

CURRICULUM VITAE ABREUJAT (CVA)

Part A. DADES PERSONALS

Nom i Cognoms	Diego Ontiveros Cruz		
DNI/NIE/passaport	25369712E		
e-mail	diegonti.doc@gmail.com	Telèfon	644311635
Núm. identificació del investigador	Researcher ID	IST-1983-2023	Codi ORCID

Part B. RESUM LLIURE DEL CURRÍCULUM

Sóc graduat en Química per la Universitat de Barcelona i he ampliat els meus coneixements amb un màster en Modelització Computacional. La meva experiència investigadora es centra en projectes que involucren l'estudi computacional de materials i la seva aplicació en fotocatàlisi. Tinc amplis coneixements de programació, cosa que em permet optimitzar i automatitzar els processos de càlcul i ànalisi de resultats mitjançant scripts de Python. A més, tinc experiència en l'ús de diversos programaris d'ofimàtica, així com en informàtica i computació. Sóc una persona disposada a aprendre, col·laborar i millorar constantment. A més, sóc organitzat, ambiciós i capaç de treballar de manera autònoma o en equip. La meva passió és, per una banda, la química computacional, a la qual m'agradaria dedicar-me els propers anys i, de l'altra, la divulgació científica.

Part C. DADES ACADÈMIQUES I MÈRITS

◆ Estudis i titulacions acadèmiques

- **Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala.** Universitat de Barcelona, 2022–2023. Nota mitjana: 9.3/10.0
- **Grau en Química.** Universitat de Barcelona, 2018–2022. Nota mitjana: 8.4/10.0

◆ Activitat investigadora, incloent-hi ajuts, beques i contractes de recerca i la participació en projectes i convenis

- **Contracte predoctoral PREDOCS-UB.** Març 2024 – Març 2028.
- **Ajuts d'Iniciació al Doctorat** a la Facultat de Química. Novembre 2023 – Febrer 2024.
- **Beca de Col·laboració** amb el Departament de Ciència de Materials i Química Física. Novembre 2022 – Juny 2023.
- **Ajuts de la Càtedra UB** - Fundación Privada José Luis Massó - Ajut per a la matrícula en màsters universitaris de la Facultat de Química de la UB. Octubre 2022.

◆ Publicacions (articles, capítols de llibres i altres publicacions)

- **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

◆ **Participació en congressos i conferències**

- **MXgap: A MXene Learning Tool for Bandgap Prediction – Pòster**
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 – Pòster**
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 – Presentació Flash + Pòster**
2^a Reunió de Química Teòrica i Computacional (RQTC-SCQ), Barcelona, 2025 ([Link](#)). Premi a la millor presentació flash.
- **Exploring the Photoactive Properties of MXenes for Water Splitting – Pòster**
Twins in Catalysis Symposium, Barcelona, 2024 ([Link](#)). Assistència a l'organització.
- **Exploring the Photoactive Properties of MXenes for Water Splitting – Pòster**
IQTC/QTMC Meeting 2024, UB, 2024 ([Link](#)).
- **Computational Study of MXenes for Water Splitting Photocatalysis – Presentació Flash**
EUROMXENE Congress, Valencia, 2024 ([Link](#)).
- **MXenes as Photocatalytic Materials for Water Splitting – Pòster**
IQTC/QTMC Meeting 2023, UB, 2023 ([Link](#)).
- **Computational Study of MXenes as Photocatalytic Materials – Presentació Flash + Pòster**
8th International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburg, 2023 ([Link](#)). Premi a la millor presentació flash.
- **MXens com a Fotocatalitzadors del Trencament de l'Aigua – Pòster**
Masterquímica XVIII, Comissió de Dinamització Lingüística, UB, 2023 ([Link](#)).

◆ **Participació en workshops i escoles**

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

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

◆ **Activitats de divulgació científica**

- La meva **web personal** amb més dades acadèmiques i projectes: diegonti.github.io
- Les meves **xarxes** on actualitzo la meva activitat com a científic investigador (LinkedIn, ResearchGate, Google Scholar, ORCID): linktr.ee/diegonti
- **Divulgació científica** per alumnes de batxillerat amb [Xerrades IQTC](#). 2024.
- **Vídeo divulgatiu** sobre la Química Computacional. *Química Computacional: Más Allá del Laboratorio* ([Link](#)). 2024.
- **Article resumit en format vídeo** de divulgació. *Paper summary: Bandgap Engineering of MXene Compounds* ([Link](#)). 2024.
- Monitor en **tallers científics** per a nens entre 7 i 14 anys a [Smart Barcelona](#). 2023.
- Professor d'**acompanyament educatiu** al [programa Èxit](#). 2018–2020 i 2022.
- **Finalista en 10^a Mostra de Recerca Jove** de Barcelona ([CEB](#)), 2018.

◆ **Altres mèrits acadèmics i/o científics rellevants, incloent premis i reconeixements**

- **6 Matrícules d'Honor al Grau de Química:**
Física I (9.6), Lab. Bàsic d'Inorgànica (9.2), Química Orgànica I (9.3), Química Orgànica III (9.8), Química Orgànica Estructural i Espectroscòpica (9.5), Treball Final de Grau (9.9).
- **5 Matrícules d'Honor al Màster en Modelització Computacional:**
Mecànica Estadística (9.5), Modelització Molecular (9.0), Estructura Electrònica (10), Estructura Electrònica en Sòlids (9.5), Modelització de Nanomaterials i Superfícies (9.6).
- **Premi a la millor Presentació Flash** en 2^a Reunió de Química Teòrica i Computacional (RQTC-SCQ), Barcelona, 2025.
- **Premi a la millor Presentació Flash** en 8th International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburg, 2023.
- 60h de **docència** impartides (Cursos 2024-2025 i 2025-2026).
- Bon coneixement de **Python** i eines de programació. github.com/diegonti
- Nivell **B2 Anglès** certificat per Cambridge Assessment English (**Grade A – Score 181**).
- **Català i Castellà** com llengües natives.