

**Título:** <Difusión y adopción tardía de la ‘revolución instrumental’>

La instrumentación en la catálisis venezolana en el último tercio del siglo XX>

*Primer Autor:* <Vessuri, Hebe.>

*Dirección:* <.Dpto. Estudio de la Ciencia/ Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas/ 21827 Caracas 1020-A/ Venezuela/ [hvessuri@gmail.com](mailto:hvessuri@gmail.com)>.

*Segundo Autor:* <Isabelle Sánchez-Rose.>

*Dirección:* <.Dpto. Estudio de la Ciencia/ Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas/ 21827 Caracas 1020-A/ Venezuela/ [abulafia@cantv.net](mailto:abulafia@cantv.net)>.

*Tercer autor:* <Lenny Mar Rodríguez>

*Dirección:* <.Dpto. Estudio de la Ciencia/ Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas/ 21827 Caracas 1020-A/ Venezuela/ [lennymar@gmail.com](mailto:lennymar@gmail.com)>

*Resumen:* <Durante las dos décadas que siguieron a 1945, las ciencias y técnicas químicas experimentaron una transformación importante, llamada por algunos autores ‘segunda revolución química’ y por otros ‘revolución instrumental’ (Morris, P.J.T., 2002). El corazón de esta transformación fue la introducción de métodos y técnicas instrumentales de la física en la investigación química y los análisis rutinarios. En general, desde la década de 1960, si no antes, los químicos han obtenido sus resultados usando una variedad de instrumentos que permiten el análisis de las sustancias químicas en términos de sus propiedades físicas. Anteriormente, los químicos determinaban la estructura química de un compuesto desconocido principalmente a través de las reacciones conocidas: identificaban los productos por medios químicos y establecían datos cuantitativos a través de métodos gravimétricos y volumétricos.

En el presente trabajo se ilustra esta transformación en un contexto distinto del usual, en una comunidad científico-técnica de desarrollo tardío y periférico, la de los químicos catalíticos venezolanos, revisando el proceso de incorporación y adopción de nuevas tecnologías instrumentales, que es la vía por la que tradicionalmente avanzó la ciencia de la catálisis. Rastreamos la utilización de instrumentos que en distintos momentos hicieron individuos e instituciones académicas en Venezuela así como su industria petrolera, a través de su expresión en las publicaciones científicas.>

*Eje temático:* <Sociedad y producción de conocimiento>

*Código:* <2VEN007>

*País:* <Venezuela>

*Palabras clave:* <Catálisis, Química, Instrumentación, Revolución Instrumental, Venezuela>

*Proyecto(s) de investigación asociados(s)* <La Catálisis en Venezuela entre la Academia y la Industria. Proyecto financiado por el FONACIT, Venezuela. En curso. Microsociología de la Innovación y Aprendizaje Tecnológico: Una Experiencia Institucional en el Sector Petrolero Venezolano. Proyecto financiado por el IVIC y financiamiento complementario aprobado por INTEVEP. En curso>

*Texto completo*

## **Difusión y adopción tardía de la ‘revolución instrumental’.**

La instrumentación en la catálisis venezolana en el último tercio del siglo xx.<sup>1</sup>

Hebe Vessuri, Isabelle Sánchez-Rose y Lenny-Mar Rodríguez  
IVIC-Venezuela

El surgimiento y la dependencia de los instrumentos y las herramientas experimentales han recibido relativamente poca atención aunque atraviesan la historia y sociología de la ciencia, de la tecnología. La investigación social de la tecnología ha documentado abundantemente cómo cuando la tecnología se transfiere sin modificación de un contexto cultural a otro, ésta o bien funciona de manera diferente o bien deja de funcionar por completo. También se ha argumentado ampliamente que los nuevos hallazgos científicos requieren una ‘multiplicación de los sitios’ con los instrumentos requeridos y las prácticas experimentales para usarlos. Es decir, se supone que sin una adecuada replicación de las prácticas experimentales, no puede haber replicación de hallazgos. Enfoques recientes en la filosofía y sociología de la ciencia y la tecnología han señalado consistentemente el carácter situado, local e incrustado o contextualizado de toda producción de conocimiento. El caso de los instrumentos es interesante puesto que la instrumentación que se produce para usos trans-locales tanto en la ciencia como fuera de ella, la convertirían en un motor universalizante potente, engendrando una suerte de universalidad basada en las prácticas. Su adopción supone la incorporación de sus protocolos, ligados a su vez a metrologías. Se importan vocabularios explícitos, imágenes y sistemas de notación. La objetivización se construye a través de prácticas colectivas y acumulativas (Joergens & Shinn, 2001, p.246). De allí el interés de explorar cómo se consume el conocimiento lejos de su lugar de producción y cómo viaja, aunque en esta breve presentación apenas si comenzamos a desbrozar el terreno. Como venimos estudiando diferentes facetas del desarrollo y consolidación de la ciencia y tecnología de la Catálisis en Venezuela, aprovechamos la base de publicaciones recogidas para comenzar un estudio de la instrumentación disponible a los investigadores catalíticos venezolanos (Vessuri et al. 2005).

