

# **CURRICULUM VITAE**

Nombre: Joseba Iñaki Juaristi Oleden

Fecha: 31 de Marzo 2026

# CONTENIDO

## Curriculum Vitae

1. Datos personales .....	1
2. Títulos Académicos .....	2
3. Puestos docentes desempeñados .....	3
4. Actividad docente desempeñada .....	4
5. Actividad investigadora desempeñada .....	6
6. Publicaciones .....	7
7. Proyectos de investigación subvencionados .....	30
8. Comunicaciones y ponencias presentadas a congresos .....	35
9. Tesis doctorales dirigidas .....	48
10. Tesis de Master dirigidas .....	49
11. Becas, ayudas y premios recibidos .....	50
12. Otros méritos de Investigación .....	50
13. Otros méritos .....	53

## **1. DATOS PERSONALES**

**Apellidos y nombre:** Juaristi Oriden, Joseba Iñaki

**Nacimiento:** **Provincia:** Gipuzkoa **Localidad:** Donostia-San Sebastián **Fecha:** 08-09-1968

**Teléfono:** 943-015396

**Correo electrónico:** josebainaki.juaristi@ehu.eus

**Facultad o Escuela actual:** Facultad de Química de San Sebastián, UPV/EHU

**ORCID:** 0000-0002-4208-8464

**RESEARCH ID:** F-3542-2016

**SCOPUS ID:** 7003347982

**GOOGLE SCHOLAR:** <https://scholar.google.com/citations?user=5zcpitYAAAAJ&hl=es>

**WEBPAGE:** <https://cfm.ehu.es/juaristi/>

## **2. TITULOS ACADÉMICOS**

**Licenciatura:** LICENCIADO EN CIENCIAS, SECCIÓN FÍSICAS. (ESPECIALIDAD: FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO)

**Universidad:** Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea.

**Fecha:** Junio de 1991.

**Doctorado:** DOCTOR EN CIENCIAS, SECCIÓN FÍSICAS.

**Universidad:** Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

**Fecha:** Septiembre de 1996.

**Título:** Pérdida de energía y emisión electrónica en la interacción de iones con superficies metálicas.

**Director:** Prof. Pedro Miguel Echenique Landiribar.

**Calificación:** Apto cum laude

### **3. PUESTOS DOCENTES DESEMPEÑADOS**

**Categoría:** PROFESOR ASOCIADO DE UNIVERSIDAD

**Centro:** Departamento de Física de Materiales, Facultad de Química de San Sebastián,  
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

**Dedicación:** Completa

**Nombramiento:** 10/12/1992

**Cese:** 25/10/1999

**Categoría:** PROFESOR TITULAR INTERINO DE UNIVERSIDAD

**Centro:** Departamento de Física de Materiales, Facultad de Química de San Sebastián,  
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

**Dedicación:** Completa

**Nombramiento:** 25/10/1999

**Cese:** 27/07/2001

**Categoría:** PROFESOR TITULAR DE UNIVERSIDAD

**Centro:** Departamento de Física de Materiales, Facultad de Química de San Sebastián,  
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

**Dedicación:** Completa

**Nombramiento:** 28/07/2001

**Cese:** 31/05//2022

**Categoría:** CATEDRATICO DE UNIVERSIDAD

**Centro:** Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y  
Tecnología, Facultad de Química de San Sebastián,  
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

**Dedicación:** Completa

**Nombramiento:** 01/06/2022

#### **4. ACTIVIDAD DOCENTE DESEMPEÑADA**

**Asignatura:** MATEMÁTICAS II. (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 2º Curso de Químicas.

**Fecha:** 1992-93, 1993-94, 1994-95, 1995-96, 1996-97, 1997-98, 1998-99, 1999-2000, 2000-2001, 2001-2002.

**Asignatura:** MATEMÁTICAS I. (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 1º Curso de Químicas.

**Fecha:** 1993-94, 1994-95, 1995-96, 1996-97, 1997-98, 1998-99, 2002-2003.

**Asignatura:** FÍSICA GENERAL (Prácticas del Laboratorio de Física General). (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 1º Curso de Químicas.

**Fecha:** 1992-93, 1993-94, 1999-2000, 2000-2001, 2001-2002, 2023-2024, 2024-2025

**Asignatura:** MECÁNICA (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 2º Curso de Químicas.

**Fecha:** 1999-2000, 2000-2001, 2001-2002, 2002-2003, 2003-2004.

**Asignatura:** MATEMATICA (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 1º Curso de Químicas.

**Fecha:** 2003-2004, 2004-2005, 2005-2006, 2006-2007.

**Asignatura:** FISICA II (Castellano)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 2º Curso de Químicas.

**Fecha:** 2009-2010.

**Asignatura:** Curso de Actualización en Matemáticas (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 1º Curso de Químicas.

**Fecha:** 2003-2004.

**Asignatura:** Introducción a los fenómenos cuánticos: Radiación y Materia (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 2º Curso de Químicas.

**Fecha:** 2004-2005, 2006-2007, 2007-2008, 2008-2009, 2009-2010, 2011-2012

**Asignatura:** Métodos Matemáticos para la Química (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 3º Curso, Grado en Química.

**Fecha:** 2012-2013, 2013-2014, 2014-2015, 2015-2016, 2016-2017, 2017-2018

**Asignatura:** Física (Euskera)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 1º Curso, Grado en Química.

**Fecha:** 2016-2017, 2017-2018, 2018-2019, 2019-2020, 2020-2021, 2021-2022, 2025-2026

**Asignatura:** Fundamentals of Classical Electromagnetisms (Inglés)

**Centro:** U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** Master in Nanoscience.

**Fecha:** 2007-2008, 2008-2009, 2009-2010, 2010-2011, 2012-2013, 2013-2014, 2014-2015, 2015-2016

**Asignatura:** Fundamental of Nanoscale Characterization (Inglés)

**Centro:** U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** Master in Nanoscience.

**Fecha:** 2007-2008, 2008-2009, 2009-2010, 2010-2011, 2011-2012, 2012-2013, 2013-2014, 2014-2015, 2015-2016, 2016-2017, 2017-2018, 2018-2019, 2019-2020, 2020-2021, 2021-2022, 2022-2023, 2023-2024

**Asignatura:** Theoretical Methods in Gas Surface Dynamics (Inglés)

**Centro:** U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** Master in Nanoscience.

**Fecha:** 2008-2009, 2009-2010

**Asignatura:** Advanced Theoretical Methods in Nanoscience (Inglés)

**Centro:** U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** Master in Nanoscience.

**Fecha:** 2010-2011, 2011-2012, 2012-2013, 2013-2014, 2014-2015, 2015-2016, 2016-2017, 2017-2018, 2020-2021, 2021-2022. 2022-2023, 2023-2024

**Asignatura:** Fundamental of Quantum Mechanics (Inglés)

**Centro:** U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** Master in Nanoscience.

**Fecha:** 2022-2023

**Asignatura:** Métodos Matemáticos para la Química (Castellano)

**Centro:** Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Curso:** 3º Curso, Grado en Química.

**Fecha:** 2022-2023, 2023-2024, 2024-2025

## **5. ACTIVIDAD INVESTIGADORA DESEMPEÑADA**

**Posición:** Becario predoctoral del Programa de Formación de Investigadores.

**Centro:** Departamento de Física de Materiales, Facultad de Química de San Sebastián,  
U. P. V./E. H. U.

**Financiación:** Gobierno Vasco, Departamento de Universidades e Investigación.

**Fecha:** 1/10/1991-10/12/1992.

**Posición:** Profesor Asociado, Profesor Titular y Catedrático de Universidad.

**Centro:** Facultad de Química de San Sebastián, U. P. V./E. H. U.

**Fecha:** 10/12/1992 ...

## **6. PUBLICACIONES**

### **6.1 Artículos en revistas internacionales (con evaluadores)**

**1.** J. I. Juaristi and F. J. García de Abajo.

"Energy loss in grazing proton-surface collisions".

Nucl. Instr. and Methods **B90**, 252-256, (1994).

---

**2.** J. I. Juaristi.

"Charge transfer rates for excited states of protons at surfaces".

Rad. Eff. and Defects in Solids, **130-131**, 167-173 (1994).

---

**3.** J. I. Juaristi, Jin Z. Wu, Jan A. Nobel, S. B. Trickey and John R. Sabin.

"On the metallization of the LiF monolayer".

Solid State Communications, Vol. **91**, No. 12, 957-960 (1994).

---

**4.** M. Alducin and J. I. Juaristi.

"Auger deexcitation rates in grazing atom-surface collisions".

Nucl. Instr. and Methods **B98**, 424-428 (1995).

---

**5.** A. Arnau, P. A. Zeijlmans van Emmichoven, J. I. Juaristi and E. Zaremba.

"Nonlinear screening effects in the interaction of slow multicharged ions with metal surfaces".

Nucl. Instr. and Methods **B100**, 279-283 (1995).

---

**6.** J. I. Juaristi, F. J. García de Abajo and P. M. Echenique.

"Energy loss of MeV protons specularly reflected from metals".

Phys. Rev. **B53**, 13839-13850 (1996).

---

**7.** J. I. Juaristi and A. Arnau.

"Interaction of multiply charged ions with metals".

Nucl. Instr. and Methods B**115**, 173-176 (1996).

---

**8.** H. Eder, M. Vana, F. Aumayr, HP. Winter, J. I. Juaristi and A. Arnau.

" Projectile charge dependence of kinetic electron emission from clean gold".

Physica Scripta. Vol. T**73**, 322-323, (1997).

---

**9.** J. I. Juaristi, M. Rösler, F. J. García de Abajo, H. Kerkow and R. Stöle.

"Nonlinear effects in the kinetic electron emission induced by slow ions in metals".

Nuclear Instruments and Methods B **135**, 487-491 (1998).

---

**10.** T. Bagdonat, M. Vicanek, J. I. Juaristi and F. J. García de Abajo.

"Coulomb explosion of H<sub>2</sub><sup>+</sup> in surface scattering".

Nuclear Instruments and Methods B **142**, 473-485 (1998).

---

**11.** J. I. Juaristi, M. Rösler and F. J. García de Abajo.

"Contribution of the excitation of conduction band electrons to the kinetic electron emission induced by slow ions in metals".

Physical Review B **58**, 15838-15846 (1998).

---

**12.** J. I. Juaristi, A. Arnau, P. M. Echenique, C. Auth and H. Winter.

"Charge state dependence of the energy loss of slow ions in metals".

Physical Review Letters **82**, 1048-1051 (1999).

---

**13.** J. I. Juaristi, A. Arnau, P. M. Echenique, C. Auth and H. Winter.

"Charge state dependence of the energy loss of slow nitrogen ions reflected from an aluminum surface in grazing incidence".

Nuclear Instruments and Methods B **157**, 87-91 (1999).

---

**14.** M. A. Cazalilla and J. I. Juaristi.

"Energy loss of fast protons specularly reflected from a metal".

Nuclear Instruments and Methods B **157**, 104-109 (1999).

---

**15.** J. I. Juaristi and M. Rösler.

"Atomic number dependence of the backward/forward kinetic electron emission induced by slow ions in Carbon foils".

Nuclear Instruments and Methods B **157**, 254-258 (1999).

