



Curriculum Vitae Prof. Dr. Laura Gagliardi



Foto: University of Chicago

Name: Laura Gagliardi

Geboren: 6. April 1968

Forschungsschwerpunkte: Entwicklung quantenchemischer Methoden, Katalyse, Spektroskopie, Photochemie, Quantenmaterialien

Laura Gagliardi ist eine italienisch-amerikanische Chemikerin. Sie entwickelt neuartige quantenchemische Methoden und untersucht damit Fragestellungen im Zusammenhang mit erneuerbaren Energien. Mit den von ihr entwickelten Methoden erforscht sie auch molekulare Systeme und Materialien, die für Katalyse, Kohlendioxidtrennung, photochemische Prozesse, Spektroskopie und Schwerelementchemie relevant sind.

Akademischer und beruflicher Werdegang

- seit 2020 Richard and Kathy Leventhal Professur, Department of Chemistry, University of Chicago, Chicago, USA
- seit 2020 Direktorin, Chicago Center for Theoretical Chemistry, University of Chicago, Chicago, USA
- 2014 - 2020 Außerordentliche McKnight Professur, University of Minnesota, Minneapolis, USA
- 2012 - 2020 Direktorin, Chemical Theory Center, University of Minnesota, Minneapolis, USA
- 2009 - 2020 Professorin, University of Minnesota, Minneapolis, USA
- 2006 - 2008 Außerordentliche Professorin, Universität Genf, Genf, Schweiz
- 2000 - 2005 Assistenzprofessorin, University of Palermo, Palermo, Italien
- 1998 - 1999 Postdoktorandin, University of Cambridge, Cambridge, UK
- 1997 Ph.D. in Theoretischer Chemie, University of Bologna, Bologna, Italien

Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien

- seit 2022 Chefredakteurin, Journal „Chemical Theory and Computation“, USA
- 2021 Mit-Herausgeberin, Journal of the American Chemical Society (ACS), USA
- 2021 - 2026 Mitglied, Vorstand, Physical Division, ACS, USA
- seit 2020 Diversity Committee, Department of Chemistry, University of Chicago, Chicago, USA
- seit 2019 Mitglied, Chemical Science Roundtable, Engineering and Medicine, National Academy of Sciences, USA
- seit 2018 Außerordentliche Herausgeberin, Journal of Catalysis, USA
- 2017 - 2020 Mitglied, Vorstand, Division of Chemical Physics, American Physical Society, USA
- 2016 - 2020 Außerordentliche Herausgeberin, Journal of Chemical Theory and Computation, USA
- 2013 - 2016 Mitglied, Beirat, Physical Chemical Division, ACS, USA
- 2012 - 2013 Mitglied, Vorstand, Theoretical Chemistry Subdivision, ACS, USA
- Mitglied, Herausgeberbeirat: seit 2019 Physical Chemistry Chemical Physics, seit 2015 Chemical Reviews, seit 2014 ACS Central Science, 2014 - 2016 Inorganic Chemistry, 2013 - 2018 The Journal of the American Chemical Society, 2012 - 2016 Journal of Chemical Theory and Computation, 2011 - 2016 Journal of Physical Chemistry, seit 2009 Theoretical Chemistry Accounts

Projektkoordination, Mitgliedschaft in Verbundprojekten

- 2022 - 2026 Direktorin und Principal Investigator, Catalyst Design for Decarbonization Center (CD4DC), U.S. Department of Energy, USA
- 2022 - 2025 Principal Investigator, Diffusion of Water Confined in Patterned Hydrophilic-Hydrophobic Nanopores, National Science Foundation (NSF), USA sowie Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)
- 2022 - 2024 Principal Investigator, Exascale Multireference Wave Function Theory Method for Polymer Upcycling Catalysis, U.S. Department of Energy, USA
- 2020 - 2024 Principal Investigator, Multi-Configuration Pair-Density Functional Theory for Magnetic Systems, Air Force Office of Scientific Research (AFOSR), USA
- 2020 - 2024 Co-Principal Investigator, GE Additively Manufactured Integrated Reservoir to Extract Water Using Adsorbents and Thermally-Enhanced Recovery (AIR2WATER), Defense Advanced Research Projects Agency (DARPA) sowie General Electric (GE) Company, Boston, USA
- 2017 - 2022 Co-Principal Investigator, Actinide Center of Excellence National Nuclear Security Administration, U.S. Department of Energy, USA