### **Herramientas e instrumentos de laboratorio**

Es frecuente distinguir entre herramientas e instrumentos de laboratorio. Se dice que una herramienta es menos costosa que el instrumento, está disponible todo el tiempo mientras que el instrumento requiere el llenado de una planilla de solicitud del servicio, indicando desde qué laboratorio se hace el pedido, quién lo solicita, y qué es lo que quiere. La forma de sus resultados también difiere: el uso de la herramienta es transparente en cuanto a su significado, a menudo proporciona al investigador datos sobre un pedazo de papel a ser incorporados al cuaderno del laboratorio sin más elaboración. Por el contrario, el producto de un instrumento muestra una necesidad mayor de interpretación. En estos casos, el papel de operador suele ser importante porque es quién mejor conoce el potencial de la técnica y por ende cuáles son las preguntas que se pueden hacer con más provecho, así como las interpretaciones que se pueden extraer de los resultados del experimento. Por último, las herramientas están ubicadas en el mismo laboratorio mientras que los instrumentos son guardados en salas especiales, o incluso en centros dedicados. Ejemplos comunes de herramientas son la

---

<sup>1</sup> Nurelys Navarro aportó a la construcción de la base y la muestra de publicaciones de investigadores venezolanos en el campo de la catálisis.

balanza, el termómetro, el secador de cabello, el evaporador rotatorio, el cromatógrafo y el aparato de destilación. Ejemplos de instrumentos son el espectrómetro de masas, el espectrómetro de resonancia magnética nuclear, el sincrotrón (Laszlo, P. 2002, p. 172).

La imagen convencional que se tiene de los laboratorios de química es de espacios donde se trabaja con frascos de reactivos y tubos de ensayo, aparatos de porcelana y de vidrio empleados en análisis cualitativos y cuantitativos y hornallas de combustión para análisis elementales de rutina, extremadamente tediosos. En conjunto, todos esos objetos han constituido las herramientas por antonomasia para estudiar las reacciones y descomposición de productos naturales. A menudo se los encuentra acomodados en alacenas y estantes, por encima de mesones lustrosos de madera o mármol, con piletones a cada extremo. Históricamente, las técnicas de laboratorio fueron del tipo hoy conocido como “secas y mojadas”, con la presencia de pocos instrumentos físicos en los laboratorios: una balanza química, un refractómetro, un microscopio y quizás un polarímetro, que servían para examinar compuestos ópticamente activos tales como carbohidratos y proteínas. Sin embargo, hacia 1980 la mayoría de esos métodos habían sido superados por las técnicas físicas, que originalmente no habían sido desarrollados para esos estudios.

Se ha hablado mucho, también, de la función decorativa de los instrumentos en un laboratorio, especialmente relevante en relación con las visitas de otros colegas y funcionarios, en términos del prestigio y capital de crédito que ellos dan a su “propietario”. Pero si se ve a los instrumentos como algo más que elementos decorativos y se va a su utilidad experimental real, se puede interpretar a la ciencia como un texto. De esa forma, entonces, los instrumentos pueden ser entendidos como mecanismos de inscripción ya que proporcionan trazos, rastros, marcas, en la forma de espectros, curvas, gráficos, gramos, etc. En efecto, una palabra y concepto clave aquí es “interpretación”. Los instrumentos han sido muy importantes en la construcción de conceptos. El recurso a instrumentos proporciona a los científicos con ‘revelaciones’ acerca de la naturaleza. La comprensión de dichas revelaciones es siempre una cuestión de interpretación, está cargada de teoría.

La tarea del químico es interpretar lecturas instrumentales y traducirlas en el lenguaje de la química. La ciencia química, en tal caso, puede ser definida como la traducción de datos acerca de la materia en fórmulas químicas. Las fórmulas son los morfemas en el lenguaje de la química. En la misma metáfora textual, cualquier instrumento nuevo permitirá una reescritura parcial del conocimiento existente. Una historia textual de los instrumentos, entonces, promete resultados interesantes. Una de sus dimensiones sería documentar el papel de las referencias instrumentales en el trabajo publicado, en los dos componentes de comunicación que incluye, el de la *iconografía* y el de la *parte experimental*. En un paper de química, los datos instrumentales son la principal pieza de iconografía, presentando evidencia ilustrativa para propósitos retóricos evidentes (Cambrosio & Keating, 2000). La retórica demostrativa de los datos instrumentales ha adquirido un lugar privilegiado en la comunicación científica, ya que representa y a veces cuantifica la calidad de la evidencia. ¿Cuál es el rol del científico al usar un instrumento? ¿Cuál es la relación del instrumento, el operador del mismo y el científico?

## **La revolución instrumental**

La química cambió de las sustancias materiales a las estructuras moleculares durante la segunda mitad del siglo XX. Antes de 1930, los desarrollos en la física ya habían contribuido al conocimiento estructural de moléculas simples. Las posiciones relativas de átomos y la información acerca de los enlaces químicos ya habían sido provistas por los datos numéricos derivados de la *difracción de rayos x* y el *comportamiento dieléctrico*, un área que usualmente no se considera que caiga dentro de la instrumentación física, pero claramente un antecedente de desarrollos posteriores. Desde comienzos de la segunda década del siglo XX, con la disponibilidad de la difracción de rayos X se abrió la posibilidad de identificar la ubicación y naturaleza de cada átomo en una molécula. Por supuesto, hubo problemas, particularmente la necesidad de muestras cristalinas y el hecho que las moléculas orgánicas eran mucho más difíciles de analizar estructuralmente que las grillas iónicas inorgánicas. Como con otras técnicas físicas, la determinación de la estructura con rayos X depende en grado considerable de conocimiento previo, en este caso de asignar posiciones probables a los átomos en la célula unitaria. Esto llevó al desarrollo de una técnica de ensayo y error que fue particularmente exitosa en el estudio de hidrocarburos aromáticos, donde la estructura ya era conocida.

En particular, se observaba que ciertos grupos funcionales orgánicos daban espectros de absorción característicos. Sin embargo, como hacer mediciones era un proceso invariablemente largo, que requería una habilidad considerable, los químicos orgánicos fueron lentos en la incorporación de estas técnicas en sus prácticas de laboratorio. La cristalografía de rayos X se transformó completamente con la llegada de las computadoras electrónicas en los años de 1950, que permitieron la determinación rutinaria de largos de enlace, ángulos de enlaces, y el espaciamiento entre átomos no enlazados. Hacia los años 1960, patrones de distribución tridimensionales de densidad de electrones, la incorporación de átomos pesados y el reemplazo isomórfico, permitieron la resolución definitiva de muchos problemas estructurales.