---

**16.** I. Nagy, B. Apagyi, J. I. Juaristi and P. M. Echenique.

"A consistent model for the screening of slow muons in metals".

Physical Review B (Rapid Communication) **60**, R12546-R12548 (1999).

---

**17.** J. I. Juaristi, C. Auth, H. Winter, A. Arnau, K. Eder, D. Semrad, F. Aumayr, P. Bauer and P.M. Echenique.

"Unexpected behavior of the stopping of slow ions in ionic crystals".

Physical Review Letters **84**, 2124-2127 (2000).

---

**18.** I. Nagy, J. I. Juaristi and P. M. Echenique.

"Relaxation rate of excited electrons in metals: A non perturbative treatment based on kinetic theory".

Physical Review B **63**, 035102-1, 035102-6 (2000).

---

**19.** M. Peñalba, J. I. Juaristi, E. Zarate, A. Arnau and P. Bauer.

"Electronic stopping power of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and SiO<sub>2</sub> for H, He and N"

Physical Review A **64**, 012902-1,012902-5, (2001).

---

**20.** I. Nagy, M. Alducin, J. I. Juaristi and P. M. Echenique.

"Relaxation of excited electrons in a paramagnetic electron gas: the role of spin".

Physical Review B **64**, 075101-1, 075101-6, (2001).

---

**21.** A. Robin, W. Heiland, J. Jensen, J. I. Juaristi and A. Arnau.

"Channeling effects observed in energy-loss spectra of nitrogen ions scattered of a Pt (110) surface".

Physical Review A **64**, 052901-1,052901-9 (2001).

---

**22.** M. Alducin, V. M. Silkin, J. I. Juaristi and E. Chulkov

"Effect of surface band structure in the energy loss of ions at surfaces"

Nuclear Instruments and Methods B **193**, 585-589 (2002).

---

**23.** M. Alducin, J. I. Juaristi, I. Nagy and P. M. Echenique

"Inelastic scattering of low-energy electrons in metals: the role of kinematics in screening"

Journal of Physics: Condensed Matter **14**, 2647-2651 (2002).

---

**24.** M. Alducin, R. Díez Muiño, J. I. Juaristi, and P. M. Echenique

"Nonlinear effects in the energy loss of a slow dipole in a free-electron gas"

Physical Review A **66**, 054901-1, 054901-4 (2002)

---

**25.** M. Alducin, J. I. Juaristi, and I. Nagy

"Relaxation rate of excited electrons in an electron gas: A comparative study of different approximations "

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **129/2-3**, 117-126 (2003).

---

**26.** M. Alducin, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi

"Time-dependet image potential at a metal surface"

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **129/2-3**, 105-109 (2003).

---

**27.** R. Díez Muiño, M. Alducin, and J. I. Juaristi  
" Spin-polarization effects in the interaction of light ions with a free electron gas "  
Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **129/2-3**, 207-211 (2003).

---

**28.** M. Alducin, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi  
"Ion induced electronic excitations in a spin-polarized electron gas "  
Nuclear Instruments and Methods B **203**, 83-88 (2003).

---

**29.** S. Cernusca, HP. Winter, F. Aumayr, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi  
" Molecular projectile effects for kinetic electron emission from carbon and metal surfaces  
bombarded by slow hydrogen ions"  
Nuclear Instruments and Methods B **203**, 1-7 (2003).

---

**30.** M. Alducin, V. M. Silkin, J. I. Juaristi and E. Chulkov  
"Energy loss of ions at metal surfaces: band structure effects"  
Physical Review A **67**,032903-1, 032903-5 (2003).

---

**31.** I. Nagy, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and P. M. Echenique  
"Short range correlation in an electron gas: A scattering approach"  
Physical Review B **67**, 073102-1, 073102-4 (2003).

---

**32.** A. Robin, M. Reiniger, A. Nürmann, M. Schleberger, J. I. Juaristi, and W. Heiland  
"Trajectory straggling and nonlinear effects in the energy loss of surface-channeled ions"  
Physical Review B **67**, 165409-1, 165409-10 (2003).

---

**33.** H. Winter, J. I. Juaristi, I. Nagy, A. Arnau, and P. M. Echenique  
"Energy loss of slow ions in a nonuniform electron gas"  
Physical Review B **67**, 245401-1, 245401-6 (2003).

---

**34.** J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, A. Dubus, and M. Rösler

"Charge-state dependence of the kinetic electron emission induced by slow ions in metals"

Physical Review A **68**, 012902-1, 012902-7 (2003).

---

**35.** J. I. Juaristi, M. Alducin, and I. Nagy

"The relaxation rate in hot-electron dynamics: beyond the first-order Born approximation in kinetic theory"

Journal of Physics: Condensed Matter **15**, 7859-7865 (2003).

---

**36.** M. Alducin, R. Díez Muiño, J. I. Juaristi, and A. Arnau

"Spin-polarized electron excitation during the neutralization of He ions in metals"

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **137-140**, 401-405 (2004).

---

**37.** M. Alducin, J. I. Juaristi, and P. M. Echenique

"Time-dependent screening in a two dimensional electron gas"

Surface Science **559**, 233-240 (2004).

---

**38.** I. Nagy, R. Díez Muiño, J. I. Juaristi, and P. M. Echenique

"Spin-resolved pair distribution functions in an electron gas: A scattering approach based on consistent potentials"

Physical Review B **69**, 233105-1, 233105-4 (2004).

---

**39.** M. Alducin, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi

"Spin-dependent screening and Auger neutralization of He<sup>+</sup> ions in metals"

Physical Review A **70**, 012901-1, 012901-10 (2004).

---

**40.** M. Alducin, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi

"Spin effects in the screening and Auger neutralization of He<sup>+</sup> ions in a spin-polarized electron gas"

Nuclear Instruments and Methods B **230**, 431-437 (2005).

---

**41.** J. I. Juaristi

"Energy loss of ions interacting with metal surfaces"

Nuclear Instruments and Methods B **230**, 148-157 (2005).

---

**42.** M. N. Faraggi, M. S. Gravielle, M. Alducin, J. I. Juaristi, and V. M. Silkin

"Band structure based collisional model for electronic excitations in ion-surface collisions"

Physical Review A **72**, 012901-1, 012901-6 (2005).

---

**43.** J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Díez Muiño, and M. Rösler

"Electron emission in the Auger neutralization of a spin-polarized He<sup>+</sup> ion embedded in a free electron gas"

Nuclear Instruments and Methods B **232**, 73-78 (2005).

---

**44.** R. Vincent and J. I. Juaristi

"Charge state dependent kinetic electron emission induced by N<sup>q+</sup> ions in a spin-polarized electron gas"

Nuclear Instruments and Methods B **232**, 67-72 (2005).

---

**45.** M. Alducin, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, M. Rösler, and P. M. Echenique

"Spin-dependent electron emission from metals in the neutralization of He<sup>+</sup> ions".

Physical Review A **72**, 024901-1, 024901-4 (2005).

---

**46.** R. Vincent, J. I. Juaristi, and I. Nagy

"Transport cross sections based on a screened interaction potential: Comparison of classical and quantum-mechanical results".

Physical Review A **71**, 062902-1, 062902-5 (2005).

---

**47.** A. G. Borisov, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, D. Sánchez Portal, P. M. Echenique

"Quantum-size effects in the energy loss of charged particles interacting with a confined two-dimensional electron gas".

Physical Review A **73**, 012901-1, 012901-9 (2006).

---

**48.** C. Lemell, M. Alducin, J. Burgdoerfer, J. I. Juaristi, K. Schiessl, B. Solleder, K. Toekesi  
"Interaction of slow multicharged ions with surfaces".

Radiation Physics and Chemistry **76**, 412-417 (2007).

---

**49.** M. Alducin, V. M. Silkin, J. I. Juaristi

"Two dimensional behaviour of friction at a metal surface with a surface state".

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **256**, 383-386 (2007).

---

**50.** J. I. Juaristi, M. Alducin

"Spin dependent screening and Auger neutralization of singly-charged noble gas ions in metals".

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **256**, 24-29 (2007).

---

**51.** R. Vincent, J. I. Juaristi, I. Nagy

"Z<sub>1</sub> oscillations in the spin polarization of electrons excited by slow ions in a spin-polarized electron gas".

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **258**, 79-82 (2007).

---

**52.** V. M. Silkin, M. Quijada, M. G. Vergniory, M. Alducin, A. G. Borisov, R. Díez Muiño,  
J. I. Juaristi, D. Sánchez Portal, E. V. Chulkov, P. M. Echenique

"Dynamic screening and electron dynamics in low-dimensional metal systems".

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **258**, 72-78 (2007).

---

**53.** M. S. Gravielle, M. Alducin, J. I. Juaristi, V. M. Silkin

"3d-shell contribution to the energy loss of protons during grazing scattering from Cu(111) surfaces"

Physical Review A **76**, 044901-1, 044901-4 (2007).

---

**54.** J. M. Pruneda, D. Sánchez Portal, A. Arnau, J. I. Juaristi, E. Artacho

“Electronic stopping in LiF from first principles”

Physical Review Letters **99**, 235501-1, 235501-4 (2007).

---

**55.** J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Díez Muiño, H. F. Busnengo, A. Salin

“Role of electron-hole excitations in the dissociative adsorption of diatomic molecules on metal surfaces”

Physical Review Letters **100**, 116102-1, 116102-4 (2008).

---

**56.** D. Primetzhofer, S. N. Markin, J. I. Juaristi, E. Taglauer, and P. Bauer

“Crystal Effects in the Neutralization of He<sup>+</sup> Ions in the Low Energy Ion Scattering Regime”

Physical Review Letters **100**, 213201-1, 213201-4 (2008).

---

**57.** I. Nagy, R. Vincent, J. I. Juaristi and P. M. Echenique

“Energy-loss straggling of swift heavy ions in an electron gas”

Physical Review A **78**, 012902-1, 012902-4 (2008).

---

**58.** V. M. Silkin, M. Alducin, J. I. Juaristi, E. V. Chulkov, and P. M. Echenique

“The role of an electronic surface state in the stopping power of a swift charged particle in front of a metal”

Journal of Physics-Condensed Matter **20**, 304209-1, 304209-7 (2008).

---

**59.** D. Primetzhofer, S. N. Markin, J. I. Juaristi, J. E. Valdes, and P. Bauer

“Analysis of the Auger neutralization of He<sup>+</sup> at Cu surfaces in low energy ion scattering”

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **267**, 575-577 (2009).

---

**60.** D. Primetzhofer, S. N. Markin, J. I. Juaristi, E. Taglauer, and P. Bauer

“LEIS: A reliable tool for surface composition analysis?”

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **267**, 624-627 (2009).

---

**61.** J. M. Pruneda, D. Sanchez-Portal, A. Arnau, J. I. Juaristi, and E. Artacho  
“Heating electrons with ion irradiation: A first-principles approach”

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **267**, 590-593 (2009).

---

**62.** I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, M. Alducin, and R. Díez Muino  
“Dissipative effects in the dynamics of N<sub>2</sub> on tungsten surfaces”

Journal of Physics-Condensed Matter **21**, 264007-1, 264007-6 (2009).

---

**63.** K. R. Geethalaksmi, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin

“Non-reactive scattering of N<sub>2</sub> from W(110) surface studied with different exchange-correlation functionals”

Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 4357-4364 (2011).

