FACULTAD: Ciencias Básicas

PROGRAMA: Química

DEPARTAMENTO DE: Química

CURSO:	Espectrometría de Masas	**CÓDIGO:**	156292
ÁREA:	Formación profesional — Banco de Electivas Profesionales		
REQUISITOS:	Química Orgánica II y Química Analítica Instrumental [propuesto — confirmar con el plan de estudios]	**CORREQUISITO:**	Ninguno
CRÉDITOS:	2 (96 h semestrales: 48 h de contacto directo y 48 h de trabajo independiente)	**TIPO DE CURSO:**	Teórico-práctico
FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN	Octubre de 2026		

JUSTIFICACIÓN

La espectrometría de masas es una de las técnicas analíticas de mayor sensibilidad y especificidad: permite determinar masas moleculares y fórmulas elementales, elucidar estructuras, cuantificar trazas en matrices complejas y estudiar biomoléculas. Acoplada a la cromatografía (GC-MS, LC-MS) es la técnica de referencia en análisis ambiental, toxicológico, forense, de alimentos, en productos naturales y en las ciencias «ómicas».

La asignatura forma al estudiante en los principios de ionización, análisis de masas y detección, en la interpretación de espectros y patrones de fragmentación y en el uso cuantitativo de la técnica, con apoyo en bases de datos espectrales abiertas, de modo que pueda integrarla con la espectroscopía IR y la RMN en la elucidación estructural.

OBJETIVO GENERAL

Comprender los fundamentos instrumentales de la espectrometría de masas e interpretar espectros de masas para la identificación, elucidación estructural y cuantificación de compuestos orgánicos, inorgánicos y biomoléculas.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Describir las fuentes de ionización (EI, CI, ESI, APCI, MALDI, DART, DESI, ICP) y su selección según el tipo de analito.
2. Explicar el funcionamiento de los analizadores de masas (cuadrupolo, trampa de iones, TOF, Orbitrap, sector magnético, analizadores híbridos y movilidad iónica) y sus parámetros de desempeño.
3. Determinar fórmulas moleculares a partir del ion molecular, los patrones isotópicos y la masa exacta.
4. Interpretar mecanismos de fragmentación (incluidas la regla del electrón par y la regla de Stevenson) de las principales familias de compuestos orgánicos.
5. Aplicar las técnicas acopladas (GC-MS, LC-MS/MS) al análisis cualitativo y cuantitativo, y reconocer las aplicaciones de la proteómica, el ICP-MS de trazas y la imagen por EM.

COMPETENCIAS

- Selecciona la técnica de ionización y el analizador adecuados para un problema analítico.
- Interpreta espectros de masas e integra la información con IR y RMN en la elucidación estructural.
- Desarrolla análisis cuantitativos con estándar interno y criterios de validación.
- Usa bases de datos espectrales y lee literatura especializada en inglés.

UNIDAD 1. Fundamentos e instrumentación

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
1.1 Historia, conceptos básicos: relación m/z, espectro de masas, ion molecular, pico base	3	3
1.2 Sistemas de introducción de muestra y vacío	3	3
1.3 Ionización en fase gaseosa: ionización electrónica (EI) e ionización química (CI)	3	3
1.4 Ionización a presión atmosférica y de desorción: ESI, APCI, MALDI; ionización ambiental (DART, DESI); ICP-MS	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

UNIDAD 2. Analizadores de masas y detectores

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
2.1 Sector magnético y cuadrupolo; resolución y poder de resolución	3	3
2.2 Trampa de iones, tiempo de vuelo (TOF), Orbitrap y FT-ICR; analizadores híbridos (Q-TOF, Q-Orbitrap) y movilidad iónica	3	3
2.3 Espectrometría de masas en tándem (MS/MS): modos de barrido, CID	3	3
2.4 Detectores, calibración de masas y adquisición de datos	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

UNIDAD 3. Interpretación de espectros de masas

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
3.1 Ion molecular, regla del nitrógeno, patrones isotópicos (Cl, Br, S) y masa exacta	3	3
3.2 Mecanismos de fragmentación: escisión α, reordenamiento de McLafferty, pérdidas neutras, regla del electrón par y regla de Stevenson	3	3
3.3 Fragmentación de hidrocarburos, alcoholes, éteres, carbonílicos, aminas, halogenuros	3	3
3.4 Elucidación estructural combinada MS–IR–RMN	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

UNIDAD 4. Técnicas acopladas y aplicaciones

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
4.1 Cromatografía de gases–espectrometría de masas (GC-MS); búsqueda en bibliotecas espectrales	3	3
4.2 Cromatografía líquida–espectrometría de masas (LC-MS, LC-MS/MS); efecto matriz	3	3
4.3 Análisis cuantitativo: estándar interno, dilución isotópica, SIM/MRM, validación	3	3
4.4 Aplicaciones: ambiente, alimentos, forense, productos naturales, proteómica (bottom-up y top-down), metabolómica (GNPS), ICP-MS de trazas e imagen por EM	3	3
Subtotal unidad	**12**	**12**

TOTAL DEL CURSO	**48**	**48**

METODOLOGÍA (Debe evidenciarse el empleo de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje)

El curso se desarrolla con clases magistrales participativas, aprendizaje basado en problemas (ABP) y trabajo práctico (laboratorio, simulación o cómputo, según el tema). El trabajo independiente se orienta con guías por unidad y se acompaña en horario de asesoría y a través del aula virtual institucional.