La Segunda Guerra Mundial y la demanda de la nueva industria petroquímica proporcionaron el estímulo, y los recursos, para el desarrollo de la instrumentación química (Morris & Travis, 1997). La universidad de investigación norteamericana, con la plétora de recursos en la era de abundancia del financiamiento científico inaugurada por Vannevar Bush en la National Science Foundation, permitió la compra o la construcción de esos instrumentos más grandes, generando una nueva época, ya que hasta entonces los químicos usaban las herramientas de la mesada del laboratorio de relativamente bajo costo como microscopios, polarímetros o refractómetros, que manejaban ellos mismos, mientras que posteriormente se hizo necesaria la colaboración con los químicos físico-orgánicos y los físicos.

En 1987 Rabkin publicó en la revista *Isis* de historia de la ciencia un artículo ya clásico sobre la adopción de la espectroscopia de infrarrojo por los químicos, en el que rompió decididamente con las narrativas usuales hasta entonces de corte internalista. Rabkin muestra en su trabajo la importancia de las redes sociales, la colaboración de laboratorios de firmas rivales y la generación de mercados para estos productos después de la finalización de la segunda guerra mundial. Años más tarde, D. Baird (1993) publicó su paper sobre la “gran revolución en la instrumentación científica” en *Annals of Science*. Baird revisó los cambios de instrumentación en la química analítica, pero más importante que eso, señaló que también había un cambio filosófico. Según él, entre

1920 y 1960, los químicos analíticos pasaron de identificar lo desconocido por sus propiedades químicas a distinguirlos por sus propiedades físicas. En 1997 P. Morris y A. Travis escribieron acerca del impacto de la instrumentación física sobre la química orgánica. Mostraron cómo la revolución instrumental cambió radicalmente lo que hacían los químicos.

En el caso de la *espectroscopia de infrarrojo*, la información cualitativa resultante de un espectro de infrarrojo (i.e. su diagnóstico estructural) contenía más indicadores de la naturaleza de la molécula examinada que técnicas más laboriosas y menos precisas usadas hasta entonces (medidas de punto de ebullición, refractometría, densitometría). Una de las áreas industriales que llevaron a su estandarización y difusión fue la refinación petrolera. Si bien usos relativamente simples de las técnicas, principalmente para el análisis de hidrocarburos de C<sub>4</sub>, eran suficientes para el programa de la goma sintética de Paul Flory y John White en Esso Research en 1942, no obstante, las industrias petroleras que se embarcaron en la producción de gasolina a gran escala por los métodos de alquilación y polimerización, requerían métodos más versátiles para el control en línea. La espectroscopia de infrarrojo y Raman podían satisfacer este requerimiento. La investigación en espectroscopia de infrarrojo permaneció como provincia de los físicos durante el primer tercio del siglo XX. A medida que la naturaleza de los enlaces químicos se fue haciendo más clara a la luz de la física cuántica, se desarrollaron varios centros de espectroscopia molecular que encararon la cuestión de los niveles de energía vibracional de las moléculas. Se concentraron en un grupo limitado de moléculas simétricas de bajo peso molecular, que no excedía cinco o seis átomos. El advenimiento de la *espectroscopia Raman* refinó el proceso, permitiendo a los científicos usar las dos técnicas conjuntamente para predecir e interpretar la energética de moléculas simples en términos de su comportamiento rotacional y vibracional.

Las aplicaciones de la espectroscopia de infrarrojo a problemas orgánicos se desarrollaron lentamente. El siguiente estadio de desarrollo ocurrió a comienzos de los años de 1930, a medida que las compañías de combustible empezaron a aprender la técnica y a considerar sus posibilidades. Los combustibles eran tema particularmente propicio para la espectroscopia de infrarrojo porque los espectros de los isómeros como octanos mostraban diferencias pronunciadas, mientras que sus temperaturas de hervor casi idénticas impedían la separación e identificación física. El trabajo sobre los combustibles se basó en el alto grado de las vibraciones controladas por movimientos de átomos que formaban un enlace o grupo particular observado empíricamente. Los distintos hallazgos impulsaron a un pequeño grupo de investigación cooperativa del American Petroleum Institute (API) a aplicar la técnica sistemáticamente en un estudio de la composición química del petróleo. El grupo API hacía investigación para toda la industria petrolera, y su experticia y hallazgos fueron así fácilmente accesibles a las compañías de petróleo y química en los 30 y los 40. El jefe del grupo API, E. Washburn, publicó el primer informe de los análisis de las fracciones de petróleo en 1933, donde alabó al nuevo método como una fuente de 'improntas digitales' de varios compuestos en la fracción de gasolina. La técnica no agregaba nada a lo que se sabía por otras fuentes, pero confirmaba las identidades de los hidrocarburos que ya habían sido separados y caracterizados por métodos más tradicionales.

El desarrollo de la tecnología de infrarrojo y la espectrometría de masas muestra algunos paralelismos notables. Ambas técnicas, originadas en la física, llegaron a la

madurez instrumental durante la segunda guerra mundial, principalmente en la industria química y petrolera y fueron extensamente utilizadas en la investigación química en los países industrializados después de la guerra, con una ventaja temporal para la tecnología IR. En ambos casos, el aporte de la industria fue crucial, por vía del desarrollo de la instrumentación confiable y las colecciones de datos necesarios para la recolección de los espectros (Rabkin, 1987). Una diferencia pareciera ser que la espectrometría de masas se aplicó principalmente al análisis de mezclas de hidrocarburos y que la fragmentación y reacomodos al azar que exhibe este tipo de compuestos retrasó la aplicación de la espectrometría de masas en la investigación estructural (Morris y Travis, 2002). El primer espectrómetro de masas es de 1919; produce iones positivos de la muestra y usa un fuerte campo magnético para resolver en una serie de rayos registrados en placas fotográficas o, mas recientemente, por detectores electrónicos. Son presentados como una serie de picos que representan las tasas de masa/carga. El primer espectrómetro de masas de alta resolución fue desarrollado en la Universidad de Minnesota a finales de los años de 1930. Hasta mediados de la década de 1950 el espectrómetro de masas había encontrado gran valor sólo en la física y en físico-química. La aplicación de la espectroscopía de masas a la química orgánica ocurrió en la segunda mitad de la década de 1950.