---

**64.** I. Goikoetxea, J. Beltrán, J. Meyer, J. I. Juaristi, M. Alducin, and K. Reuter

“Non-adiabatic effects during the dissociative adsorption of O<sub>2</sub> at Ag(111)? A first-principles divide and conquer study”

New Journal of Physics, **14**, 013050-1, 013050-17 (2012).

---

**65.** L. Martin-Gondre, M. Alducin, G. A. Bocan, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi

“Competition between Electron and Phonon Excitations in the Scattering of Nitrogen Atoms and Molecules off Tungsten and Silver Metal Surfaces”

Physical Review Letters, **108**, 096101-1, 096101-4 (2012).

---

**66.** M. Blanco-Rey, M. Alducin, J. I. Juaristi, and P. L. de Andres

“Diffusion of Hydrogen in Pd Assisted by Inelastic Ballistic Hot Electrons”

Physical Review Letters, **108**, 115902-1, 115902-5 (2012).

---

**67.** L. Martin-Gondre, G. A. Bocan, M. Alducin, J. I. Juaristi, and R. Díez Muiño,  
“Energy dissipation channels in the adsorption of N on Ag(1 1 1)”  
Computational and Theoretical Chemistry, **990**, 126-131 (2012).

---

**68.** I. Goikoetxea, M. Alducin, R. Díez Muiño and J. I. Juaristi,  
“Dissociative and non-dissociative adsorption dynamics of N<sub>2</sub> on Fe(110)”  
Physical Chemistry Chemical Physics **14**, 7471-7480 (2012)

---

**69.** M. Ahsan Zeb, J. Kohanoff, D. Sánchez-Portal, A. Arnau, J. I. Juaristi, and Emilio  
Artacho  
“Electronic stopping power in gold: The role of d electrons and the H/He anomaly”  
Physical Review Letters, **108**, 225504-1, 225504-5 (2012)

---

**70.** A. S. Muzas, J.I. Juaristi, M. Alducin, R. Díez Muino, Geert-Jan Kroes, and Cristina  
Díaz Blanco  
“Vibrational deexcitation and rotational excitation of H<sub>2</sub> and D<sub>2</sub> scattered from Cu(111):  
Adiabatic versus non-adiabatic dynamics”  
Journal of Chemical Physics, **137**, 064707-1, 064707-9 (2012)

---

**71.** M. Blanco-Rey, L. Martin-Gondre, R. Díez Muino, M. Alducin, J. I. Juaristi  
“Dynamics of Nitrogen Scattering off N-Covered Ag(111)”  
The Journal of Physical Chemistry C **116**, 21903–21912 (2012)

---

**72.** L. Martin-Gondre, G. Bocan, M. Blanco-Rey, M. Alducin, J. I. Juaristi, R. Díez Muino  
“Scattering of Nitrogen Atoms off Ag(111) Surfaces: A Theoretical Study”  
The Journal of Physical Chemistry C **117**, 9779–9790 (2013)

---

**73.** M. Blanco-Rey, E. Díaz, G. A. Bocan, R. Díez Muino, M. Alducin, and J. I. Juaristi  
“Efficient N<sub>2</sub> Formation on Ag(111) by Eley–Rideal Recombination of Hyperthermal Atoms”

The Journal of Physical Chemistry Letters **4**, 3704–3709 (2013)

---

**74.** O. Osmani, N. Medvedev, J.I. Juaristi, M. Schleberger, B. Rethfeld  
“Transient metal-like electrical conductivity in swift heavy ion irradiated insulators”  
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **317**, 72–76 (2013)

---

**75.** M. Blanco-Rey, J.I. Juaristi, R. Díez Muiño, H.F. Busnengo, G.J. Kroes, and M. Alducin

“Electronic Friction Dominates Hydrogen Hot-Atom Relaxation on Pd(100)”

Physical Review Letters **112**, 103203-1–103203-5 (2014)

---

**76.** C. A. Ríos Rubiano, G. A. Bocan, J. I. Juaristi, and M. S. Gravielle

“Energy-loss contribution to grazing scattering of fast He atoms from a silver surface”

Physical Review A **89**, 032706-1–032706-7 (2014)

---

**77.** I. Goikoetxea, J. Meyer, J. I. Juaristi, M. Alducin, and K. Reuter

“Role of physisorption states in molecular scattering: A semilocal density-functional theory study on O<sub>2</sub>/Ag(111)”

Physical Review Letters **112**, 151601-1–151601-5 (2014)

---

**78.** I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin

“Surface strain improves molecular adsorption but hampers dissociation for N<sub>2</sub> on the Fe/W(110) surface”

Physical Review Letters **113**, 066103-1–066103-5 (2014)

---

**79.** C. A. Ríos Rubiano, G. A. Bocan, J. I. Juaristi, and M. S. Gravielle  
“Trajectory-dependent energy loss for swift He atoms axially scattered off a silver surface”  
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **340**, 15-20 (2014).

---

**80.** P. Saalfrank, J. I. Juaristi, M. Alducin, M. Blanco-Rey, and R. Díez Muiño  
“Vibrational lifetimes of hydrogen on lead films: An ab initio molecular dynamics with electronic friction (AIMDEF) study”  
Journal of Chemical Physics **141**, 234702-1, 234702-11 (2014).

---

**81.** J. I. Juaristi, E. Díaz, G. A. Bocan, R. Díez Muiño, M. Alducin, and M. Blanco-Rey  
“Angular distributions and rovibrational excitation of N<sub>2</sub> molecules recombined on N-covered Ag(1 1 1) by the Eley–Rideal ”  
Catalysis Today **244**, 115-121 (2015).

---

**82.** L. Martin-Gondre, J. I. Juaristi, M. Blanco-Rey, R. Díez Muiño, and M. Alducin  
“Influence of the van der Waals interaction in the dissociation dynamics of N<sub>2</sub> on W(110) from first principles”  
Journal of Chemical Physics **142**, 074704-1, 074704-11 (2015)

---

**83.** I. Loncaric, M. Alducin, and J. I. Juaristi  
“Dissociative dynamics of O<sub>2</sub> on Ag(110)”  
Physical Chemistry Chemical Physics **17**, 9436 - 9445 (2015).

---

**84.** I. Goikoetxea, M. Alducin, R. Díez Muiño and J. I. Juaristi  
“The dynamics of adsorption and dissociation of N<sub>2</sub> in a monolayer of iron on W(110)”  
Physical Chemistry Chemical Physics **17**, 19432 - 19445 (2015).

---

**85.** O. Galparsoro, R. Pétuya, J. I. Juaristi, C. Crespos, M. Alducin, and P. Larrégaray  
“Energy Dissipation to Tungsten Surfaces upon Eley–Rideal Recombination of N<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>”  
Journal of Physical Chemistry C **119**, 15434 - 15442 (2015).

---

**86.** S. P. Rittmeyer, J. Meyer, J. I. Juaristi, and K. Reuter  
“Electronic Friction-Based Vibrational Lifetimes of Molecular Adsorbates: Beyond the Independent-Atom Approximation”  
Physical Review Letters **115**, 046102-1, 046102-5 (2015).

---

**87.** D. Novko, M. Blanco-Rey, J. I. Juaristi, and M. Alducin  
“*Ab initio* molecular dynamics with simultaneous electron and phonon excitations: Application to the relaxation of hot atoms and molecules on metal surfaces”  
Physical Review B (Rapid Communication) **92**, 201411(R)-1, 201411(R)-5 (2015).

---

**88.** I. Loncaric, M. Alducin, P. Saalfrank, and J. I. Juaristi  
“Femtosecond-laser-driven molecular dynamics on surfaces: Photodesorption of molecular oxygen from Ag(110)”  
Physical Review B **93**, 014301-1, 014301-9 (2016).

---

**89.** D. Novko, M. Blanco-Rey, M. Alducin, and J. I. Juaristi,  
“Surface electron density models for accurate *ab initio* molecular dynamics with electronic friction”  
Physical Review B **93**, 245435-1, 245435-12 (2016).

---

**90.** Xuan Luo, Bin Jiang, J. I. Juaristi, Maite Alducin and Hua Guo  
“Electron-hole pair effects in methane dissociative chemisorption on Ni(111)”  
Journal of Chemical Physics **145**, 044704-1, 044704-8 (2016).

---

**91.** María Blanco-Rey, J. I. Juaristi, Maite Alducin, María J. López, and Julio A. Alonso  
“Is Spillover Relevant for Hydrogen Adsorption and Storage in Porous Carbons Doped with Palladium Nanoparticles?”

Journal of Physical Chemistry C **120**, 17357-17364 (2016).

---

**92.** D. Novko, M. Blanco-Rey, M. Alducin, and J. I. Juaristi  
“Energy loss in gas-surface dynamics: Electron–hole pair and phonon excitation upon adsorbate relaxation”

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **382**, 26-31 (2016).

---

**93.** Ivor Lončarić, Maite Alducin, Peter Saalfrank, J. I. Juaristi  
“Femtosecond laser pulse induced desorption: A molecular dynamics simulation”

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **382**, 114-118 (2016).

---

**94.** Ivor Lončarić, Maite Alducin, J. I. Juaristi  
“Molecular dynamics simulation of O<sub>2</sub> adsorption on Ag(110) from first principles electronic structure calculations”

Physical Chemistry Chemical Physics **18**, 27366 – 27376 (2016).

---

**95.** Dino Novko, Maite Alducin, M. Blanco-Rey, and J. I. Juaristi  
“Effects of electronic relaxation processes on vibrational linewidths of adsorbates on surfaces: The case of CO/Cu(100)”

Physical Review B **94**, 224306-1, 224306-19 (2016).

---

**96.** R. Scholz, G. Floss, P. Saalfrank, G. Fuchsel, I. Loncaric, J. I. Juaristi  
“Femtosecond-laser induced dynamics of CO on Ru(0001): Deep insights from a hot-electron friction model including surface motion”

Physical Review B **94**, 165447-1, 165447-17 (2016).

---

**97.** Oihana Galparsoro, Remi Petuya, Fabio Busnengo, J. I. Juaristi, C. Crespos, Maite Alducin, Pascal Larregaray

“Hydrogen abstraction from metal surfaces: when electron-hole pair excitations strongly affect hot-atom recombination”

Physical Chemistry Chemical Physics **18**, 31378 – 31383 (2016).

---

**98.** D. Roth, B. Bruckner, M. V. Moro, S. Gruber, D. Goebel, J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Steinberger, J. Duchoslav, D. Primetzhofer, and P. Bauer

“Electronic Stopping of Slow Protons in Transition and Rare Earth Metals: Breakdown of the Free Electron Gas Concept”

Physical Review Letters **118**, 103401-1, 103401-5 (2017).

---

**99.** J. I. Juaristi, M. Alducin, and P. Saalfrank

“Femtosecond laser induced desorption of H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, and HD from Ru(0001): Dynamical promotion and suppression studied with *ab initio* molecular dynamics with electronic friction”

Physical Review B **95**, 125439-1, 125439-7 (2017).

---

**100.** Geert-Jan Kroes, J. I. Juaristi, and M. Alducin

“Vibrational Excitation of H<sub>2</sub> Scattering from Cu(111): Effects of Surface Temperature and of Allowing Energy Exchange with the Surface”

Journal of Physical Chemistry C **121**, 13617-13633 (2017).

