

En la present tesi doctoral s'ha realitzat un estudi sobre les espècies catalíticament actives en reaccions de formació d'enllaç carboni-carboni i carboni-heteroàtom catalitzades per or, pal·ladi i coure. En el cas de les reaccions catalitzades per or (sals d' Au^+ o Au^{3+} , complexos d' Au^+ o nanopartícules d' Au), s'ha comprovat que, independentment del catalitzador d'or de partida, les espècies catalíticament actives en algunes reaccions són clústers atòmics d'or d'entre 2 i 9 àtoms, i que, dins d'aquest rang, les reaccions són sensibles al nombre d'àtoms d'or que formen el clúster. Aquests clústers presenten una activitat catalítica inusualment elevada per a aquest tipus de reaccions, arribant a realitzar fins a 10 milions de cicles catalítics per hora a temperatura ambient. A més, s'ha estudiat l'estabilitat d'aquests clústers enfront d'anions i lligands en dissolució.

En el cas de les reaccions d'acoblament creuat catalitzades per pal·ladi baix condicions de Jeffery (sense lligands, amida com a dissolvent, 130-140 °C), s'ha observat la formació i activitat catalítica de clústers de Pd d'entre 3 i 4 àtoms per a les reaccions d'acoblament de Heck, Sonogashira, Stille i Suzuki. Aquests clústers s'estabilitzen en presència d'aigua o amines i presenten una alta activitat catalítica per a iodurs i bromurs d'aril.

També s'ha observat la formació de clústers de Cu en reaccions d'acoblament entre iodurs d'aril i diversos nucleófilos (amides, fenols, fosfines, tiols, alquins) en absència de lligands diamina. A més, s'ha pogut establir la naturalesa, mecanisme de formació i quantitat d'aquests clústers de Cu formats a partir d'una sal de partida.

Finalment, s'ha comparat l'activitat catalítica dels clústers d'or, pal·ladi i coure per a reaccions tipus on es necessita catàlisi Lewis, radicalaria o redox, podent relacionar la naturalesa fisicoquímica dels clústers amb la seua activitat catalítica.