Desde mediados de los años de 1940 Stanford se convirtió en el centro líder en investigación en RMN. En la versión más simple de la RMN, una muestra de un compuesto es bañada en un campo magnético constante muy fuerte (hoy, generado por magnetos semiconductores) y bombardeado por ondas de radio de una única frecuencia. La interacción magnética de las ondas de radio por protones (u otros átomos adecuados) sobre una gama estrecha de frecuencias de radio se registra y estudia. Se mide la dependencia de la frecuencia de la resonancia de un protón sobre su ambiente químico, medido por el 'cambio químico'. Varian lanzó su primer espectrómetro RMN en 1952, que operaba a 30 MHz. Encontró aplicación inmediata en la industria, especialmente en Dupont, donde para 1954 un aparato de 26000 US\$ estaba más allá del presupuesto de cualquier universidad. En 1955 el primer instrumento fue comprado para Caltech de 40 MHz. También en Inglaterra, el Varian de 40 MHz fue el primer instrumento que se compró para la Universidad de Cambridge. Desde entonces han surgido otras empresas fabricantes de instrumentos cada vez más sofisticados.

A comienzos de la década de 1960 datos de movimientos químicos orgánicos se hicieron disponibles en forma tabulada y en atlas espectrales. Como con otros métodos instrumentales, la RMN ha sido ampliamente usada para determinar la estructura química, requiriendo a menudo supuestos de 'ensayo y error' similares a los empleados en la determinación estructural clásica. Esto tiene el peligro de que los químicos que estudian las 'entrañas' de un espectro de RMN complejo a menudo encuentren la estructura que quieren y no necesariamente la correcta. De allí que el amplio uso de la RMN (y también la espectroscopía de masas) ha llevado a que se reintroduzca un grado de incertidumbre en las estructuras químicas publicadas.

En las últimas tres décadas, los avances en la instrumentación ha conducido a mejoras significativas en sensibilidad y resolución que han permitido a los investigadores obtener análisis estructurales y de composición detallados, a menudo con resolución espacial atómica. Como el avance de la catálisis en el frente experimental depende fuertemente de la disponibilidad de técnicas de caracterización instrumentales, es importante que la investigación sobre el desarrollo de nuevas técnicas siga siendo

apoyada sustancialmente. Aunque los Estados Unidos han liderado tradicionalmente en el campo del análisis instrumental, y muchas de las técnicas en uso actualmente tuvieron su origen en laboratorios académicos de ese país, actualmente hay desarrollos importantes en la Comunidad Europea y en Japón.

La caracterización de catalizadores es una actividad fundamental para la comprensión de la química que ocurre en la catálisis. Las técnicas disponibles en el mundo a comienzos de la década de 1990 para la caracterización de catalizadores era la siguiente:

*Tabla 1: Técnicas experimentales para la caracterización de catalizadores y especies adsorbidas.*

Técnica	Acrónimo	Tipo de Información
Difracción electrónica de baja energía	LEED	Estructura bidimensional y registro con superficie metálica
Espectroscopia electrónica Auger	AES	Análisis elemental
Espectroscopia fotoelectrónica de rayos X	XPS	Análisis elemental y estado de valencia
Espectroscopia de dispersión de iones	ISS	Análisis elemental
Espectroscopia fotoelectrónica ultravioleta	UPS	Estructura electrónica
Espectroscopia de pérdida de energía electrónica	EELS	Estructura molecular
Espectroscopia de infrarrojo	IRS	Estructura molecular
Espectroscopia Raman Laser	LRS	Estructura molecular
Difracción de rayos X	XRD	Estructura de cristales en masa
Estructura fina de absorción de rayos X extendidos	EXAFS	Distancia de enlaces y número de coordinación
Microscopia electrónica de transmisión	TEM	Tamaño de cristales, forma, morfología y estructura
Microscopia electrónica de barrido de transmisión (scanning transmisión)	STEM	Microestructura y composición
Microscopia de barrido de túnel	STM	Microestructura
Espectroscopia de ultravioleta	--	Estado electrónico
Espectroscopia Mössbauer	--	Estado iónico
Espectroscopia de resonancia magnética nuclear	NMR	Estructura y moción molecular

Fuente: National Academy of Sciences. *Catalysis Looks to the Future*. 1992.

## La instrumentación en la catálisis venezolana

En Venezuela, desde 1964 creció una comunidad de investigación en catálisis que estuvo en más de un sentido escindida en dos: la universitaria y la industrial, esta última ligada a la industria petrolera, si bien la catálisis en general creció a la sombra del imaginario nacional de país petrolero. Decimos esto porque en la práctica fue muy difícil no sólo para la comunidad catalítica académica sino también a la comunidad catalítica industrial poder legitimarse y actuar en intercambios fructíferos con la industria petrolera, a pesar de que estaba nacionalizada. Con todo, crecieron grupos y se desarrollaron líneas de investigación y desarrollo. Entre las principales que se pueden reconocer actualmente están (Andréu et al., 2004):