---

**101.** D. Novko, I. Loncaric, M. Blanco-Rey, J. I. Juaristi, and M. Alducin

“Energy loss and surface temperature effects in *ab initio* molecular dynamics simulations: N adsorption on Ag(111) as a case study”

Physical Review B **96**, 085437-1, 085437-8 (2017).

---

**102.** O. Galparsoro, J. I. Juaristi, C. Crespos, Maite Alducin, P. Larregaray

“Stereodynamics of Diatom Formation through Eley-Rideal Abstraction”

Journal of Physical Chemistry C **121**, 19849-19858 (2017).

---

- 103.** O. Galparsoro, H. F. Busnengo, J. I. Juaristi, C. Crespos, M. Alducin, P. Larregaray  
“Hot-atom abstraction dynamics of hydrogen from tungsten surfaces: The role of surface structure”  
Journal of Chemical Physics **147**, 121103-1, 121103-5 (2017).
- 
- 104.** M. J. Lopez, M. Blanco-Rey, J. I. Juaristi, M. Alducin, J. A. Alonso  
“Manipulating the Magnetic Moment of Palladium Clusters by Adsorption and Dissociation of Molecular Hydrogen”  
Journal of Physical Chemistry C **121**, 20756-20762 (2017).
- 
- 105.** Ivor Lončarić, Gernot Fuchs, J. I. Juaristi, and Peter Saalfrank  
“Strong Anisotropic Interaction Controls Unusual Sticking and Scattering of CO at Ru(0001)”  
Physical Review Letters **119**, 146101-1, 146101-5 (2017).
- 
- 106.** D. Roth, B. Bruckner, G. Undeutsch, V. Paneta, A. I. Mardare, C. L. McGahan, M. Dosmailov, J. I. Juaristi, M. Alducin, J. D. Pedarnig, R. F. Haglund, Jr., D. Primetzhofer, and P. Bauer  
“Electronic Stopping of Slow Protons in Oxides: Scaling Properties”  
Physical Review Letters **119**, 163401-1, 163401-5 (2017).
- 
- 107.** M. Alducin, J. I. Juaristi, and R. Díez Muiño  
“Non-adiabatic effects in elementary reaction processes at metal surfaces”  
Progress in Surface Science **92**, 317-340 (2017).
- 
- 108.** D. Novko, M. Alducin, and J. I. Juaristi  
“Electron-Mediated Phonon-Phonon Coupling Drives the Vibrational Relaxation of CO on Cu(100)”  
Physical Review Letters **120**, 156804-1, 156804-6 (2018).
- 
- 109.** Alejandro Peña-Torres, H. Fabio Busnengo, J. I. Juaristi, Pascal Larregaray, and C. Crespos  
“Dynamics of N<sub>2</sub> sticking on W(100): the decisive role of van der Waals interactions”  
Physical Chemistry Chemical Physics **20**, 19326 – 19331 (2018).
-

**110.** Oihana Galparsoro, H. Fabio Busnengo, Alejandra E. Martínez, J. I. Juaristi, Maite Alducin, and Pascal Larregary

“Energy dissipation to tungsten surfaces upon hot-atom and Eley-Rideal recombination of H-2”

Physical Chemistry Chemical Physics **20**, 21334-21344 (2018).

---

**111.** D. Novko, J. C. Tremblay, M. Alducin, and J. I. Juaristi

“Ultrafast Transient Dynamics of Adsorbates on Surfaces Deciphered: The Case of CO on Cu(100)”

Physical Review Letters **122**, 016806-1, 016806-5 (2019).

---

**112.** N. E. Koval, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin

“Elastic properties of the TiZrNbTaMo multi-principal element alloy studied from first-principles”

Intermetallics **106**, 130-140 (2019).

---

**113.** Gernot Fuchsel, Xueyao Zhou, Bin Jiang, Bin, Joseba Iñaki Juaristi, Maite Alducin, Hua Guo, Geert-Jan Kroes

“Reactive and Non-Reactive Scattering of HCl from Au(111): An Ab Initio Molecular Dynamics Study”

Journal of Physical Chemistry C **123**, 2287-2289 (2019)

---

**114.** Alejandro Peña-Torres, H. Fabio Busnengo, Joseba Iñaki Juaristi, Pascal Larregaray, Cedric Crespos

“Energy Dissipation Effects on the Adsorption Dynamics of N<sub>2</sub> on W(100)”

Journal of Physical Chemistry C **123**, 2900-2910 (2019)

---

**115.** Ivor Lončarić, Maite Alducin, Joseba Iñaki Juaristi, and Dino Novko

“CO stretch vibration lives long on Au(111)”

Journal of Physical Chemistry Letters **10**, 1043-1047 (2019)

---

**116.** Maite Alducin, Joseba Iñaki Juaristi, Alejandra Granja del Río, María José López, and Julio A. Alonso

“The Dynamics of Cluster Isomerization Induced by Hydrogen Adsorption”

Journal of Physical Chemistry C **123**, 15236-15243 (2019)

---

- 117.** Maite Alducin, Nicholas Camillone III, Sung-Young Hong, and J. Iñaki Juaristi  
“Electrons and Phonons Cooperate in the Laser-Induced Desorption of CO from Pd(111)”  
Physical Review Letters **123**, 246802-1, 246802-6 (2019).
- 
- 118.** Alejandro Rivero Santamaría, Maite Alducin, R. Díez Muiño, and J. Iñaki Juaristi  
“Ab Initio Molecular Dynamics Study of Alignment Resolved O<sub>2</sub> Scattering from Highly Oriented Pyrolytic Graphite”  
The Journal of Physical Chemistry C **123**, 31094-31102 (2019).
- 
- 119.** Robert Scholz, Steven Lindner, Ivor Lončarić, Jean Christophe Tremblay, J. I. Juaristi, M. Alducin, and Peter Saalfrank  
“Vibrational response and motion of carbon monoxide on Cu(100) driven by femtosecond laser pulses: Molecular dynamics with electronic friction”  
Physical Review B **100**, 245431-1, 245431-20 (2019).
- 
- 120.** Natalia E. Koval, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin  
“Structure and properties of CoCrFeNiX multi-principal element alloys from ab initio calculations”  
Journal of Applied Physics **127**, 145102-1, 145102-12 (2020).
- 
- 121.** Nick Gerrits, J. I. Juaristi, and Jörg Mayer  
“Electronic friction coefficients from the atom-in-jellium model for Z=1-92”  
Physical Review B **102**, 155130-1, 155130-11 (2020).
- 
- 122.** Alejandro Rivero Santamaría, Maximiliano Ramos, Maite Alducin, Heriberto Fabio Busnengo, Ricardo Díez Muiño, and J. Iñaki Juaristi  
“High-Dimensional Atomistic Neural Network Potential to Study the Alignment-Resolved O<sub>2</sub> Scattering from Highly Oriented Pyrolytic Graphite”  
The Journal of Physical Chemistry A **221**, 2588-2600 (2021).
- 
- 123.** Alejandra Granja del Río, Maite Alducin, Joseba Iñaki Juaristi, María José López, and Julio A. Alonso  
“Absence of spillover of hydrogen adsorbed on small palladium clusters anchored to graphene vacancies”  
Applied Surface Science **559**, 149835-1, 149835-9 (2021).
-

- 124.** Auguste Tetenoire, Maite Alducin, and J. I. Juaristi  
“Insights into the Coadsorption and Reactivity of O and CO on Ru(0001) and Their Coverage Dependence”  
Journal of Physical Chemistry C **125**, 12614-12627 (2021).
- 
- 125.** Alfredo Serrano Jimenez, Alberto P. Sánchez Muzas, Yaolong Zhang, Juraj Ovcár, Bin Jiang, Ivor Lončarić, J. I. Juaristi, and Maite Alducin  
“Photoinduced Desorption Dynamics of CO from Pd(111): A Neural Network Approach”  
Journal of Chemical Theory and Computation **17**, 4648-4659 (2021).
- 
- 126.** Ivor Lončarić, Maite Alducin, and Joseba Iñaki Juaristi  
“O<sub>2</sub> on Ag(110): A puzzle for exchange-correlation functionals”  
Chemical Physics **554**, 111424-1, 111424-7 (2022).
- 
- 127.** Raúl Bombín, Maite Alducin, and J. Iñaki Juaristi  
“Adsorption and dissociation of diatomic molecules on monolayer 1H-MoSe<sub>2</sub>”  
Physical Review B **105**, 035404-1, 035404-20 (2022).
- 
- 128.** A.S. Muzas, Alfredo Serrano Jiménez, Juraj Ovcár, Ivor Lončarić, Maite Alducin, and J. Iñaki Juaristi  
“Absence of isotope effects in the photo-induced desorption of CO from saturated Pd(111) at high laser fluence”  
Chemical Physics **558**, 111518-1, 111424-8 (2022).
- 
- 129.** Auguste Tetenoire, Christopher Ehlert, J. I. Juaristi, Peter Saalfrank, and M. Alducin  
“Why Ultrafast Photoinduced CO Desorption Dominates over Oxidation on Ru(0001)”  
Journal of Physical Chemistry Letters **13**, 8516-8521 (2022)
- 
- 130.** Raúl Bombín, A. S. Muzas, Dino Novko, J. Iñaki Juaristi, and Maite Alducin  
“Anomalous transient blueshift in the internal stretch mode of CO/Pd(111)”  
Physical Review B **107**, L121404 -1, L121404 -6 (2023).
- 
- 131.** Auguste Tetenoire, J. I. Juaristi, M. Alducin  
“Photoinduced CO Desorption Dominates over Oxidation on Different O + CO Covered Ru(0001) Surfaces”  
Journal of Physical Chemistry C **127**, 10087–10096 (2023)
-

---

**132.** Auguste Tetenoire, J. I. Juaristi, M. Alducin

“Disentangling the role of electrons and phonons in the photoinduced CO desorption and CO oxidation on (O,CO)-Ru(0001)”

Frontiers in Chemistry C **11**, 1235176-01, 1235176–10 (2023)

---

**133.** Raúl Bombín, A. S. Muzas, Dino Novko, J. Iñaki Juaristi, and Maite Alducin

“Vibrational dynamics of CO on Pd(111) in and out of thermal equilibrium”

Physical Review B **108**, 045409-1, 045409 -14 (2023).

---

**134.** Steven Lindner, Ivor Lončarić, Lovro Vrček, Maite Alducin, J. Iñaki Juaristi, and Peter Saalfrank

“Femtosecond Laser-Induced Desorption of Hydrogen Molecules from Ru(0001): A Systematic Study Based on Machine-Learned Potentials”

The Journal of Physical Chemistry C **127**, 14756–14764 (2023).

