

CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y Apellidos	Diego Ontiveros Cruz		
DNI/NIE/pasaporte	25369712E		
e-mail	diegonti.doc@gmail.com	Teléfono	644311635
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	IST-1983-2023	Código ORCID

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Soy graduado en Química por la Universidad de Barcelona y he ampliado mis conocimientos con un máster en Modelización Computacional. Mi experiencia investigadora se centra en el estudio computacional de materiales y su aplicación en fotocatálisis. Poseo amplios conocimientos de programación, cosa que me permite optimizar y automatizar los procesos de envío de cálculos y análisis de resultados mediante scripts de Python. Además, tengo experiencia en el uso de diversos softwares de ofimática, así como en informática y computación. Soy una persona dispuesta a aprender, colaborar y mejorar constantemente. Además, soy organizado, ambicioso y capaz de trabajar de manera autónoma o en equipo. Mi pasión es, por un lado, la química computacional, a la que me gustaría dedicarme en los próximos años y, por otro, la divulgación científica.

Parte C. DATOS ACADÉMICOS Y MÉRITOS

◆ Estudios y titulaciones académicas

- **Máster en Modelización Computacional Atomística y Multiescala.** Universidad de Barcelona, 2022–2023. Nota media: 9.3/10.0
- **Grado en Química.** Universidad de Barcelona, 2018–2022. Nota media: 8.4/10.0

◆ Actividad investigadora, incluyendo ayudas, becas y contratos de investigación y la participación en proyectos y convenios

- **Contrato predoctoral PREDOCS-UB.** Marzo 2024 – Marzo 2028.
- **Ayudas Iniciación Doctorado** en la Facultad de Química. Noviembre 2023 – Febrero 2024.
- **Beca de Colaboración** con el Departamento de Ciencia de Materiales y Química Física. Noviembre 2022 – Junio 2023.
- **Ayudas de la Cátedra UB** - Fundación Privada José Luis Massó - Ayuda para la matrícula en másteres universitarios de la Facultad de Química de la UB. Octubre 2022.

◆ Publicaciones (artículos, capítulos de libros y otras publicaciones)

- **MXgap: A MXene Learning Tool for Bandgap Prediction**
D. Ontiveros, S. Vela, F. Viñes, C. Sousa. ACS Catal., 2025, 15, 14403–14413. DOI: [10.1021/acscatal.5c04191](https://doi.org/10.1021/acscatal.5c04191)
- **Exploring the Photoactive Properties of Promising MXenes for Water Splitting**
D. Ontiveros, F. Viñes, C. Sousa. J. Mater. Chem. A, 2025, 13, 3302–3316. DOI: [10.1039/D4TA06852A](https://doi.org/10.1039/D4TA06852A)
- **Tuning MXenes towards their Use in Photocatalytic Water Splitting**
D. Ontiveros, S. Vela, F. Viñes, C. Sousa. Energy Environ. Mater., 2024, 7, e12774. DOI: [10.1002/eem2.12774](https://doi.org/10.1002/eem2.12774)

- **Bandgap Engineering of MXene Compounds for Water Splitting**
D. Ontiveros, F. Viñes, C. Sousa. *J. Mater. Chem. A*, 2023, **11**, 13754–13764. DOI: [10.1039/D3TA01933K](https://doi.org/10.1039/D3TA01933K)
- **Bandgap Engineering on MXene Compounds by Structure, Composition, and Surface Termination**
D. Ontiveros. Dipòsit Digital UB, TFG. hdl.handle.net/2445/189371

