

## 大连化物所因公出访事后公示表

出访人团组成员基本信息：		
姓名	部门	职务
庄巍	1107 组	研究员
实际执行情况： 2015 年 1 月 25 日 启程至厦门 2015 年 1 月 26 日 厦门到达台湾 2015 年 1 月 27-28 日 参加会议 2015 年 1 月 29 日 台湾返程		
经费开支情况：往返机票及开支共 10000 元。		
出访总结： 本人于 2015 年 1 月 25-29 日参加台湾国立中正大学举办的“第六届海峡两岸理论与计算化学会议”，并做题为“Exploring the ionic solution dynamics using the combination of simulation and vibrational spectroscopy”的报告。离子水合现象如何影响溶液中的微观动力学性质，长久以来吸引了广泛的研究兴趣。在研究者采用的诸多实验手段中，低频振动光谱，诸如光学科尔效应光谱、介电弛豫光谱、二维红外光谱及二维拉曼太赫兹等光谱实验方法起着至关重要的作用。对于离子水溶液而言，特征弛豫时间较长、与体系内部整体运动相关的微观动力学行为通常反映在其光谱信号的吉赫兹-太赫兹频段，通过分析低频振动光谱，能够获得这些动力学行为的重要信息，包括转动扩散、分子间振动，离子对转动，受限转动及平动等。然而，由于低频动力学光谱线形较宽，使得对这些光谱现象背后的分子机制进行解读存在困难，因此，利用理论方法分析低频光谱信号中包含的动力学信息不可或缺，是本研究组目前的主要研究方向之一。本次理论化学研讨会汇集了国内外相关领域的数位专家，如台湾中央研究院原子与分子科学研究所林圣贤院士，在分子光谱与量化计算方面皆有很深的造诣。本人在与会期间与林圣贤院士等人就目前研究工作中取得的成果与难点问题等进行了细致深入的讨论和交流，对研究组课题的进一步开展提供了重要的帮助。		