---

**135.** Alberto S. Muzas, Alfredo Serrano Jiménez, Yaolong Zhang, Bin Jiang, J. Iñaki Juaristi, and Maite Alducin

“Multicoverage Study of Femtosecond Laser-Induced Desorption of CO from Pd(111)”

Journal of Physical Chemistry Letters **15**, 2587-2594 (2024)

---

**136.** Ivan Žugec, Auguste Tetenoire, Alberto S. Muzas, Yaolong Zhang, Bin Jiang, Maite Alducin, and J. Iñaki Juaristi

“Understanding the Photoinduced Desorption and Oxidation of CO on Ru(0001) Using a Neural Network Potential Energy Surface”

JACS Au **4**, 1997-2004 (2024)

---

**137.** N. Koval, J. Iñaki Juaristi, and Maite Alducin

“Strong-field effects in the photo-induced dissociation of the hydrogen molecule on a silver nanoshell”

Chemical Science **15**, 18581-18591 (2024)

---

**138.** Raúl Bombín, Ricardo Díez Muiño, J. Iñaki Juaristi, and Maite Alducin  
“Scattering of CO from Vacant-MoSe<sub>2</sub> with O Adsorbates: Is CO<sub>2</sub> Formed?”

Journal of Physical Chemistry C **128**, 19661-19668 (2024)

---

**139.** Federico J. Gonzalez, Alberto S. Muzas, J. Iñaki Juaristi, Maite Alducin, H. Fabio Busnengo

“Femtosecond laser-induced diffusion and desorption of CO adsorbed on a weak electron-phonon coupling surface: Cu(110)”

Journal of Chemical Physics **162**, 174701-1, 174701-13 (2025)

---

**140.** Bruno Mladineo, J. Iñaki Juaristi, Maite Alducin, Peter Saalfrank, and Ivor Lončarić  
“Photoinduced dynamics of CO on Ru(0001): Understanding experiments by simulations with all degrees of freedom”

Journal of Chemical Physics **163**, 044103-1, 044103-8 (2025)

---

**141.** Ivan Žugec, Tin Hadži Veljković, Maite Alducin, and J. Iñaki Juaristi

“Dynamic Training Enhances Machine Learning Potentials for Long-Lasting Molecular Dynamics”

Journal of Chemical Information and Modeling **65**, 8033-8041 (2025)

---

**142.** Raúl Bombín, Alberto S. Muzas, Alfredo Serrano Jiménez, J. Iñaki Juaristi, Maite Alducin

“Asymmetry and coverage dependence in two-pulse correlation measurements of CO photodesorption from Pd(111): Insights from theory”

Journal of Chemical Physics **164**, 064709-1, 064709-11 (2026)

---

## 6.2. Capítulos de libros

M. Alducin, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and A. Arnau

"Electronic processes in the interaction of ions with solids"

Capítulo 6 en el libro Recent Research Developments in Physics 4 (2003), pags. 97-122.

ISBN: 81-7895-078-2.

M. Alducin and J. I. Juaristi

"Energy Loss in the Interaction of Atomic Particles with Solid Surfaces"

Capítulo 10 en el libro "Advances in Quantum Chemistry", Vol. 45: "Theory of the Interaction of Swift Ions with Matter, Part 1" (2004), pags 223-245.

M. Alducin, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, M. Rösler, P. M. Echenique

"Spin polarization of electrons emitted in the neutralization of He<sup>+</sup> ions in solids"

Capítulo 5 en el libro "Slow Heavy-Particle Induced Electron Emission from Solid Surfaces"

Springer Tracts in Modern Physics Vol. 225 (2007), pags. 153-183

ISBN: 3-540-70788-3.

M. Alducin, R. Díez Muiño, J. I. Juaristi

"Energy Dissipation Channels in Reactive and Non-reactive Scattering at Surfaces"

Capítulo 15 en el libro "Dynamics of Gas-Surface Interactions"

Springer Series in Surface Science Vol. 50 (2013), pags. 371-388

ISBN: 978-3-642-32955-5

M. Alducin, R. Díez Muiño, J. I. Juaristi

"Nonadiabatic effects in gas-surface dynamics"

Capítulo 28 en el libro:

Springer Handbook in Surface Science (2020), pags. 929-965

ISBN: 978-3-030-46906-1

## **7. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SUBVENCIONADOS**

**Proyecto:** TRANSFERENCIA DE CARGA Y PÉRDIDA DE ENERGÍA EN LA INTERACCIÓN DE IONES CON SÓLIDOS Y SUPERFICIES. (PB92-0474)

**Entidad:** DGICYT

**Investigador Principal:** PEDRO MIGUEL ECHENIQUE LANDIRIBAR.

**Duración:** 26/05/93-26/05/98

**Financiación:** 12.000.000 pts

**Proyecto:** INTERACTION OF SLOW, HIGHLY CHARGED IONS WITH SOLID SURFACES.

**Entidad:** PROGRAMA HCM COMUNIDAD EUROPEA.

**Investigador Principal:** NIKOLAUS STOLTERFOHT.

**Duración:** 1993-96.

**Proyecto:** CHARGE EXCHANGE PROCESSES AT SURFACES.

**Entidad:** PROGRAMA HCM COMUNIDAD EUROPEA.

**Investigador Principal:** V. KEMPTER.

**Duración:** SEPTIEMBRE 1994-SEPTIEMBRE 1996.

**Proyecto:** QUANTIFICATION OF SURFACE ANALYSIS BY LOW ENERGY.

**Entidad:** PROGRAMA HCM COMUNIDAD EUROPEA.

**Investigador Principal:** H. BRONGERSMA.

**Duración:** DICIEMBRE 1994- DICIEMBRE 1996.

**Proyecto:** INTERCAMBIO DE CARGA, PERDIDA DE ENERGÍA Y PROCESOS ELECTRÓNICOS EN LA INTERACCIÓN DE IONES Y ELECTRONES CON SÓLIDOS (PB97-0636).

**Entidad:** DGICYT

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE LANDIRIBAR.

**Duración:** 12/01/1998-12/01/2001

**Financiación:** 5.000.000 pts

**Proyecto:** INTERACCIÓN DE IONES CON SÓLIDOS CONDUCTORES Y AISLANTES.

**Entidad:** GOBIERNO VASCO, GRUPO DE ALTO RENDIMIENTO.

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE LANDIRIBAR.

**Duración:** 1996.

**Proyecto:** PROCESOS INELÁSTICOS EN LA INTERACCIÓN DE IONES CON SUPERFICIES.

**Entidad:** GOBIERNO VASCO, GRUPO DE ALTO RENDIMIENTO

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE LANDIRIBAR.

**Duración:** 1998.

**Proyecto:** PROPIEDADES DE ESTADOS ELECTRÓNICOS EXCITADOS EN EXPERIMENTOS DE FOTOEMISIÓN.

**Entidad:** GOBIERNO VASCO, GRUPO DE ALTO RENDIMIENTO.

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE LANDIRIBAR.

**Duración:** 1999.

**Proyecto:** EXCITACIONES ELECTRÓNICAS EN SÓLIDOS Y SUPERFICIES DE DISTINTA NATURALEZA Y ESTRUCTURA.

**Entidad:** GOBIERNO VASCO, GRUPO DE ALTO RENDIMIENTO.

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE LANDIRIBAR.

**Duración:** 2000.

**Proyecto:** INTERACCIÓN DE PARTÍCULAS CARGADAS CON SÓLIDOS Y SUPERFICIES. RESPUESTA DINÁMICA Y EFECTOS DE MUCHOS CUERPOS EN SÓLIDOS. NANOESTRUCTURAS. MICROSCOPIA ELECTRÓNICA Y DE EFECTO TÚNEL.

**Entidad:** UNIVERSIDAD DEL PAÍS VASCO.

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE LANDIRIBAR.

**Duración:** 1998-2000.

**Proyecto:** INTERACCIÓN DE IONES Y ELECTRONES CON SÓLIDOS Y SUPERFICIES (BFM2001-0076)

**Entidad:** MINISTERIO DE CIENCIA Y TECNOLOGIA

**Investigador Principal:** A. ARNAU

**Duración:** 28/12/2001-27/12/2004

**Financiación:** 62.204,75€

**Proyecto:** SUBVENCIÓN GENERAL DE GRUPOS CONSOLIDADOS Y DE ALTO RENDIMIENTO DE LA UPV (Ref. 9/UPV 00206.215-13639/2001)

**Entidad:** UNIVERSIDAD DEL PAÍS VASCO

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE

**Duración:** 04/10/2001-31/12/2006

**Financiación:** 847.548,63€

**Proyecto:** ELECTRONES EN NANOESTRUCTURAS: MODELIZACIÓN DESDE PRIMEROS PRINCIPIOS (FIS2004-06490-C03-01)

**Entidad:** MEC

**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE

**Duración:** 12/12/2004-12/12/2007

**Financiación:** 156.400,00€

**Proyecto:** NETWORK OF EXCELLENCE 'NANOQUANTA' (VI Programa Marco Unión Europea)  
**Entidad:** UNIÓN EUROPEA  
**Investigador Principal:** P. M. ECHENIQUE LANDIRIBAR (NODO DE SAN SEBASTIÁN)  
**Duración:** 1/6/2004-31/5/2008.  
**Financiación:** 503.900,00€

**Proyecto:** RED DE EXCELENCIA METAMORPHOSE  
**Entidad:** UNIÓN EUROPEA  
**Investigador Principal:** PEDRO MIGUEL ECHENIQUE LANDIRIBAR (NODO DE SAN SEBASTIÁN)  
**Duración:** 1/6/2004-31/5/2008.  
**Financiación:** 200.000,00€

**Proyecto:** ESTUDIO TEORICO DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRONICAS DE NANOSTRUCTURAS (IT-366-07)  
**Entidad:** GOBIERNO VASCO  
**Investigador Principal:** ANDRES ARNAU PINO  
**Duración:** 01/01/2007-31/12/2012  
**Financiación:** 561.968,02€

**Proyecto:** DINAMICA DE ELECTRONES EN NANOSTRUCTURAS Y SUPERFICIES  
**Entidad:** MEC (FIS2007-66711-C02-01)  
**Investigador Principal:** ANDRES ARNAU PINO  
**Duración:** 01/10/2007-31/10/2010  
**Financiación:** 242.000,00€

**Proyecto:** PROCESOS ELEMENTALES EN INTERFASES GAS/SUPERFICIE POR METODOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS  
**Entidad:** G.V. CONVOCATORIA DE PROYECTOS DE LA COMUNIDAD DE TRABAJO DE LOS PIRINEOS  
**Investigador Principal:** JOSEBA IÑAKI JUARISTI OLIDEN  
**Duración:** 2009-2010.  
**Financiación:** 3.000

**Proyecto:** PROPIEDADES ELECTRONICAS Y REACTIVIDAD DE SISTEMAS COMPLEJOS (FIS2010-19609-C02-02)  
**Entidad:** MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACION  
**Investigador Principal:** RICARDO DIEZ MUIÑO  
**Duración:** 01/01/2011-31/12/2013.  
**Financiación:** 151.250€

**Proyecto:** ESTUDIO TEORICO DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DE NANOESTRUCTURAS Y SUPERFICIES (IT756-13)

**Entidad:** GOBIERNO VASCO

**Investigador Principal:** ANDRES ARNAU PINO

**Duración:** 01/01/2013-31/12/2018

**Financiación:** 333.599,00€

**Proyecto:** REACTIVIDAD, PROPIEDADES ELECTRONICAS Y ESTRUCTURALES DE SISTEMAS COMPLEJOS (FIS2013-48286-C2-2-P)

**Entidad:** MINISTERIO DE ECONOMIA Y COMPETITIVIDAD

**Investigador Principal:** JOSEBA IÑAKI JUARISTI OLIDEN

**Duración:** 01/01/2014-31/12/2016.

**Financiación:** 151.250€

**Proyecto:** TRANSFERENCIA DE ENERGIA EN LA INTERACCION Y DINAMICA DE ATOMOS Y MOLECULAS EN SUPERFICIES (FIS2016-76471-P)