*Zeolitas o tamices moleculares.* Si bien el primer catalizador comercial de craqueo de gasóleos en lecho fluidizado (FCC) ocurrió a comienzos de la década de 1960 por investigadores de la Mobil, en Iberoamérica los primeros trabajos sobre el tema aparecen unos diez años más tarde, en el Simposio Iberoamericano de Catálisis de 1970, celebrado en Santa Fe, Argentina. Los trabajos pioneros de Venezuela en catálisis con

zeolitas se remontan a trabajos de Lyezer Katán, en la Universidad Central de Venezuela en los primeros años de la década de 1970. Un papel importante le cupo al Laboratorio de Catálisis Orgánica de la Universidad de Poitiers, bajo la dirección de M. Guisnet, por la gran cantidad de investigadores venezolanos que allí se formaron o actualizaron. A su regreso, este nuevo contingente de investigadores reforzó los centros de investigación en las universidades e institutos venezolanos y comenzaron a consolidar desde los años de 1980 la investigación, no sólo en aplicaciones catalíticas de zeolitas comerciales, sino en la síntesis, modificación y desarrollo de tamices moleculares para su utilización como adsorbentes y catalizadores.

*Hidrotratamiento.* Los estudios académicos comenzaron a finales de la década de 1960 en la UCV, donde trabajaron principalmente en la preparación de catalizadores para procesos de HDS y de conversión de crudos pesados y en el desarrollo de nuevos métodos de preparación de  $\text{Co}$  y  $\text{NiMo}$  y en el uso de arcillas como catalizadores de hidroconversión. En IVIC se empezó trabajando en las condiciones de activación y caracterización de catalizadores de  $\text{Co}$  y  $\text{NiMo}$ , y en el uso de nuevos soportes (en particular carbón activado) y luego en nuevas fases activas. En años recientes en LUZ se ha desarrollado una importante actividad de I+D en mejoramiento de crudos pesados y extra pesados.

*Reformación Catalítica.* Se desarrolló en el país desde 1967, con proyectos de reformación catalítica de naftas sobre catalizadores bimetálicos, a base de platino-germanio, platino-molibdeno y platino-vanadio, a los que se fueron agregando variaciones.

*Catálisis homogénea.* Área de gran desarrollo en Venezuela en las últimas tres décadas. Esto ha requerido el desarrollo de la química de coordinación y organometálica, junto con sus métodos típicos de análisis, notablemente la espectroscopia RMN multinuclear además de otras técnicas usuales en catálisis en fase líquida.

*Catálisis computacional.* Los esfuerzos para desarrollar una teoría para la catálisis se iniciaron en el IVIC, estimulando la elaboración de un software basado en hamiltonianos paramétricos para la catálisis, CATIVIC. Actualmente, la incorporación de todo tipo de herramientas computacionales, como ha sido el caso de sistemas expertos, redes neuronales y algoritmos genéticos, por ejemplo, impulsan esta área emergente de la catálisis computacional.

Aunque en los países más industrializados se espera que el desarrollo de nuevas herramientas de caracterización, particularmente en espectroscopia, ocurra en el ámbito de la investigación académica porque la industria encuentra crecientemente difícil justificar los costos asociados con el desarrollo de nuevas técnicas, en un país pequeño como Venezuela, no parece muy factible que se dé un desarrollo de nuevos instrumentos de caracterización si bien hay relativamente numerosas contribuciones a la caracterización de elementos y compuestos variados. Pudiera ser posible, en cambio, que el modelaje teórico, que en todas partes está listo para un crecimiento sustancial

como resultado del progreso en la tecnología de computación y en la teoría misma, pueda encontrar en un país como Venezuela, investigadores creativos que con computadoras poderosas para cálculos extensivos y la posibilidad del despliegue gráfico de los resultados, pueden incursionar con éxito en la teoría de la catálisis.

Al rastrear el uso de instrumentos que en distintos momentos hicieron individuos e instituciones en Venezuela en el campo de la química catalítica, generalmente se encuentra que la familiarización con el nuevo instrumental por parte de los becarios que hacían sus estudios avanzados en el exterior sirvió de acicate para la introducción de instrumentación avanzada en sus instituciones de adscripción en el país, con miras a utilizarla a su regreso y poder participar así en una carrera de investigación con perfil competitivo. Su difusión en las universidades donde, por ejemplo, la espectroscopia de infrarrojo se había convertido en una manera precisa y reproducible de analizar mezclas complejas tanto orgánicas como inorgánicas, permitió que las nuevas generaciones ya se formaran en el nuevo lenguaje instrumental de la química.

Casi siempre el énfasis está en la difusión de los instrumentos desde los centros industriales y académicos del norte. Como consecuencia de la estandarización creciente los instrumentos, éstos son mucho más simples de usar aunque su fabricación es cada vez más compleja, de modo que el químico hace mucho tiempo que no puede construir sus propios instrumentos para un propósito de investigación particular. El fabricante, al evaluar el potencial de atracción del cliente industrial además del académico, decide qué instrumentos se venderán mejor y planifica su producción de acuerdo con ello. Entre las consecuencias negativas que esto trae aparejado está que en estas condiciones, el investigador se encuentra en una posición en la que debe adaptar sus proyectos al equipo disponible y puede inclusive buscar problemas de investigación que justifiquen el costo de su compra. De este modo, la investigación científica pasa a estar cada vez más condicionada por las técnicas-instrumentos usados que por el problema teórico o conceptual mismo. Rabkin (1987) recoge el comentario de un espectroscopista italiano quien argumenta que ‘‘Es por esto que hoy se hace tanto trabajo malo. La gente compra instrumentos y los usa por comprarlos. Inventan trabajo que puede tener poca relevancia para justificar su adquisición’.

