

Durante la presente Tesis doctoral, se han diseñado y sintetizado catalizadores basados en nanopartículas y clústeres metálicos de diferentes tamaños, y se ha evaluado su reactividad en reacciones de hidrogenación selectiva y en la activación del oxígeno molecular. Además, mediante el empleo de diferentes técnicas espectroscópicas, se ha realizado un estudio a nivel fundamental con el fin de determinar y analizar las propiedades químicas de los centros activos del catalizador.

En el caso de las nanopartículas metálicas se ha estudiado el efecto promotor del Au en catalizadores de Pd soportados sobre CeO₂ en la hidrogenación selectiva de 1,5-ciclooctadieno, obteniéndose un catalizador altamente activo y selectivo al alqueno correspondiente. Además, se ha identificado como centros activos en la reacción centros aislados de Pd reducidos.

Este resultado ha dirigido el interés hacia la síntesis controlada de clústeres metálicos de 5, 7 y 20 átomos en promedio. La síntesis se ha llevado a cabo mediante un procedimiento electroquímico en ausencia de ligandos protectores. Mediante el empleo de técnicas espectroscópicas, se ha estudiado la estabilidad de los clústeres metálicos en presencia de oxígeno, la capacidad de activación del oxígeno molecular generando especies oxidadas y la posterior reducción del clúster. Se han identificado los clústeres de Cu₅ como los más estables a la oxidación.

Por último, se ha estudiado la actividad catalítica de los clústeres electroquímicos en la reacción de Goldberg. Comparando la actividad de los clústeres con otros tipos de catalizadores de cobre, se ha determinado la atomicidad de los centros activos en la reacción, estando comprendida entre 2 y 7 átomos.