**Entidad:** MINISTERIO DE ECONOMIA, INDUSTRIA Y COMPETITIVIDAD

**Investigador Principal:** RICARDO DIEZ MUIÑO Y MAITE ALDUCIN OCHOA

**Duración:** 30/12/2016-29/12/2019

**Financiación:** 145.200€

**Proyecto:** GRUPO DE FISICOQUÍMICA DE SUPERFICIES Y NANOESTRUCTURAS (IT1246-19)

**Entidad:** GOBIERNO VASCO

**Investigador Principal:** JOSEBA IÑAKI JUARISTI OLIDEN

**Duración:** 01/01/2019-31/12/2021

**Financiación:** 255.000€

**Proyecto:** INTERFACES GAS / SOLIDO: ACOPLAMIENTO ENTRE LA DINAMICA NUCLEAR Y LA DINAMICA ELECTRONICA (PID2019-107396GB-I00)

**Entidad:** MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACION

**Investigador Principal:** RICARDO DIEZ MUIÑO Y MAITE ALDUCIN OCHOA

**Duración:** 01/06/2020-31/12/2023

**Financiación:** 90.750,00€

**Proyecto:** GRUPO DE FISICOQUÍMICA DE SUPERFICIES Y  
NANOESTRUCTURAS  
(IT1569-22)  
**Entidad:** GOBIERNO VASCO  
**Investigador Principal:** JOSEBA IÑAKI JUARISTI OLIDEN  
**Duración:** 01/01/2022-31/12/2025  
**Financiación:** 331.800€

**Proyecto:** TEORIA Y APLICACIONES DE DINAMICAS COMPLEJAS  
GAS/SUPERFICIE EN SISTEMAS ALTAMENTE EXCITADOS  
(PID2022-140163NB-I00)  
**Entidad:** MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACION  
**Investigador Principal:** MAITE ALDUCIN OCHOA  
**Duración:** 01/09/2023-31/08/2027  
**Financiación:** 181.250€

## **8. COMUNICACIONES Y PONENCIAS PRESENTADAS A CONGRESOS**

**Tipo de Participación:** Poster.

**Congreso:** 3S'92. Symposium on Surface Science.

**Lugar:** La Plagne, Savoie/Francia

**Fecha:** 15-21 Marzo 1992

**Autores:** J. I. Juaristi, M. Peñalba y A. Arnau

**Título:** "Charge state effects in the energy distributions of electrons excited by slow ions"

**Tipo de Participación:** Oral.

**Congreso:** I. International Conference on Computer Simulations of Radiation Effects in Solids. COSIRES 1992.

**Lugar:** Berlín, Alemania.

**Fecha:** 23-28 Agosto de 1992.

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** "Charge transfer rates for excited states of protons at surfaces"

**Tipo de Participación:** Oral (charla impartida por A. Arnau)

**Congreso:** 3S'93. Symposium on Surface Science

**Lugar:** Kaprun, Austria.

**Fecha:** 9-15 Mayo 1993.

**Autores:** A. Arnau, P. A. Zeijlmans van Emmichoven, J. I. Juaristi y E. Zaremba

**Título:** "Nonlinear screening effects in the interactions of slow ions with metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 3S'93. Symposium on Surface Science

**Lugar:** Kaprun, Austria.

**Fecha:** 9-15 Mayo 1993.

**Autores:** J. I. Juaristi.

**Título:** "Neutralization to excited states of protons in grazing incidence scattered by an aluminum surface".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 15th. International Conference on Atomic Collisions in Solids, ICACS-15

**Lugar:** London, Ontario, Canada.

**Fecha:** 26-30 de Julio, 1993.

**Autores:** J.I. Juaristi y F. J. García de Abajo

**Título:** "Energy loss in grazing proton-surface collisions".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 7.th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, HCI-94

**Lugar:** Viena, Austria.

**Fecha:** 19-23 de Septiembre, 1994.

**Autores:** M. Alducin y J. I. Juaristi

**Título:** "Auger deexcitation rates in grazing atom-surface collisions".

**Tipo de Participación:** Poster.

**Congreso:** 16th. International Conference on Atomic Collisions in Solids, ICACS-16.

**Lugar:** Linz, Austria.

**Fecha:** 17-21 de Julio, 1995.

**Autores:** J. I. Juaristi y A. Arnau

**Título:** "Interaction of Highly Charged ions with surfaces".

**Tipo de Participación:** Poster.

**Congreso:** International Workshop on Ion-solid Interaction.

**Lugar:** Les Houches, Francia.

**Fecha:** 11-16 de Marzo 1996.

**Autores:** A. Arnau, J. I. Juaristi y P. M. Echenique.

**Título:** "Z<sub>1</sub> oscillations in electron emission".

**Tipo de Participación:** Poster.

**Congreso:** European Physical Society.

**Lugar:** Sevilla, España.

**Fecha:** Septiembre de 1996.

**Autores:** H. Eder, M. Vana, F. Aumayr, H. P. Winter, A. Arnau, J. I. Juaristi y P. M. Echenique.

**Título:** "On projectile charge state dependence of ion induced electron emission from clean gold".

**Tipo de Participación:** Poster.

**Congreso:** 17th. International Conference on Atomic Collisions in Solids, ICACS-17.

**Lugar:** Beijing, China..

**Fecha:** Junio, 1997.

**Autores:** J. I. Juaristi, M. Rösler, F. J. García de Abajo, H. Kerkow y R. Stöle.

**Título:** "Nonlinear effects in the kinetic electron emission induced by slow ions in metals"

**Tipo de Participación:** Poster.

**Congreso:** Particle Solid Interactions, Strong Perturbations.

**Lugar:** San Sebastián, España.

**Fecha:** Septiembre 1997.

**Autores:** J. I. Juaristi, M. Rösler, F. J. García de Abajo, H. Kerkow y R. Stöle.

**Título:** "Nonlinear effects in the kinetic electron emission induced by slow ions in metals"

**Tipo de Participación:** Oral.

**Congreso:** 18th. Werner Brandt Workshop on the Penetration of Charged Particles in Matter.

**Lugar:** Gainesville, Florida, EE. UU.

**Fecha:** Junio 1998.

**Autores:** J.I. Juaristi, A. Arnau, P. M. Echenique, C. Auth y H. Winter.

**Título:** "Charge state dependence of the energy loss of slow ions reflected from metal surfaces".



**Tipo de Participación:** Charla Invitada (Impartida por M. Alducin)

**Congreso:** 22<sup>nd</sup>. Werner Brandt Workshop, Particle and wave penetration in condensed matter.

**Lugar:** Namur Bélgica.

**Fecha:** Junio 2002.

**Autores:** M. Alducin, J. I. Juaristi, and I. Nagy.

**Título:** "Relaxation rate of excited electrons in an electron gas: A comparative study of different approximations".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 22<sup>nd</sup>. Werner Brandt Workshop, Particle and wave penetration in condensed matter.

**Lugar:** Namur Bélgica.

**Fecha:** Junio 2002.

**Autores:** M. Alducin, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi

**Título:** "Time-dependent image potential at a metal surface".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 22<sup>nd</sup>. Werner Brandt Workshop, Particle and wave penetration in condensed matter.

**Lugar:** Namur Bélgica.

**Fecha:** Junio 2002.

**Autores:** R. Díez Muiño, M. Alducin, and J. I. Juaristi

**Título:** "Spin-polarization effects in the interaction of light ions with a free electron gas".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 14th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-14.

**Lugar:** Ameland, Holanda.

**Fecha:** Septiembre 2002.

**Autores:** M. Alducin, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi

**Título:** "Ion induced electronic excitations in a spin-polarized electron gas".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 14th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-14.

**Lugar:** Ameland, Holanda.

**Fecha:** Septiembre 2002.

**Autores:** S. Cernusca, HP. Winter, F. Aumayr, R. Díez Muiño, and J. I. Juaristi

**Título:** "Molecular projectile effects for kinetic electron emission from carbon and metal surfaces bombarded by slow hydrogen ions".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 9<sup>th</sup>. International Conference on ELECTRONIC SPECTROSCOPY and STRUCTURE. ICESS-9

**Lugar:** Uppsala, Suecia

**Fecha:** 30 Junio-4 Julio 2003.

**Autores:** M. Alducin, R. Díez Muiño, J. I. Juaristi, and A. Arnau

**Título:** "Spin-polarized electron excitation during the neutralization of He<sup>+</sup> ions in metals".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 3S'04. Symposium on Surface Science

**Lugar:** St. Christoph am Alberg, Austria.

**Fecha:** 29 Febrero-6 Marzo 2004.

**Autores:** M. Alducin, V. M. Silkin, y J. I. Juaristi.

**Título:** "Stopping power of ions interacting with different surfaces of aluminum"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 3S'04. Symposium on Surface Science

**Lugar:** St. Christoph am Alberg, Austria.

**Fecha:** 29 Febrero-6 Marzo 2004.

**Autores:** M. Alducin, J. I. Juaristi y R. Díez Muiño.

**Título:** "Influence of the spin during the neutralization of He<sup>+</sup> ions at surfaces"

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** 21st International Conference on the Atomic Collisions in Solids

**Lugar:** Genova (Italia)

**Fecha:** 4-9 Julio 2004.

**Autores:** J. I. Juaristi.

**Título:** "Energy loss of ions interacting with metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 21st International Conference on the Atomic Collisions in Solids

**Lugar:** Genova (Italia)

**Fecha:** 4-9 Julio 2004.

**Autores:** M. Alducin, R. Díez Muiño y J. I. Juaristi.

**Título:** "Spin dependent effects in the screening and Auger neutralization of He<sup>+</sup> in a spin-polarized electron gas"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 15th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-15.

**Lugar:** Ise-Shima, Japon

**Fecha:** Octubre 2004.

**Autores:** R. Vincent y J. I. Juaristi.

**Título:** "Charge state dependent kinetic electron emission induced by slow N<sup>q+</sup> ions in a spin-polarized electron gas"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 15th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-15.

**Lugar:** Ise-Shima, Japon

**Fecha:** Octubre 2004.

**Autores:** J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Díez Muiño, and M. Rösler.

**Título:** "Electron emission in the Auger neutralization of a spin polarized He<sup>+</sup> ion embedded in a free electron gas".

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 22nd International Conference on the Atomic Collisions in Solids

**Lugar:** Berlin (Alemania)

**Fecha:** 21-26 Julio 2006.

**Autores:** J. I. Juaristi y M. Alducin.

**Título:** "Spin dependent screening and Auger neutralization of singly-charged noble gas ions in metals"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 22nd International Conference on the Atomic Collisions in Solids

**Lugar:** Berlin (Alemania)

**Fecha:** 21-26 Julio 2006.

**Autores:** M. Alducin, V. M. Silkin, J. I. Juaristi

**Título:** "Two dimensional behaviour of friction at a metal surface with a surface state"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 16th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-16.