Uso de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje:

- Aula virtual institucional (plataforma de la Universidad de Pamplona) para publicación de guías, entrega de productos, foros de discusión y cuestionarios automatizados.
- Bases de datos bibliográficas suscritas por la Universidad y repositorios de acceso abierto para la búsqueda y lectura de artículos científicos en inglés.
- Bases de datos espectrales abiertas: NIST Chemistry WebBook, MassBank y GNPS; software libre de procesamiento de datos de masas.
- Simulaciones y recursos audiovisuales de instrumentación; prácticas o visitas a laboratorios con GC-MS/LC-MS cuando estén disponibles.
- Herramientas colaborativas en línea para la elaboración de informes y presentaciones, y videoconferencia para asesorías del trabajo independiente.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

La evaluación es continua, formativa y sumativa. Se combina la valoración del trabajo en el aula (contacto directo) con la del trabajo independiente, el cual se evalúa mediante los productos indicados en cada unidad (informes, talleres, cuestionarios de lectura en inglés y proyecto).

Componente	Peso
Primer corte (Unidades 1–2): examen escrito, talleres y control de lectura en inglés	35 %
Segundo corte (Unidades 3–4): examen escrito, informes de práctica y control de lectura en inglés	35 %
Examen final: proyecto integrador con informe escrito y sustentación oral	30 %

Distribución propuesta según la estructura habitual de cortes (35 % – 35 % – 30 %); ajustar a lo dispuesto en el Reglamento Académico Estudiantil de Pregrado vigente.

BIBLIOGRAFÍA DISPONIBLE EN UNIDAD DE RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS DE LA UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

[1] de Hoffmann, E. y Stroobant, V. (2007). *Mass Spectrometry: Principles and Applications* (3.ª ed.). Wiley.

[2] Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J. y Bryce, D. L. (2015). *Spectrometric Identification of Organic Compounds* (8.ª ed.). Wiley.

[3] Skoog, D. A., Holler, F. J. y Crouch, S. R. (2018). *Principles of Instrumental Analysis* (7.ª ed.). Cengage Learning.

Existencia y ejemplares por confirmar en el catálogo institucional (https://aplicaciones.unipamplona.edu.co/prestamo/) y en las bases de datos suscritas (https://login.unipamplona.basesdedatosezproxy.com/login).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

[4] Gross, J. H. (2017). *Mass Spectrometry: A Textbook* (3.ª ed.). Springer.

[5] McLafferty, F. W. y Tureček, F. (1993). *Interpretation of Mass Spectra* (4.ª ed.). University Science Books.

[6] Watson, J. T. y Sparkman, O. D. (2007). *Introduction to Mass Spectrometry: Instrumentation, Applications, and Strategies for Data Interpretation* (4.ª ed.). Wiley.

DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

- NIST Chemistry WebBook: https://webbook.nist.gov
- MassBank Europe: https://massbank.eu
- GNPS (Global Natural Products Social Molecular Networking): https://gnps.ucsd.edu — plataforma sucesora: https://gnps2.org
- PubChem: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov

NOTA: EN CADA UNA DE LAS UNIDADES EL DOCENTE DEBERA PROPONER MÍNIMO UNA LECTURA EN LENGUA INGLESA Y SU MECANISMO DE CONTROL

UNIDAD No.	1
NOMBRE DE LA UNIDAD	Fundamentos e instrumentación
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Explica los componentes de un espectrómetro de masas y selecciona fuentes de ionización según el analito.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
1.1 Historia, conceptos básicos: relación m/z, espectro de masas, ion molecular, pico base	Clase magistral; presentación del curso.	3	Glosario técnico inglés–español.	3	1	Glosario (revisión).
1.2 Sistemas de introducción de muestra y vacío	Clase con esquemas instrumentales.	3	Cuestionario guiado.	3	1	Quiz escrito.
1.3 Ionización en fase gaseosa: impacto electrónico (EI) e ionización química (CI)	Clase magistral con espectros comparados.	3	Comparación de espectros EI/CI de un compuesto.	3	1	Taller evaluado.
1.4 Ionización a presión atmosférica y de desorción: ESI, APCI, MALDI; ionización ambiental (DART, DESI); ICP-MS	Clase con casos de biomoléculas, metales y muestras analizadas directamente en superficie (DART, DESI).	3	Cuadro de selección de fuentes; lectura en inglés.	3	1	Cuadro (rúbrica); control de lectura.
	TOTAL UNIDAD	**12**		**12**	**4**	

LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura del capítulo sobre fuentes de ionización en de Hoffmann y Stroobant (2007), *Mass Spectrometry: Principles and Applications*. Control: cuestionario en el aula virtual.

