εργαλείων Python για την ανάγνωση και επεξεργασία σύνθετων δεδομένων εξόδου προσομοιώσεων.
- Δημιουργία εργαλείων για την ανάλυση των συνεισφορών του μαγνητικού πεδίου σε μοριακά συστήματα.

2011 – 2017

Πτυχίο Φυσικής (Επίπεδο EQF 6)

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

- Εξειδίκευση 4ου έτους στον προγραμματισμό (πτυχιακή εργασία).

ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

10/2025 – σήμερα

Μεταδιδακτορικός Ερευνητής – Κβαντική Υπολογιστική

Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης (ΕΚΕΤΑ)

- Σχεδιασμός και ανάπτυξη ολοκληρωμένου εκπαιδευτικού προγράμματος Κβαντικής Υπολογιστικής (εκπαιδευτικό υλικό, πρόγραμμα σπουδών, προγραμματιστικές ασκήσεις).

- Διερεύνηση και ανάπτυξη εργαλείων αυτοματοποίησης σε Python για εφαρμογές κβαντικής υπολογιστικής.
- Συμμετοχή σε ερευνητικά έργα με τεχνική συνεισφορά και τεχνικό συντονισμό.

09/2024 – σήμερα

Data Scientist

eSpyros Data Solutions (εξ αποστάσεως)

- Συνεργασίες ανά έργο για προηγμένες λύσεις επιστήμης δεδομένων.
- Ανάπτυξη και εφαρμογή μοντέλων πρόβλεψης και λύσεων μηχανικής μάθησης για αναλύσεις, αναφορές και επιχειρηματική πληροφόρηση.
- Ανάπτυξη και συντήρηση αξιόπιστων εργαλείων μεγάλων συνόλων δεδομένων σε Python.

03/2024 – 09/2025

Principal Research Engineer

Πανεπιστήμιο του Linköping, Σουηδία

- Υπολογιστική έρευνα στη Φωτοχημεία με κβαντικές μεθόδους.
- Συνδυασμός κβαντοχημικών μεθόδων με μοριακή δυναμική.
- Ανάπτυξη εργαλείων Python για την απλοποίηση και κλιμάκωση προσομοιώσεων.
- Επίβλεψη υποψήφιων διδακτόρων και καθοδήγηση στους ερευνητικούς τους στόχους.

09/2020 – 03/2022

Ερευνητής Χημείας

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

- Υπολογιστική μελέτη μηχανικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων δομών pillared graphene· σχεδιασμός και αξιολόγηση (screening) δομών· κατασκευή και μετρήσεις εύκαμπτων διατάξεων.
- Αυτοματοποίηση διαδικασιών με Python· Υπολογισμοί Υψηλών Επιδόσεων (HPC).
- Εκτεταμένη χρήση πολλών προγραμμάτων υπολογιστικής κβαντικής χημείας.

ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΗ & ΕΙΣΗΓΗΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

10/2018 – 12/2019

Αναπληρωτής Εκπαιδευτικός (Supply Teacher)

Randstad Education, Cambridge, Ηνωμένο Βασίλειο

- Διδασκαλία μαθηματικών και πληροφορικής σε σχολεία δευτεροβάθμιας εκπαίδευσης.

Καλοκαίρια 2017,
2018, 2019

Καθηγητής Αγγλικών

British Study Centres, Oxford, Ηνωμένο Βασίλειο

- Διδασκαλία αγγλικών σε νέους μαθητές από όλο τον κόσμο.

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

- Lingas, R., Charistos, N. D., & Muñoz-Castro, A. (2024). Borospherene in the nanohoop. Chemistry – A European Journal. <https://doi.org/10.1002/chem.202402027>
- Lingas, R., Charistos, N. D., & Muñoz-Castro, A. (2023). Charge delocalization and aromaticity of doubly charged double-walled carbon nanohoos. Physical Chemistry Chemical Physics. <https://doi.org/10.1039/D3CP01994B>
- Lingas, R., & Muñoz-Castro, A. (2023). Local and global aromaticity under rotation: Analysis of two- and three-dimensional carbon nanostructures. Physical Chemistry Chemical Physics. <https://doi.org/10.1039/D3CP00569K>
- Lingas, R., Charistos, N. D., & Muñoz-Castro, A. (2021). Aromaticity of ortho and meta 8-cycloparaphenylene and their dications: Induced magnetic field analysis with localized and delocalized orbitals in strained nanohoos. ChemPhysChem. <https://doi.org/10.1002/cphc.202100057>

Όλες οι δημοσιεύσεις βασίστηκαν σε έρευνα που πραγματοποιήθηκε με λογισμικό που ανέπτυξε ο ίδιος σε Python.

ΔΕΞΙΟΤΗΤΕΣ

- **Προγραμματισμός & Επιστήμη Δεδομένων:** Expert στην Python, στη μοντελοποίηση πρόβλεψης και στην ανάλυση δεδομένων. Πολύ καλή γνώση Bash, C++, και JavaScript.
- **Ανάπτυξη Επιστημονικού Λογισμικού:** Ανάπτυξη γραφικών διεπαφών (GUI) και τρισδιάστατων οπτικοποιήσεων για την ανάλυση δεδομένων και αποτελεσμάτων προσομοιώσεων.
- **Ερευνητικό έργο:** Αποδεδειγμένη ικανότητα παραγωγής επιστημονικού έργου υψηλής ποιότητας σε περιοδικά με κρίση.
- **Διεπιστημονική συνεργασία:** Γεφύρωση χημείας, φυσικής και πληροφορικής για τη μετατροπή σύνθετων προβλημάτων σε υπολογιστικές λύσεις.