**Lugar:** Hernstein, Austria

**Fecha:** 17-22 Septiembre 2006.

**Autores:** R. Vincent, J. I. Juaristi, I. Nagy.

**Título:** "Z<sub>1</sub> oscillations in the spin polarization of electrons excited by slow ions in a spin-polarized electron gas"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 23th International Conference on ATOMIC COLLISIONS IN SOLIDS ICACS-23.

**Lugar:** Phalaborwa, South Africa

**Fecha:** 17-22 Agosto 2008.

**Autores:** M. S. Gravielle, M. Alducin, J. I. Juaristi, and V. M. Silkin.

**Título:** "Different contributions to the energy loss of protons scattered from a Cu(111) surface"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 23th International Conference on ATOMIC COLLISIONS IN SOLIDS ICACS-23.

**Lugar:** Phalaborwa, South Africa

**Fecha:** 17-22 Agosto 2008.

**Autores:** J. I. Juaristi, M. Alducin, H.F. Busnengo, A. Salin, R. Díez Muiño.

**Título:** " Role of electron-hole excitations in the interaction of thermal diatomic molecules with metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 17th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-17.

**Lugar:** Porquerolles, Francia

**Fecha:** 21-26 Septiembre 2008.

**Autores:** J. I. Juaristi, M. Alducin, H.F. Busnengo, A. Salin, R. Díez Muiño.

**Título:** "Role of electron-hole excitations in the dissociative adsorption of diatomic molecules on metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 18th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-18.

**Lugar:** Gatlinburg, EE.UU.

**Fecha:** 26 de Septiembre-1 de Octubre 2010.

**Autores:** K. R. Geethalaksmi, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin

**Título:** "Scattering of low energy N<sub>2</sub> molecules from the W(110) surface using different exchange correlation functionals"

**Tipo de Participación:** Charla Invitada (Impartida por M. Alducin)

**Congreso:** Elementary Reactive Processes at Surfaces (3<sup>rd</sup> Edition)-ERPS2010

**Lugar:** Burdeos, Francia.

**Fecha:** 30 de Noviembre-3 de Diciembre 2010.

**Autores:** K. R. Geethalaksmi, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin

**Título:** "Energy dissipation in the scattering of N<sub>2</sub> from W(110)"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** Elementary Reactive Processes at Surfaces (3<sup>rd</sup> Edition)-ERPS2010

**Lugar:** Burdeos, Francia.

**Fecha:** 30 de Noviembre-3 de Diciembre 2010.

**Autores:** I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Díez Muiño

**Título:** "Adsorption dynamics of N<sub>2</sub> molecules on Fe(110) and on Fe/W(110)"

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** 75<sup>th</sup> Annual Meeting of the DPG and combined DPG Spring Meeting 2011 of the Condensed Matter Section (SKM) and the Atomic, Molecular, Plasma Physics and Quantum Optics Section (SAMOP)

**Lugar:** Dresden, Alemania.

**Fecha:** 13-18 de Marzo 2011.

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** "Energy dissipation in the scattering of N<sub>2</sub> from W(110)"

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** Surface Dynamics: Beyond the Born-Oppenheimer Static Surface Approximation (CECAM Workshop)

**Lugar:** Zaragoza, Spain

**Fecha:** 24-26 de Octubre 2012

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** "Role of energy loss channels in the reactive and non-reactive dynamics of molecules and atoms on metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 19th International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions (IISC-19)

**Lugar:** Frauenthemsee - Germany

**Fecha:** 16-21 Septiembre 2012

**Autores:** O. Osmani, N. Medvedev, J. I. Juaristi, B. Rethfeld, M. Schleberger

**Título:** "Metal-like electrical conductivity in swift heavy ion irradiated SiO<sub>2</sub>"

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** 5<sup>th</sup> International Conference Energy Dissipation at Surfaces

**Lugar:** Bad Honnef

**Fecha:** 3-8 Junio 2013

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** "Electron-hole pair and phonon excitations in the reactive and non-reactive dynamics of molecules and atoms at metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Oral

**Congreso:** 20th International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions (IISC-20)

**Lugar:** Wirrina Cove, Australia

**Fecha:** 17-21 Febrero 2014

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** "Energy loss channels in gas surface dynamics"

**Tipo de Participación:** Oral

**Congreso:** 16<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces

**Lugar:** Madrid, España

**Fecha:** 29-31 Octubre 2014

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** "Energy dissipation during the adsorption of gas species on metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 16<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces

**Lugar:** Madrid, España

**Fecha:** 29-31 Octubre 2014

**Autores:** L. Martin-Gondre, J. I. Juaristi, M. Blanco-Rey, R. Díez Muiño, and M. Alducin

**Título:** "Role of van der Waals interaction on the dissociative adsorption of N<sub>2</sub> on W(110)"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 16<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces

**Lugar:** Madrid, España

**Fecha:** 29-31 Octubre 2014

**Autores:** I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin

**Título:** "Surface strain improves molecular adsorption but hampers dissociation for N<sub>2</sub> on the Fe/W(110)"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 16<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces

**Lugar:** Madrid, España

**Fecha:** 29-31 Octubre 2014

**Autores:** M. Blanco-Rey, E. Díaz, G. Bocan, R. Díez Muiño, M. Alducin, and J. I. Juaristi

**Título:** " N<sub>2</sub> formation by pick-up of N adsorbates off Ag(111): an efficient Eley-Rideal process"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 16<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces

**Lugar:** Madrid, España

**Fecha:** 29-31 Octubre 2014

**Autores:** I. Loncaric, M. Alducin, and J. I. Juaristi

**Título:** "Dissociative dynamics of O<sub>2</sub> on Ag(110)"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 16<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces

**Lugar:** Madrid, España

**Fecha:** 29-31 Octubre 2014

**Autores:** D. Novko, M. Blanco-Rey, M. Alducin, and J. I. Juaristi

**Título:** "Electronic Friction Models for Hot Atoms Dynamics Ab Initio Simulations Beyond the Frozen Surface Approximation"

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** 16<sup>th</sup> Workshop on Dynamical Phenomena at Surfaces

**Lugar:** Madrid, España

**Fecha:** 29-31 Octubre 2014

**Autores:** Oihana Galparsoro, Rémi Pétuya, Cédric Crespos, J. Inaki Juaristi, Maite Alducin, and Pascal Larregaray

**Título:** "Phonon and electron excitations in diatom abstraction via Eley-Rideal mechanism from metal surfaces"

**Tipo de Participación:** Oral (Impartida por Oihana Galparsoro)

**Congreso:** VAS15: The 15th International Conference on Vibrations at Surfaces (VAS15)

**Lugar:** San Sebastián, España

**Fecha:** 22-26 de Junio 2015

**Autores:** O. Galparsoro, I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, M. Alducin

**Título:** “Role of vibrational energy to enhance the dissociative adsorption of N<sub>2</sub> on metal surfaces”

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** VAS15: The 15th International Conference on Vibrations at Surfaces (VAS15)

**Lugar:** San Sebastián, España

**Fecha:** 22-26 de Junio 2015

**Autores:** D. Novko, M. Blanco-Rey, J.I. Juaristi, M. Alducin

**Título:** “Exploring the electron induced phonon linewidths of N<sub>2</sub> on the Fe(110) surface: AIMDEF vs. DFPT”

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** VAS15: The 15th International Conference on Vibrations at Surfaces (VAS15)

**Lugar:** San Sebastián, España

**Fecha:** 22-26 de Junio 2015

**Autores:** Ivor Loncaric, Maite Alducin, Peter Saalfrank, J. Inaki Juaristi

**Título:** “Femtosecond laser driven molecular dynamics on surfaces: O<sub>2</sub> on Ag(110)”

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** VAS15: The 15th International Conference on Vibrations at Surfaces (VAS15)

**Lugar:** San Sebastián, España

**Fecha:** 22-26 de Junio 2015

**Autores:** I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, and M. Alducin

**Título:** “Surface Strain improves molecular adsorption but hampers dissociation for N<sub>2</sub> on the Fe/W(110) surface”

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** VAS15: The 15th International Conference on Vibrations at Surfaces (VAS15)

**Lugar:** San Sebastián, España

**Fecha:** 22-26 de Junio 2015

**Autores:** L. Martin-Gondre, J. I. Juaristi, M. Blanco-Rey, R. Díez Muiño, and M. Alducin

**Título:** “Role of the van der Waals interaction on the dissociative adsorption of N<sub>2</sub> on W(110)”

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** Gordon Research Conference: Reaction Dynamics, Scattering Dynamics, and Molecular and Structural Dynamics at Surfaces and Interfaces

**Lugar:** Salve Regina University, Newport, RI (Estados Unidos)

**Fecha:** 9-14 de Agosto de 2015

**Autores:** D. Novko, M. Blanco-Rey, J.I. Juaristi, M. Alducin

**Título:** “Efficient electronic friction models to incorporate electron-hole pair and phonon excitations in ab initio gas-surface dynamics”

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** Gordon Research Conference: Reaction Dynamics, Scattering Dynamics, and Molecular and Structural Dynamics at Surfaces and Interfaces

**Lugar:** Salve Regina University, Newport, RI (Estados Unidos)

**Fecha:** 9-14 de Agosto de 2015

**Autores:** Ivor Loncaric, Maite Alducin, J. Inaki Juaristi

**Título:** “Dynamics of oxygen molecule on Ag(110)”

**Tipo de Participación:** Poster

**Congreso:** Gordon Research Conference: Reaction Dynamics, Scattering Dynamics, and Molecular and Structural Dynamics at Surfaces and Interfaces

**Lugar:** Salve Regina University, Newport, RI (Estados Unidos)

**Fecha:** 9-14 de Agosto de 2015

**Autores:** O. Galparsoro, R. Pétuya, C. Crespos, J. I. Juaristi, M. Alducin, P. Larregaray

**Título:** “Phonon and electron excitations in diatom abstraction via Eley-Rideal mechanism from metal surfaces”

**Tipo de Participación:** Oral (Impartida por Ivor Loncaric)

**Congreso:** 21st International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions (IISC-21)

**Lugar:** San Sebastián (España)

**Fecha:** 18-23 de Octubre (2015)

**Autores:** I. Loncaric, M. Alducin, P. Saalfrank, and J. I. Juaristi

**Título:** “Femtosecond laser pulse induced desorption: a molecular dynamics simulation”

**Tipo de Participación:** Oral (Impartida Dino Novko)

**Congreso:** 21st International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions (IISC-21)

**Lugar:** San Sebastián (España)

**Fecha:** 18-23 de Octubre (2015)

**Autores:** D. Novko, M. Blanco-Rey, J. I. Juaristi, and M. Alducin

**Título:** “Energy Loss in Gas-Surface Dynamics: Electron-hole pair and phonon excitations upon adsorbate relaxation”

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** CECAM Workshop: Challenges in reaction dynamics of gas-surface interactions and methodological advances in dissipative and non-adiabatic processes

**Lugar:** Albi (Francia)

**Fecha:** 26-29 de Junio (2017)

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** “Abinitio molecular dynamics with electronic friction (AIMDEF): Application to the relaxation of hot atoms and molecules at metal surfaces”

**Tipo de Participación:** Charla Plenaria Invitada

**Congreso:** 22nd International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions (IISC-22)

**Lugar:** Dresden (Alemania)  
(2017)

**Fecha:** 17-22 de Septiembre

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** “Understanding reactive and non-reactive gas-surface dynamics from first principles simulations”