- 2015 - 2024 Principal Investigator, Multi-Configuration Pair-Density Functional Theory (CHE-1464536), NSF, USA
- 2014 - 2022 Direktorin und Principal Investigator, Inorganometallic Catalyst Design Center, Energy Frontier Research Center (EFRC), University of Chicago, Chicago, USA – U.S. Department of Energy, USA
- 2012 - 2022 Principal Investigator, Nanoporous Materials Genome Center (NMGC), U.S. Department of Energy, USA
- 2012 - 2021 Direktorin, Principal Investigator und Co-Principal Investigator, Predictive Hierarchical Modeling of Chemical Separations and Transformations in Functional Nanoporous Materials: Synergy of Electronic Structure Theory, Molecular Simulations, Machine Learning, and Experiments, U.S. Department of Energy, Washington USA
- 2010 Grant, Schweizerischer Nationalfonds (SNF), Schweiz
- 2009 - 2022 Principal Investigator, Quantum Chemical Treatment of Strongly Correlated Magnetic Systems Based on Heavy Elements, U.S. Department of Energy, USA

Auszeichnungen und verliehene Mitgliedschaften

- 2023 Pauling Medal, American Chemical Society, USA
- seit 2022 Mitglied, Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina
- seit 2021 Mitglied, National Academy of Sciences, USA
- 2021 Faraday Lectureship Prize, Royal Society of Chemistry, UK
- seit 2020 Mitglied, American Academy of Arts and Sciences, USA
- 2020 Peter Debye Award in Physical Chemistry, The American Chemical Society, USA
- seit 2019 Mitglied, International Academy of Quantum Molecular Science
- 2019 - 2020 McKnight Presidential Stiftungsprofessur, University of Minnesota, Minneapolis, USA
- 2019 Award in Theoretical Chemistry, Physical Chemistry Division, American Chemical Society, USA
- seit 2018 Mitglied, Academia Europea
- 2018 Humboldt Forschungspreis, Alexander von Humboldt Stiftung, Bonn
- seit 2017 Mitglied, World Association of Theoretical and Computational Chemists
- 2016 Stipendiatin, American Physical Society (APS), USA
- 2016 Stipendiatin, Royal Society of Chemistry, UK
- 2016 Bourke Award, Royal Society of Chemistry, UK

- 2016 Isaiah Shavitt Lectureship Preis, Technion – Israel Institute of Technology, Haifa, Israel
- 2015 Gastprofessur, École Normale Supérieure de Chimie de Paris, Paris, Frankreich
- 2005 Gastwissenschaftlerin, Department of Chemistry, Lund University, Lund, Schweden
- 2003, 2005 Gastwissenschaftlerin, Department of Chemistry, University of Tokyo, Tokio, Japan

Forschungsschwerpunkte

Laura Gagliardi ist eine italienisch-amerikanische Chemikerin. Sie entwickelt neuartige quantenchemische Methoden und untersucht damit Fragestellungen im Zusammenhang mit erneuerbaren Energien. Mit den von ihr entwickelten Methoden erforscht sie auch molekulare Systeme und Materialien, die für Katalyse, Kohlendioxidtrennung, photochemische Prozesse, Spektroskopie und Schwerelementchemie relevant sind.

Mit ihrem Team kombiniert Laura Gagliardi Multireferenztheorien mit Dichtefunktionaltheorie. Sie nutzt klassische Simulationen sowie fortschrittliche Quanten- und Datenwissenschaft, um die nächste Generation chemischer Systeme und Materialien zu entdecken und zu verstehen. Diese Systeme finden praktische Anwendung im Bereich der Nachhaltigkeit, der Entsorgung von Atommüll, der Energie- und Wassergewinnung.

In einem Forschungsteam hat Laura Gagliardi zum Beispiel untersucht, wie sich Wassermoleküle aus der Luft in metallorganische Materialien (MOFs) verfassen und sich dadurch in Zukunft sauberes Trinkwasser gewinnen lassen kann. In bestimmten aluminiumbasierten MOFs verfassen sich Wassermoleküle in den Hohlräumen besonders gut. Selbst bei sehr geringer Luftfeuchtigkeit, wie sie in Wüsten üblich ist. Die Wärme der Sonne presst dann Wasser aus dem MOF.

Mithilfe von Röntgenkristallographie und quantenchemischen Berechnungen hat Laura Gagliardi in die Hohlräume der MOFs geblickt und den Mechanismus auf atomarer Ebene analysiert. Da sich Wassermoleküle je nach Außentemperatur und Luftfeuchtigkeit anders verhalten, können mithilfe der Erkenntnisse auch MOFs erstellt werden, die für bestimmte Umweltbedingungen optimiert sind. Laura Gagliardi arbeitet außerdem an Katalysatoren, die nachhaltiger sind, Photovoltaik, die effizienter ist, und Qubits, die zuverlässiger sind.