Otro aspecto es que el elevado costo de los instrumentos relacionado con la comercialización de los instrumentos científicos también ha exacerbado la dificultad de comparar varias técnicas espectroscópicas como herramientas de análisis. Es prácticamente imposible que cualquier laboratorio académico concentre entre sus muros una gama completa de equipos espectroscópicos y compare su desempeño con respecto a un mismo problema estructural o analítico. Incluso en las compañías industriales más ricas, que pueden permitirse comprar los últimos equipos, raramente se embarcan en estudios comparativos ya que, como lo puso un espectroscopista veterano, ‘siendo como es la naturaleza humana, puede haber una fuerte competencia interdepartamental entre grupos analíticos dedicados a diferentes técnicas.’

Un concepto tanto administrativo como arquitectónico une a la ciencia académica y la ciencia industrial: el del centro instrumental. La intención es ahorrar dinero a través de la utilización de especialistas que manejen instrumentos especializados para la comunidad. A veces sirven a un departamento o a un instituto y a veces prestan servicio a toda una región geográfica. Representan una solución

administrativa a problemas como el del acceso a los instrumentos del más elevado desempeño, de su adquisición y mantenimiento. Tales centros de instrumentos (un laboratorio de RMN, un laboratorio de espectrometría o uno de rayos X) están diferenciados arquitecturalmente, administrativamente e incluso socialmente de los laboratorios de química cercanos. Son como “fábricas”, para tomar la analogía de Peter Galison, quién registró para la historia de la física de altas energías la constitución de áreas similares (lo que Galison llama “zonas de trueque”, 1997).

En efecto, esos centros de instrumentos se parecen, ya sea que estén ubicados en un contexto académico, industrial o gubernamental. Se ha argumentado que los centros de instrumentos en un edificio de química sirven de interfase, más que entre teóricos y experimentalistas, entre experimentalistas y fabricantes de instrumentos, directa o indirectamente. El rol de esos centros, no sólo consistiría en dar acceso a los químicos a máquinas sofisticadas, sino que contradictoriamente tendría el efecto simbólico de aislarlos de la química ( ). La interfase se duplica como una barrera de fuego. Hay una cierta creencia que la química de corriente principal sigue siendo una ciencia material, con su propio lenguaje (el de las fórmulas químicas) y que los instrumentos son tanto un bien precioso como un mal necesario que, según esta poderosa aunque no formulada doctrina, no debieran contaminar la química (ref.).

Un centro de química que se considera bien provisto, en Venezuela, es el del IVIC, donde encontramos Laboratorios de Instrumentos en un ala del edificio, con salas dedicadas, ya sea al Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear, o al laboratorio de Masas, al de Infrarrojo, al de Difracción de rayos X, al margen de la existencia de instrumentos más pequeños, por ejemplo de masas, en laboratorios de investigadores particulares.

Si revisamos la literatura catalítica venezolana desde 1976 a 2005, observamos que sobre una muestra de 290 registros en los que pudimos identificar los métodos e instrumentos utilizados, el instrumento más frecuente a lo largo del tiempo, obviamente de modelos que fueron actualizándose con los años, ha sido el espectrómetro de infrarrojo, con 131 trabajos que lo utilizaron, acompañado o no del espectrómetro ultravioleta en 42 casos, para un total de 173 trabajos. Le sigue el espectrómetro de resonancia magnética nuclear, con 108 trabajos. Mucho más atrás queda el espectrómetro de masas, a veces en la versión de un espectrómetro de masas de bombardeo rápido de átomos (FAB-MS), con trece trabajos identificados. Los restantes instrumentos encontrados en los artículos de la muestra son el ESR (Electron Spin Resonance) (con cinco trabajos en la base de artículos registrados), el AAS (Atomic Absorption Spectroscopy) (con seis trabajos) al igual que el LRS (Laser Raman Spectroscopy) y finalmente el DRS (Diffuse Reflectance Spectroscopy) con 4 trabajos.

De 74 instituciones que se mencionan con relación a los instrumentos que se usaron para hacer los experimentos mencionados en los trabajos de la muestra de artículos encontramos que las instituciones venezolanas son aquellas que tienen al menos un grupo de investigación en catálisis, un total de diez: IVIC, ULA, INTEVEP, UCV, USB, IUT-RC, LUZ, UDO, UC y UNET. Los experimentos se han hecho haciendo mediciones en instrumentos de otras instituciones venezolanas (donde por mucho tiempo el INTEVEP, por ser el que tenía el instrumental más avanzado y costoso facilitó a los universitarios la utilización de sus instrumentos para la investigación experimental catalítica), instituciones europeas (45 instituciones), de las cuales siete

universidades británicas, diez universidades e instituciones de la industria en Francia, once en España, cinco en Italia y en menor cantidad en instituciones de otros países. Cinco instituciones en Estados Unidos, y un total de once instituciones latinoamericanas también facilitaron el uso de instrumentos para la realización de los experimentos necesarios. Todo esto sugiere familiaridad con las instituciones donde los investigadores hicieron sus estudios de perfeccionamiento o sabáticos, como lo pudimos comprobar en más de un caso.

En el caso de Venezuela, como en otros contextos, la iconografía instrumental de los primeros trabajos químicos publicados tenía la función documental de describir algún aparato, la manera como se lo había armado y se lo usaba. Las marcas de los instrumentos importados comenzaron a dar prestigio y carácter de cientificidad a los trabajos. El paso fundamental fue el pasaje de describir la instrumentación a describir datos, desplegados en gráficos de varios tipos, recogidos por medio de instrumentos. En la muestra de la literatura de catálisis por investigadores venezolanos a lo largo de treinta años, recogimos en forma repetida un mismo tipo de iconografía hasta hace muy pocos años en los que comienzan a aparecer figuras tridimensionales y modelos más sofisticados. Volviendo otra vez al ejemplo del IVIC, el Departamento de Diseño Gráfico de ese instituto, seguramente por razones sindicales y de cultura ocupacional, sólo hace poco tiempo que decidió reciclar a su personal de dibujo, que estaban acostumbrados a trabajar con la plumilla y las demás herramientas clásicas del dibujante, para iniciarlo en el diseño computarizado, que hace años han venido haciendo los investigadores en sus laboratorios.