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

UNIDAD No.	2
NOMBRE DE LA UNIDAD	Analizadores de masas y detectores
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Compara analizadores de masas según resolución, exactitud de masa e intervalo, y comprende la espectrometría en tándem.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
2.1 Sector magnético y cuadrupolo; resolución y poder de resolución	Clase magistral con cálculos de resolución.	3	Problemas de resolución.	3	1	Taller evaluado.

2.2 Trampa de iones, tiempo de vuelo (TOF), Orbitrap y FT-ICR; analizadores híbridos (Q-TOF, Q-Orbitrap) y movilidad iónica	Clase con simulaciones y videos de fabricantes.	3	Cuadro comparativo de analizadores.	3	1	Cuadro comparativo.
2.3 Espectrometría de masas en tándem (MS/MS): modos de barrido, CID	Clase magistral.	3	Interpretación de un espectro MS/MS.	3	1	Quiz escrito.
2.4 Detectores, calibración de masas y adquisición de datos	Demostración de software de adquisición.	3	Ejercicios de calibración de masa.	3	1	Producto entregable; primer parcial.
TOTAL UNIDAD		**12**		**12**	**4**	
LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura del capítulo sobre analizadores de masas en Gross (2017), *Mass Spectrometry: A Textbook*. Control: resumen estructurado y preguntas en clase.					

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

UNIDAD No.	3
NOMBRE DE LA UNIDAD	Interpretación de espectros de masas
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Determina fórmulas moleculares e interpreta patrones de fragmentación para proponer estructuras.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
3.1 Ion molecular, regla del nitrógeno, patrones isotópicos (Cl, Br, S) y masa exacta	Clase magistral con ejemplos.	3	Cálculo de fórmulas a partir de patrones isotópicos.	3	1	Taller evaluado.
3.2 Mecanismos de fragmentación: escisión α, reordenamiento de McLafferty, pérdidas neutras, regla del electrón par y regla de Stevenson	Desarrollo de mecanismos.	3	Problemas de fragmentación.	3	1	Quiz escrito.
3.3 Fragmentación de hidrocarburos, alcoholes, éteres, carbonílicos, aminas, halogenuros	Interpretación guiada con espectros de bases de datos (NIST, MassBank).	3	Interpretación de espectros problema.	3	1	Taller evaluado.

3.4 Elucidación estructural combinada MS–IR–RMN	Casos integradores.	3	Resolución de problemas combinados; lectura en inglés.	3	1	Producto entregable; control de lectura.
TOTAL UNIDAD		**12**		**12**	**4**	
LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura de capítulos seleccionados de McLafferty y Tureček (1993), *Interpretation of Mass Spectra*. Control: resolución de espectros problema.					

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

UNIDAD No.	4					
NOMBRE DE LA UNIDAD	Técnicas acopladas y aplicaciones					
COMPETENCIAS A DESARROLLAR	Aplica GC-MS y LC-MS/MS al análisis cualitativo y cuantitativo en matrices reales.					
CONTENIDOS	**ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR**	**HORAS CONTACTO DIRECTO**	**ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE**	**HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE**	**HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE**	**ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE**
4.1 Cromatografía de gases–espectrometría de masas (GC-MS); búsqueda en bibliotecas espectrales	Clase magistral y demostración de búsqueda en bibliotecas.	3	Identificación de compuestos en un cromatograma suministrado.	3	1	Informe evaluado.
4.2 Cromatografía líquida–espectrometría de masas (LC-MS, LC-MS/MS); efecto matriz	Clase con casos.	3	Análisis de un caso de estudio.	3	1	Quiz escrito.
4.3 Análisis cuantitativo: estándar interno, dilución isotópica, SIM/MRM, validación	Ejemplos de cálculo.	3	Curva de calibración con estándar interno.	3	1	Taller evaluado.
4.4 Aplicaciones: ambiente, alimentos, forense, productos naturales, proteómica (bottom-up y top-down), metabolómica (GNPS), ICP-MS de trazas e imagen por EM	Asesoría del proyecto integrador.	3	Proyecto integrador.	3	1	Informe y sustentación; segundo parcial.
TOTAL UNIDAD		**12**		**12**	**4**	
LECTURA EN LENGUA INGLESA Y MECANISMO DE CONTROL	Lectura de un artículo en inglés sobre aplicación de GC-MS o LC-MS/MS (ambiente, alimentos o productos naturales), seleccionado por el docente. Control: presentación oral y uso en el proyecto.					

NOTA: EN CADA UNIDAD EL DOCENTE DEBE DILIGENCIAR LA ANTERIOR TABLA

Elaboró: Dr. Eliseo Amado González, Universidad de Pamplona
Revisó y editó: Dr. Luis Miguel Díaz-Sánchez, Universidad de Pamplona