◆ **Participación en congresos y conferencias**

- **MXgap: A MXene Learning Tool for Bandgap Prediction – Póster**
IQTC/QTMC Meeting 2025, UB, 2025 ([Link](#)).
- **MXgap: A MXene Learning Tool for Bandgap Prediction – Invited Talk**
COST CIG Conference on machine learning and multiscale modeling of nanocrystal catalysts, Budapest, 2025 ([Link](#)).
- **MXgap: A MXene Learning Tool for Bandgap Prediction – Póster**
World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Oslo, 2025 ([Link](#)).
- **Exploring the Photoactive Properties of MXenes for Water Splitting – Invited Talk**
VASP and Applications Online Conference, Évora, 2025 ([Link](#)).
- **Explorant les Propietats Fotoactives dels MXens per a la Divisió de l'Aigua – Presentación Flash + Póster**
2^a Reunió de Química Teòrica i Computacional (RQTC-SCQ), Barcelona, 2025 ([Link](#)). Premio a la mejor presentación flash.
- **Exploring the Photoactive Properties of MXenes for Water Splitting – Póster**
Twins in Catalysis Symposium, Barcelona, 2024 ([Link](#)). Asistencia en la organización.
- **Exploring the Photoactive Properties of MXenes for Water Splitting – Póster**
IQTC/QTMC Meeting 2024, UB, 2024 ([Link](#)).
- **Computational Study of MXenes for Water Splitting Photocatalysis – Presentación Flash**
EUROMXENE Congress, Valencia, 2024 ([Link](#)).
- **MXenes as Photocatalytic Materials for Water Splitting – Póster**
IQTC/QTMC Meeting 2023, UB, 2023 ([Link](#)).
- **Computational Study of MXenes as Photocatalytic Materials – Presentación Flash + Póster**
8th International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburgo, 2023 ([Link](#)). Premio a la mejor presentación flash.
- **MXens com a Fotocatalitzadors del Trencament de l'Aigua – Póster**
Masterquímica XVIII, Comisión de Dinamización Lingüística, UB, 2023 ([Link](#)).

◆ **Participación en workshops y escuelas**

- Initiation on Quantum Computing **Workshop**, IQTC & CSUC, Barcelona, 2025.
- VASP **workshop** - From Setup to Solution, Online, 2024
- Quantum Computing **Masterclass**, Quantum Spain & BSC, Barcelona, 2023.

- **Curso IQTC - Computational Modelling: from Molecules to Materials**, Barcelona, 2022.
- **Curso IQTC - Molecular Modelling: Biomolecules and Drug Design**, Barcelona, 2023.

◆ **Actividades de divulgación científica**

- Mi **web personal** con más información académica y proyectos: diegonti.github.io
- Mis **redes** donde actualizo mi actividad como científico investigador (ResearchGate, LinkedIn, Google Scholar, ORCID): linktr.ee/diegonti
- **Divulgación científica** para alumnos de bachillerato con [Xerrades IQTC](#). 2024.
- **Vídeo divulgativo** sobre la Química Computacional. *Química Computacional: Más Allá del Laboratorio* ([Link](#)). 2024.
- **Artículo resumido en formato vídeo** de divulgación. *Paper summary: Bandgap Engineering of MXene Compounds* ([Link](#)). 2024.
- Monitor en **talleres científicos** para niños entre 7 y 14 años en Smart Barcelona. 2023.
- Profesor de **acompañamiento educativo** en el programa Èxit. 2018–2020 y 2022.
- **Finalista en 10ª Mostra de Recerca Jove** de Barcelona ([CEB](#)), 2018.

◆ **Otros méritos académicos y/o científicos relevantes, incluyendo premios y reconocimientos**

- **6 Matrículas de Honor en el Grado de Química:**
Física I (9.6), Lab. Básico de Inorgánica (9.2), Química Orgánica I (9.3), Química Orgánica III (9.8), Química Orgánica Estructural y Espectroscópica (9.5), Trabajo Final de Grado (9.9).
- **5 Matrículas de Honor en el Máster en Modelización Computacional:**
Mecánica Estadística (9.5), Modelización Molecular (9.0), Estructura Electrónica (10), Estructura Electrónica en Sólidos (9.5), Modelización de Nanomateriales y Superficies (9.6).
- **Premio a la mejor Presentación Flash** en 2^a Reunió de Química Teòrica i Computacional (RQTC-SCQ), Barcelona, 2025.
- **Premio a la mejor Presentación Flash** en 8th International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburgo, 2023.
- 60h de **docencia** impartidas (cursos 2024-2025 y 2025-2026).
- Buen conocimiento de **Python** y herramientas de programación. github.com/diegonti
- Nivel **B2 Inglés** certificado por Cambridge Assessment English (**Grade A – Score 181**).
- **Catalán y Castellano** como lenguas nativas.