

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	0009-0008-0307-5645	

Part B. RESUM LLIURE DEL CURRÍCULUM

Sóc graduat en Química per la Universitat de Barcelona i he ampliat els meus coneixements amb un màster de Modelització Computacional. La meva experiència investigadora es centra en projectes que involucren l'estudi computacional de materials i la seva aplicació en fotocàlisi. Tinc amplis coneixements de programació, cosa que em permet optimitzar i automatitzar els processos de càlcul i anàlisi de resultats mitjançant scripts de Python. A més, tinc experiència en l'ús de diversos programaris d'ofimàtica, així com en informàtica i computació. Soc una persona disposada a aprendre, col·laborar i millorar constantment. A més, soc 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 / *Studies and academic degrees*

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

◆ Activitat investigadora, incloent ajuts, beques i contractes de recerca i la participació en projectes i convenis / *Research activity, including grants, scholarships and research contracts and participation in projects and agreements*

- **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) / *Publications (articles, book chapters and others)*

- **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. <http://hdl.handle.net/2445/189371>

◆ Participació en congressos i conferències / *Participation in congresses and conferences*

- **MXens com a Fotocatalitzadors del Trencament de l'Aigua – Pòster**
Masterquímica XVIII, Comissió de Dinamització Lingüística de la Facultat de Química, UB, 2023.

- **Computational Study of MXenes as Photocatalytic Materials** – Flash Oral Presentation + Pòster
8th International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburg, 2023.
- **MXenes as Photocatalytic Materials for Water Splitting** – Pòster
IQTG/QTMC Meeting 2023 ([Link](#)), UB, 2023.

♦ **Participació en workshops i escoles / Participation in workshops or courses**

- **Curs IQTC** - Computational Modelling: from Molecules to Materials, Barcelona, 2022.
- **Curs IQTC** - Molecular Modelling: biomolecules and drug design, Barcelona, 2023.
- Quantum Computer **Masterclass**, Quantum Spain & BSC, Barcelona, 2023.

♦ **Activitats de divulgació científica / Science communication activities**

- Les meves **xarxes** on actualitzo la meua activitat com a científic investigador (ResearchGate, LinkedIn, Google Scholar, ORCID): linktr.ee/diegonti
- Monitor en **tallers científics** per a nens entre 7 i 14 anys a Smart Barcelona. Des d'Abril 2023.
- Professor d'**acompanyament educatiu** al programa Èxit. 2018–2020 i 2022.
- **MXenes as Photocatalysts for Water Splitting. A Computational Study** – Pòster
III Premi de Pòsters de Sostenibilitat i Drets Humans, UB, 2022.
- **Finalista en 10^a Mostra de Recerca Jove** de Barcelona, 2018. Consorci d'Educació de Barcelona.

♦ **Altres mèrits acadèmics i/o científics rellevants, incloent premis i reconeixements / Other relevant academic and/or scientific merits, including awards, and recognitions**

- **6 Matricules d'Honor al Grau de Química:**
Física I (9.6), Laboratori 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 Matricules d'Honor al Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala:**
Fonaments de Mecànica Estadística (9.5), Modelització Molecular (9.0), Estructura Electrònica (10), Estructura Electrònica en Sòlids (9.5), Modelització de Nanomaterials i Superfícies (9.6).
- Nivell **B2 Anglès** certificat per Cambridge Assessment English (**Grade A** – Score 181).
- **Premi a la millor Flash Communication** en 8th International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburg, França. 2023.
- **Català i Castellà** com llengües natives.
- Bon coneixement de **Python** i eines de programació. github.com/diegonti