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** 18th Special Workshop on Ion Beam Analysis

**Lugar:** Tsukuba (Japón)

**Fecha:** 15-16 de Diciembre (2017)

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** “First Principles Simulations of Reactive and Non-Reactive Gas/Surface Dynamics”

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** 14th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids, DSL2018

**Lugar:** Amsterdam (Holanda)

**Fecha:** 25-29 de Junio (2018)

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** “Molecular Dynamics Simulations of Elementary Reactions of Hydrogen at Surfaces”

**Tipo de Participación:** Oral

**Congreso:** 23th International Workshop on INELASTIC ION-SURFACE COLLISIONS IISC-23.

**Lugar:** Matsue, Japon

**Fecha:** 17-22 de Noviembre (2019)

**Autores:** J. I. Juaristi.

**Título:** "Abinitio Molecular Dynamics Simulations of the Alignment resolved O<sub>2</sub> Scattering from Highly Oriented Pyrolytic Graphite”

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** Ultrafast phenomena and light-matter interaction in quantum materials

**Lugar:** Zadar (Croacia)

**Fecha:** 2-6 de Septiembre (2024)

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** “Insights into the Photo-induced CO Desorption and CO Oxidation on Ru(0001)”

**Tipo de Participación:** Charla Invitada

**Congreso:** Minisymposium on Theoretical Surface Science

**Lugar:** Postdam (Alemania)

**Fecha:** 18 Octubre (2024)

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** “Insights into the Photo-induced CO Desorption and CO Oxidation on Ru(0001)”

**Tipo de Participación:** Charla Plenaria

**Congreso:** X Encuentro de Física y Química de Superficies

**Lugar:** Bariloche (Argentina)

**Fecha:** 5-9 Noviembre (2024)

**Autores:** J. I. Juaristi

**Título:** “Understanding Ultrafast Photoinduced Reactions at Metal Surfaces”

## **9. TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS**

**Título:** Electronic Excitations, Energy Loss and Electron Emission in the Interaction of Charged Particles with Metallic Materials and Plasmon Modes Localized at Surface Singularities (Tesis Europea, y Premio Extraordinario de Doctorado)

**Doctorando:** Remi Pascal Vincent

**Universidad:** UPV/EHU.

**Fecha de Lectura:** 11 de Diciembre de 2009

**Calificación:** Sobresaliente cum Laude

**Título:** Reactivity and dynamics of N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> molecules on different metal surfaces (Tesis Internacional, codirigida junto a la Dr. Maite Alducin Ochoa)

**Doctorando:** Itziar Goikoetxea Martínez

**Universidad:** UPV/EHU.

**Fecha de Lectura:** 21 de Febrero de 2013

**Calificación:** Apto cum Laude

**Título:** Dynamic of Diatomic Molecules on Metal Surfaces: O<sub>2</sub>/Ag(110) and CO/Ru(0001) (Tesis Internacional y Premio Extraordinario de Doctorado)

**Doctorando:** Ivor Loncaric

**Universidad:** UPV/EHU.

**Fecha de Lectura:** 25 de Enero de 2017

**Calificación:** Sobresaliente cum Laude

**Título:** Contribution to the theoretical description of N<sub>2</sub> dynamics on W(100)

(Tesis Internacional y en Cotutela con la Universidad de Burdeos, codirigida junto al Dr. Cedric Crespos )

**Doctorando:** Alejandro Peña Torres

**Universidad:** UPV/EHU y Universidad de Burdeos

**Fecha de Lectura:** 10 de Diciembre de 2018

**Calificación:** Sobresaliente cum Laude

**Título:** Dynamics of the photo-induced desorption and oxidation of CO on Ru(0001) with different (O,CO) coverages

(Tesis codirigida junto a la Dr. Maite Alducin Ochoa )

**Doctorando:** Auguste Tetenoire

**Universidad:** UPV/EHU

**Fecha de Lectura:** 23 de Marzo de 2023

**Calificación:** Sobresaliente cum Laude

**Título:** Theoretical description of femtosecond laser-induced desorption dynamics using ab initio and machine learning methods. Pure CO and mixed CO+O adlayers on Pd(111)

(Tesis codirigida junto a la Dr. Maite Alducin Ochoa )

**Doctorando:** Alfredo Serrano Jiménez

**Universidad:** UPV/EHU

**Fecha de Lectura:** 28 de Marzo de 2025

**Calificación:** Sobresaliente cum Laude

**Título:** Alleviating the computational burden of ab initio methods with deep learning: from photoinduced surface chemistry to long-lasting molecular dynamics

(Tesis codirigida junto a la Dr. Maite Alducin Ochoa )

**Doctorando:** Ivan Zugec

**Universidad:** UPV/EHU

**Fecha de Lectura:** 6 de Marzo de 2026

**Calificación:** Sobresaliente cum Laude

## **10. TESIS DE MASTER DIRIGIDAS**

**Título:** Reactivity and Dynamics of N<sub>2</sub> molecules on metal surfaces

**Doctorando:** Itziar Goikoetxea

**Universidad:** UPV/EHU.

**Master:** Master in Nanosciece

**Fecha de Lectura:** 22 de Julio de 2009

**Calificación:** 9

## **11. BECAS, AYUDAS Y PREMIOS RECIBIDOS**

**Tipo:** Beca Predoctoral de Formación de Personal Investigador

**Entidad Financiadora:** Departamento de Educación, Universidades e Investigación del Gobierno Vasco.

**Centro de destino:** Departamento de Física de Materiales de la Facultad de Químicas de San Sebastián, U. P. V. /E. H. U.

**Duración:** 1/10/1991 al 10/12/1992.

## **12. OTROS MÉRITOS DE INVESTIGACIÓN**

### **12. 1 Miembro de Comités Científicos.**

- Miembro del Comité Científico de la conferencia “International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions” IISC, desde Septiembre de 2006.

8 ediciones:

- IISC-17, Porquerolles (Francia), Septiembre 2008.
- IISC-18, Gatlinburg (USA), Septiembre 2010.
- IISC-19, Frauenchiemsee (Alemania) Septiembre 2012.
- IISC-20, Wurrina Cove (Australia) Febrero 2014.
- IISC-21, Donostia-San Sebastián (España) Octubre 2015.
- IISC-22, Dresden (Alemania) Septiembre 2017.
- IISC-23, Matsue (Japón) Noviembre 2019.
- IISC-24, Charleston (USA) Septiembre 2023.
- IISC-25, Frankenfels (Austria) Septiembre 2025.

### **12. 2 Estancias en otros centros.**

**Centro:** QUANTUM THEORY PROJECT, UNIVERSITY OF FLORIDA  
(Grupo del Prof. John. R. Sabin)

**Localidad:** Gainesville (Florida)

**País:** EE. UU.

**Año:** 1993.

**Duración:** 1 mes.

**Centro:** KERNFYSISCH VERSNELLEER INSTITUUT

(Grupo del Prof. R. Morgenstern)

**Localidad:** Gröningen.

**País:** Holanda.

**Año:** 1994.

**Duración:** 15 días.

**Centro:** DEBYE INSTITUTE, UTRECHT UNIVERSITY

(Grupo del Prof. A. Niehaus)

**Localidad:** Utrecht.

**País:** Holanda.

**Año:** 1996.

**Duración:** 15 días.

**Centro:** HUMBOLDT UNIVERSITY

(Grupo del Prof. H. Winter)

**Localidad:** Berlín

**País:** Alemania.

**Años:** 1999 y 2000

**Duración:** 1 semana cada año.

**Centro:** INSTITUT FÜR EXPERIMENTALPHYSIK, JOHANNES KEPLER  
UNIVERSITÄT.

(Colaboración con el Dr. P. Bauer)

**Localidad:** Linz

**País:** Austria

**Año:** 1999.

**Duración:** 1 semana.

**Centro:** FRITZ HABER INSTITUT

(Colaboración con el Dr. K. Reuter)

**Localidad:** Berlin

**País:** Alemania

**Año:** 2010.

**Duración:** 1 semana.

### 12. 3. Charlas impartidas en centros de Investigación

**Título:** " Kinetic electron emission induced by slow ions in metals".

**Lugar:** HAHN MEITNER INSTITUTE, BERLÍN.

**Fecha:** 7 de Julio de 1998

**Título:** "Charge state dependence of the energy loss of slow ions reflected from metal surfaces".

**Lugar:** HUMBOLDT UNIVERSITY, BERLÍN.

**Fecha:** 8 de Julio de 1998

**Título:** " Modeling the adsorption dynamics of diatomic molecules at metal surfaces".  
**Lugar:** FRITZ HABER INSTITUT, BERLÍN. **Fecha:** 17 de Junio de 2010

#### **12.4 Organización de Congresos**

##### **“Chairman” de Congresos:**

**Congreso:** “21<sup>st</sup> International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions”  
**Lugar:** San Sebastián, España. **Fecha:** 18-23 Octubre de 2015

##### **Miembro del Comité Organizador**

**Congreso:** “Dynamical Processes in Irradiated Materials”  
**Lugar:** San Sebastián, España. **Fecha:** 26-28 de Julio de 2010.

**Congreso:** “PCAM Summer School 2011: Electronic and Optical Properties of Nanoscale Materials”  
**Lugar:** San Sebastián, España. **Fecha:** 4-7 de Julio de 2011.

##### **Miembro del Comité Local.**

**Congreso:** Euroconferencia "Particle-Solid Interaction: Electronic Excitations in Bulk and Surfaces"  
**Lugar:** San Sebastián, España. **Fecha:** 1-6 de Octubre 1994.

### **13. OTROS MÉRITOS**

- Divisional Associate Editor en la División de Chemical Physics de la revista Physical Review Letters desde Junio de 2023.
- Miembro del Comité Asesor de la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora para la evaluación de solicitudes de Sexenios de investigación, convocatorias 2024 y 2025.
- Experto Asesor de la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora para la evaluación de solicitudes de Sexenios de investigación, convocatoria 2023.
- Secretario del Departamento de Física de Materiales, UPV/EHU desde el 16 de Abril de 1999 hasta el 31 de Agosto de 2020 (fecha de extinción del Departamento)
- Vicedirector del Centro de Materiales (CSIC-UPV/EHU), desde el 5 de Septiembre de 2011 hasta el 15 de Octubre de 2015.
- Vicedirector del Centro de Materiales (CSIC-UPV/EHU), desde el 30 de Septiembre de 2020 hasta el 23 de mayo de 2024.
- Secretario de la Comisión Académica del Master in Nanoscience de la UPV/EHU desde 2007 hasta 2024.
- Secretario de la Comisión Académica del Programa de Doctorado Physics of Nanostructures and Advanced Materials desde 2009 hasta 2023.
- Presidente de la Comisión Académica del Programa de Doctorado Physics of Nanostructures and Advanced Materials desde el 15 de marzo de 2026.
- Presidente del Organo Provisional de Gobierno del Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, UPV/EHU, desde el 1 de Septiembre de 2020 al 24 de Noviembre de 2020

- Secretario del Departamento de Polímeros y Materiales Avanzados: Física, Química y Tecnología, UPV/EHU, desde el 25 de Noviembre de 2020.