



队伍成员

>>学术委员会

>>固定人员

>>流动人员

固定人员

李永旺 研究员

1963年生。1984年毕业于内蒙古工学院化学工程系无机化工专业，获工学学士学位；1984-1986年在青海省电化厂工作，技术员；1986-1994年在中国科学院山西煤化所学习、工作，获有机化工专业工学硕士、物理化学专业理学博士学位。1995年赴比利时GENT大学石油研究所进行博士后研究；1996年转入比利时新鲁汶大学催化研究所继续博士后研究；1997年受聘于中国科学院山西煤化所，主持催化反应工程和计算机模拟的研究工作。1999年7月至2000年8月在德国Erlangen进行合作研究（洪堡基金会资助）。2000年回国后任煤转化国家重点实验室副主任、研究员、博士生导师。

主要从事工业化学及工程，计算机模拟等，包括催化反应动力学，催化反应器和过程模拟，催化剂表面的热化学和结构化学，ab-initio方法在催化机理研究中的应用，计算流体力学在反应器设计中的应用等方面的学术研究。从事的具有工业应用背景的项目是：浆态床费托合成工业化催化剂及其工艺技术的研究与开发、费托合成催化工程、过程技术和软件的研究与开发。目前主持国家科技部863项目“10-100万吨级合成油技术”和国家杰出青年基金项目“新型费托合成技术的催化基础和反应工程研究”。作为首席科学家主持煤间接液化合成油16-20万吨/年示范厂工艺软件包、基础设计和技术开发项目以及百万吨级合成油厂前期可行性研究与规划项目，担任中科合成油技术有限公司总经理、中科合成油工程技术有限公司董事长和中科合成油淮南催化剂有限公司董事长。

主要科技成果有：“煤基合成液体燃料关键技术与工业软件开发”项目，获2002年度山西省科技进步一等奖；“耦合法生产 γ -丁内酯和2-甲基呋喃技术”项目，获2004年中国石油化学工业协会技术发明一等奖和2005年国家技术发明二等奖（第二完成人）；领导的合成油攻关团队2005年度荣获中国科学院杰出科技成就奖（集体）；2006年完成的“基于煤制油的山西省煤炭资源和煤焦化特性的研究”项目，获得山西省优秀工程咨询成果一等奖；2007年获“山西省特级劳动模范”称号。发表学术论文180余篇，其中在*JACS*, *J. Phy. Chem. B*, *J. Catal.*, *Chem. Commun.*, *CES*, *IEC&R*, *Appl. Catal.*等国际刊物上发表论文70余篇，申请国家发明专利30余项，已授权专利20余项。

学术机构主要兼职：《燃料化学学报》副主编、《化工学报》、《工业催化》编委等。

近期主要论文：

1. M.Y. Ding, Y. Yang, J. Xu, Z.C. Tao, H.L. Wang, H. Wang, H.W. Xiang, Y.W. Li, Effect of reduction pressure on precipitated potassium promoted iron-manganese catalyst for Fischer-Tropsch synthesis, *Appl. Catal. A-Gen.*, 345, 176-184, 2008.
2. G.Y. Zhao, C.H. Zhang, S.D. Qin, H.W. Xiang, Y.W. Li, Effect of interaction between potassium and structural promoters on Fischer-Tropsch performance in iron-based catalysts, *J. Mol. Catal. A-Chem.*, 286: 137-142, 2008.
3. H.J. Wan, B.S. Wu, C.H. Zhang, H.W. Xiang, Y.W. Li, Promotional effects of Cu and K on precipitated iron-based catalysts for Fischer-Tropsch synthesis, *J. Mol. Catal. A-Chem.*, 283, 33-42, 2008.