A partir del análisis de la literatura producida por los investigadores catalíticos venezolanos, hemos encontrado que a medida que nos acercamos al presente, con instrumentos cada vez más sofisticados y costosos, se trabaja 'con' los instrumentos de forma más o menos rutinaria, convencional, pero no 'sobre' o 'en' los instrumentos de una manera que eventualmente pudiera llevar a la transformación de la técnica y del instrumento mismo. Lejos están los tiempos en que los científicos fabricaban sus propias herramientas y alguno que otro instrumento sencillo.

En entrevistas realizadas a los investigadores, se observaron no pocos casos en los cuales un instrumento que a veces era comprado por catálogo, cuando estaba desempacado en su laboratorio se convertía en una fuente de problemas y frustraciones que acababan en la no utilización del instrumento, la pérdida de los recursos invertidos, y el desestímulo para el investigador que cambiaba de tema. Así, por ejemplo, supimos que durante algunos años algunos investigadores en catálisis homogénea que empezaron a interesarse por la heterogeneización entraron dificultades porque los métodos de caracterización de que disponían no estaban "a la altura", y con ello se desanimaron y abandonaron esa línea de trabajo. Después, cuando instrumentación progresó, volvió a surgir el interés por los procesos de heterogeneización y ahora vuelve a estar otra vez en boga. Según estos testimonios, se había dificultado el desarrollo de esa línea básicamente por razones instrumentales. Y entre las justificaciones que daban estaba el argumento que a pesar de que la industria puede trabajar con un poco de desconocimiento de lo que hace la catálisis, en la academia hay una preocupación mayor por entender los procesos.

La operación por parte del químico lego de un equipo IR, producido masivamente en forma comercial desde finales de la década de 1940, resulta tan sencilla

que no requiere un espectroscopista-sacerdote para comulgar con los espectros infrarrojos hasta entonces misteriosos. Cuando el instrumento comenzó a hacerse más común en Venezuela, en las décadas de 1960 y 1970, hacía tiempo que las dificultades técnicas habían sido superadas y era ampliamente aceptado como un método analítico útil. La tecnología rutinizó las técnicas de investigación en este caso, que luego se difundieron en las prácticas científicas. Hace años que los estudiantes reciben instrucción en el manejo del instrumento durante los estudios universitarios. En IVIC siempre ha habido espectrómetros de IR. Los últimos en ser comprados fueron de transformada de Fourier, el primero hace quince años, de manejo bastante sencillo y que pueden usar los estudiantes de postgrado, y el más reciente, comprado hace unos seis o siete años.

¿Qué tipos de resultados instrumentales eligieron esos científicos para que aparecieran en sus papers? Se ha argumentado que el investigador no utiliza los mismos instrumentos para impresionar a un visitante a su laboratorio y a un árbitro de revista. En el primer caso exhibe orgullosamente su aparato ya que publicita su capacidad de conseguir fondos, y busca, en consecuencia, el máximo desempeño (resolución, sensibilidad, etc.). En el segundo caso, en cambio, opta por la conformidad, la normalidad y las condiciones de operaciones esperables. Lo que busca es la reproducibilidad fácil. El mensaje en esta circunstancia es: “cualquier idiota debiera ser capaz de repetir mi trabajo”. Esto no lo hemos podido verificar aún en trabajo de campo, especialmente en relación con laboratorios equipados y que, sin embargo, tienen baja productividad. Sospechamos que podemos encontrar algunas situaciones relacionadas con el valor fetichista del instrumento en lugares más o menos tradicionales y con poca ciencia, y en circunstancias ligadas más al consumo de los valores simbólicos, especialmente los referidos al status, en relación con los instrumentos, que a la investigación misma. Pero afortunadamente esos casos son menores a medida que pasa el tiempo y la actividad científica se consolida.

*La compra reciente de un instrumento:* El IVIC ha comprado recientemente para su Centro de Química un espectrómetro de masas con una inversión para su instalación de Bs.1.720.000.000. Científicamente el espectrómetro de masas es un instrumento esencial para la investigación en las áreas de Física, Biología y Medicina Experimental, además de la Química. La forma como se ubica en el Centro de Química es, como hemos señalado más arriba, como una unidad independiente dentro del Centro. Se espera que el equipo que se está comprando apoye la actividad de investigación en la industria, universidades, y otras instituciones, como PTJ (Policía Técnica Judicial), Guardia Nacional, así como apoyar la labor de las aduanas en cuanto a la determinación de sustancias desconocidas, detectando si una muestra contiene droga o no. Se prevé que el eje de asistencia sea mucho más amplio en un futuro. Puntualmente se espera que este servicio sea de utilidad en temas de contaminación ambiental: solventes del ambiente, análisis de compuestos existentes y la cantidad localizada; en el área de productos naturales: plantas, trabajos de pesticidas en suelos, en alimentos, en aguas, para averiguar si está o no el compuesto que se está buscando; y también en el área péptidos, proteínas, biopolímeros y órganos metálicos.

En una entrevista (Galárraga, 2005) a la técnica encargada de los estudios para la compra del aparato, ésta señaló la urgencia en cuanto a la adquisición de un equipo de tales proporciones:

"Ya teníamos un buen tiempo sin un *espectrómetro de masas*, porque el que teníamos se dañó hace como 8 años y como era un equipo obsoleto para lo que se había desarrollado en esa área, no resultaba rentable repararlo, además era muy costoso y no teníamos el dinero para adquirirlo."(M.G., 2005).

En años pasados, la carencia había sido solventada en el Centro de Química a través de la compra de equipos pequeños como cromatógrafos de gases con detector de masas, que cumplen parte de la función del espectrómetro de masas, gracias al presupuesto de distintos proyectos de varios laboratorios.

