

# 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	0009-0008-0307-5645	

## 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 fotocatalisis. 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 FI-SDUR.** Marzo 2024 – Marzo 2027.
- **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)

- **Tuning MXenes towards their Use in Photocatalytic Water Splitting**  
D. Ontiveros, S. Vela, F. Viñes, C. Sousa. *Energy Environ. Mater.*, 2024, 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](https://hdl.handle.net/2445/189371)

#### ◆ Participación en congresos y conferencias

- **Computational Study of MXenes for Water Splitting Photocatalysis** – Oral Presentation EUROMXENE Congress, Valencia, Junio 2024.
- **MXens com a Fotocatalitzadors del Trencament de l'Aigua** – Póster Masterquímica XVIII ([Link](#)), Comisión de Dinamización Lingüística, UB, 2023.
- **Computational Study of MXenes as Photocatalytic Materials** – Flash Oral Presentation + Póster 8<sup>th</sup> International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburgo, 2023.
- **MXenes as Photocatalytic Materials for Water Splitting** – Póster IQTC/QTMC Meeting 2023 ([Link](#)), UB, 2023.

#### ◆ Participación en workshops y escuelas

- 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](https://diegonti.github.io)
- Mis **redes** donde actualizo mi actividad como científico investigador (ResearchGate, LinkedIn, Google Scholar, ORCID): [linktr.ee/diegonti](https://linktr.ee/diegonti)
- **Divulgación científica** para alumnos de bachillerato con [Xerrades IQTC](#). 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 10<sup>a</sup> 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).
- Nivel **B2 Ingles** certificado por Cambridge Assessment English (**Grade A** – Score 181).
- **Premio** a la **mejor Flash Communication** en 8<sup>th</sup> International Conference on Semiconductor Photochemistry (SP8), Estrasburgo, França. 2023.
- Buen conocimiento de **Python** y herramientas de programación. [github.com/diegonti](https://github.com/diegonti)
- **Catalán y Castellano** como lenguas nativas.