4. Z.Y. Zeng, Y.Y. Xu, Y.W. Li, Calculation of solubility parameter using perturbed-chain SAFT and cubic-plus-association equations of state, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 47, 9663–9669, 2008.
5. X. An, B.S. Wu, W.J. Hou, H.J. Wan, Z.C. Tao, T.Z. Li, Z.X. Zhang, H.W. Xiang, Y.W. Li, B.F. Xu, F. Yi, The negative effect of residual sodium on iron-based catalyst for Fischer-Tropsch synthesis, *J. Mol. Catal. A*, 263(1–2), 266–272, 2007.
6. Z.C. Tao, Y. Yang, H.J. Wan, T.Z. Li, X. An, H.W. Xiang, Y.W. Li, Effect of manganese on a potassium-promoted iron-based Fischer-Tropsch synthesis catalyst, *Catal. Lett.*, 114 (3–4), 161–168, 2007.
7. C.H. Zhang, Y. Yang, B.T. Teng, T.Z. Li, H.Y. Zheng, H.W. Xiang, Y.W. Li, Study of an iron-manganese Fischer-Tropsch synthesis catalyst promoted with copper, *J. Catal.*, 237 (2), 405–415, 2006.
8. B.T. Teng, J. Chang, C.H. Zhang, D.B. Cao, J. Yang, Y. Liu, X.H. Guo, H.W. Xiang, Y.W. Li, A comprehensive kinetics model of Fischer-Tropsch synthesis over an industrial Fe-Mn catalyst, *Appl. Catal. A*, 301 (1), 39–50, 2006.
9. H.Y. Zheng, Y.L. Zhu, Z.Q. Bai, L. Huang, H.W. Xiang, Y.W. Li, An environmentally benign process for the efficient synthesis of cyclohexanone and 2-methylfuran, *Green Chem.*, 8 (1), 107–109, 2006.
10. S.G. Wang, D.B. Cao, Y.W. Li, J.G. Wang, H.J. Jiao, CO₂ reforming of CH₄ on Ni(111): A density functional theory calculation, *J. Phys. Chem. B*, 110 (20), 9976–9983, 2006.
11. X.D. Wen, Y.W. Li, J.G. Wang, H.J. Jiao, NO adsorption on MoS_x clusters: A density functional theory study, *J. Phys. Chem. B*, 110 (42), 21060–21068, 2006.
12. X.D. Wen, Z. Cao, Y.W. Li, J.G. Wang; H.J. Jiao, Structure and energy of Mo₂₇S_xC_y clusters: A density functional theory study, *J. Phys. Chem. B*, 110 (47), 23860–23869, 2006.
13. J. Ren, C.F. Huo, X.D. Wen, Z. Cao, J.G. Wang, Y.W. Li, H.J. Jiao, Thiophene adsorption and activation on MoP(001), γ -Mo₂N(100), and Ni₂P(001): Density functional theory studies, *J. Phys. Chem. B*, 110 (45), 22563–22569, 2006.
14. Y. Yang, H.W. Xiang, R.L. Zhang, B. Zhong, Y.W. Li, A highly active and stable Fe-Mn catalyst for slurry Fischer-Tropsch synthesis, *Catal. Today*, 106, 170–175, 2005.
15. C.F. Huo, Y.W. Li, M. Beller, H.J. Jiao, Hydroformylation and isomerization of allene and propyne: A density functional theory study, *Chem. Eur. J.*, 11, 889–902, 2005.
16. C.F. Huo, Y.W. Li, M. Beller, H.J. Jiao, Regioselective hydroformylation of butadiene: Density functional Studies, *Organometallics*, 24, 3634–3643, 2005.
17. D.B. Cao, F.Q. Zhang, Y.W. Li, J.G. Wang, H.J. Jiao, Density functional theory study of hydrogen adsorption on Fe₅C₂(001), Fe₅C₂(110), and Fe₅C₂(100), *J. Phys. Chem. B*, 109, 833–844, 2005.
18. T. Zeng, X.D. Wen, G.S. Wu, Y.W. Li, H.J. Jiao, Density functional theory study of CO adsorption on molybdenum sulfide, *J. Phys. Chem. B*, 109, 2846–2854, 2005.

19. D.B. Cao, F.Q. Zhang, Y.W. Li, J.G. Wang, H.J. Jiao, Structures and energies of coadsorbed CO and H₂ on Fe₅C₂(001), Fe₅C₂(110), and Fe₅C₂(100), *J. Phys. Chem. B*, 109, 10922–10935, 2005.

20. C.F. Huo, Y.W. Li, M. Beller, H.J. Jiao, Acetylene hydroformylation with HCo(CO)₃ as catalyst: A density functional study, *Organometallics*, 23 (4), 765–773, 2004.

联系方式:

电 话: 0351-7560831

传 真: 0351-7560668

电子邮箱: ywl@sxicc.ac.cn

[1] [2] [3] [4] [5] [6] **[7]** [8] [9] [10] [11] [12] [13] [14] [15] [16] [17] [18] [19] [20] [21] [22] [23] [24]