"Esto quiere decir que se han podido analizar ciertos compuestos, pero no todos. La espectrometría de masa es una técnica que ha cobrado tanto auge hoy en día que el Instituto tenía la necesidad de comprar un buen equipo para no sólo prestar servicios al instituto sino también prestar este servicio a entes externos" (M.G., idem).

Se justifica la compra por la función social del instrumento, ya que no sólo va a servir para atender las necesidades de los investigadores básicos del instituto. Pero fundamentalmente la observación que justifica la compra es que *esos estudios resultaban imposibles de realizar con los equipos pequeños con los que contaba anteriormente el IVIC*. La ausencia del equipo limitaba de manera tajante la labor de éstos. Anteriormente sólo se podía trabajar con moléculas pequeñas, que podían ser analizadas a través de un cromatógrafo de gases, pero otras muestras, de moléculas grandes, como las de las proteínas por ejemplo, que son moléculas enormes, por su densidad no pueden ser analizadas en un cromatógrafo de gases porque poseen rangos de masas altísimos. "En realidad añorábamos tener un equipo que pudiera calcular pesos moleculares de 50 ó 60 mil unidades de masa" acaba explicando la técnica operadora. La expectativa y buena parte de la justificación de la compra de este equipo es que no sólo facilitará la labor científica, sino que permitirá un ahorro sustancial de dinero y tiempo, ya que hasta ahora las muestras debían ser enviadas al exterior para ser analizadas y el costo aproximado es de 50 dólares por muestra.

"Tenemos investigadores que trabajan en el área de *péptidos y proteínas*, y nunca pudimos darles el servicio con el espectrómetro de masas. Ellos se veían en la necesidad de enviar la muestra al exterior y pagar por ese servicio. Enviaban a Estados Unidos, Brasil y a otros sitios donde hay servicios de espectrometría de masas. Otra opción era buscar a alguien que trabaje en colaboración con la investigación y que se encuentre fuera del país y realice las muestras ya seas gratis o más económicas" (M.G., idem) .

Dado el costo del equipo, deberá adquirirse gracias a la aprobación de un crédito adicional para el IVIC por parte del Ejecutivo Nacional. El proceso de licitación para la compra del espectrómetro de masas se encuentra en proceso con las ofertas de las diferentes compañías extranjeras interesadas en vender el equipo. Por supuesto luego vendrá la selección, "que es la parte más difícil de la compra, para adquirir con el dinero con el que se cuenta, el mejor equipo." Se espera que gracias a este valioso instrumento científico se abra un campo gigantesco, en prácticamente todos los trabajos de índole orgánica que se practican en Venezuela.



En síntesis, el desarrollo del nuevo modelo conceptual usado para proporcionar direccionalidad a la actividad científica de los químicos comenzó en la década de 1940, desplazando al viejo paradigma a finales de la década de 1950 en un proceso que se completó hacia finales de la década del 60. La rutina de un tipo de química fue transformada en rutina de otro tipo, con implicaciones importantes para la química y los químicos. Llevó al desplazamiento casi total de los métodos ‘mojados y secos’ de la dilucidación de la estructura clásica constituyendo una verdadera revolución científica y tecnológica. La catálisis venezolana ya nació dentro de este paradigma, en su fase de difusión mundial y su desarrollo se dio en forma articulada a las redes internacionales de la disciplina.

#### Referencias

- Andreu, P., C. Bolívar y M. Rosa-Brussin, 2004, La Catálisis en Venezuela. En: Dominguez Esquivel, J.M. (2004) (coordinador editorial) *El Amanecer de la Catálisis em Iberoamérica*. CYTED, VALley Research Corporation, Academia de Catálisis A.C. (México) e Instituto Mexicano del Petróleo. México.
- Baird, D. 1993 Analytical Chemistry and the ‘Big Scientific Instrumentation Revolution’ *Annals of Science*, 50, pp. 267-290.
- Cambrosio, A. & P. Keating, 2000, Of Lymphocytes and Pixels: The Techno-visual Production of Cell Populations. *Studies in History and Philosophy of Biological and Biomedical Sciences.*, 31C (2), pp. 233-270.
- R. Galárraga. “Organismos de Seguridad y centros de investigación profundizarán estudios orgánicos”. Prensa IVIC.
- Galison, P. 1997, *Image and Logic. A Material Culture of Microphysics*. University of Chicago Press, Chicago.
- Joergens, B. & T. Shinn, 2001, Research Technology in Historical Perspective: An Attempt at Reconstruction. En: Joergens & Shinn (eds.) *Instrumentation Between Science, State and Industry*. Kluwer Academic Press, Dordrecht, pp.241-248.
- Laszlo, P. 2002, Tools, Instruments and Concepts: The Influence of the Second Chemical Revolution. En P. Morris (ed.) *From Classical to Modern Chemistry. The Instrumental Revolution*. Royal Society of Chemistry, Science Museum and the Chemical Heritage Foundation, Londres, pp. 171-187.
- Morris, P.J.T., 2002, (ed.) *From Classical to Modern Chemistry. The Instrumental Revolution*. Royal Society of Chemistry, Science Museum and the Chemical Heritage Foundation, Londres.
- Morris, P. y A. Travis, 1997, The Role of Physical Instrumentation in Structural Organic Chemistry in the Twentieth Century. En: J. Krige & D. Pestre (eds.) *Science in the Twentieth Century*, Harwood, Amsterdam, pp. 715-740.
- Rabkin, Y. 1987, Technological Innovation in Science: The Adoption of Infrared Spectroscopy by Chemists. *Isis*, 78, pp. 31-54.
- Vessuri, H., M. V. Canino y I. Sánchez-Rose, 2005, Informe de Avance del Proyecto “La Catálisis en Venezuela entre la Academia y la Industria”. FONACIT, S1-2001988.