



POLISH NATIONAL AGENCY
FOR ACADEMIC EXCHANGE



STER
PROGRAMME

nazwa jednostki: GRUPA BADAWCZA FIZYKOCHEMII ROZTWORÓW Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej Politechniki Łódzkiej		symbol: I-34 http://www.mitr.p.lodz.pl
kierownik: Prof. dr hab. inż. Dorota Światła-Wójcik	potencjalni promotorzy: Prof. dr hab. inż. Dorota Światła- Wójcik	osoba do kontaktu: Prof. dr hab. inż. Dorota Światła-Wójcik tel: 42-631-31-09 dorota.swiatla-wojcik@p.lodz.pl
zakres działalności: Grupa prowadzi badania w oparciu o symulacje komputerowe układów molekularnych i pomiary techniką radiolizy impulsowej. Prowadzone prace obejmują zagadnienia związane z rozpraszaniem energii promieniowania jonizującego w roztworach wodnych, mechanistyczny opis wysokotemperaturowej radiolizy wody, badanie wpływu rozpuszczalnika na zachowanie krótko-żyjących rodników, analizę oddziaływań wodorowych, badanie solwatacji jonów w rozpuszczalnikach binarnych.		
działalność obecna i przyszła: <ul style="list-style-type: none">Zastosowania symulacji komputerowej metodą dynamiki molekularnej do charakterystyki oddziaływań wodorowych i badania efektów rozpuszczalnikowych w roztworach wodnych w szerokim zakresie ciśnienia i temperatury (warunki od pokojowych po superkrytyczne).Badania kinetyczne krótko-żyjących rodników w binarnych roztworach wodnych.Mechanistyczny opis wysokotemperaturowej radiolizy wody.Interdyscyplinarne badania podstawowe wspierające zastosowania energii jądrowej:<ul style="list-style-type: none">- symulacja radiolizy chłodziwa wodnych reaktorów jądrowych;- analiza procesów generacji wodoru;- opracowanie metod skutecznego kontrolowania środowiska utleniającego.		 
wybrane publikacje (2014-2022) D. Swiatla-Wojcik, A Numerical Simulation of Radiation Chemistry for Controlling the Oxidising Environment in Water-Cooled Nuclear Power Reactors, Appl. Sci. 12 (2022) 947. A. Lewandowska-Andralojc, G.L. Hug, B. Marciniak, G. Horner, D. Swiatla-Wojcik, Water-Triggered Photoinduced Electron Transfer in Acetonitrile-Water Binary Solvent. Microstructure-Tuned Reactivity of Hydrophobic Solutes. J. Phys. Chem. B 124 (2020) 5654.		



POLISH NATIONAL AGENCY
FOR ACADEMIC EXCHANGE



STER
PROGRAMME

D. Swiatla-Wojcik, J. Szala-Bilnik, High Temperature Aqueous Solvent Effect on Stretching Vibrations of the Hydroxyl Radical – MD Simulation Study of Spectral Shifts and Hydrogen Bond Statistics. J. Supercrit. Fluids 143 (2019) 126.

D. Swiatla-Wojcik, J. Szala-Bilnik, High Temperature Aqueous Solvent Effect on Translational and Hydrogen Bond Dynamics of the Hydroxyl Radical – MD Simulation Study. J. Supercrit. Fluids 145 (2019) 103.

L. Kazmierczak, M. Wolszczak, D. Swiatla-Wojcik, Ionic-Equilibrium-Based Mechanism of ·OH Conversion to Dichloride Radical Anion in Aqueous Acidic Solutions by Kinetic and Theoretical Studies. J. Phys. Chem. B 123 (2019) 528.

L. Kazmierczak, D. Swiatla-Wojcik, M. Wolszczak, Rate of Reaction of the Hydrogen Atom with Nitrous Oxide RSC Advances. 7 (2017) 8800.

D. Swiatla-Wojcik, Water-Structure Based Mechanistic View on the Bimolecular Decay of the Hydrated Electron, Chem. Phys. Lett. 641 (2015) 51.

D. Swiatla-Wojcik, A. Mozumder, Assessment of Hydrogen Bonding Effect on Ionization of Water from Ambient to Supercritical Region - MD Simulation Approach Radiat. Phys. Chem. 97 (2014) 113.

słowa kluczowe:

solwatacja, wiązania wodorowe, rozpuszczalniki binarne, wysokotemperaturowa radioliza wody, symulacja molekularna, symulacja kinetyczna, kientyka reakcji, woda superkrytyczna

lista propozycji staży w danej grupie badawczej:

Symulacja kinetyczna złożonych układów chemicznych. Staż obejmuje wykonanie symulacji numerycznej oraz przeprowadzenie analizy kinetycznej złożonych układów reakcyjnych.