

VOL. 06

Espectrometría de masas

MASA, CARGA E IDENTIDAD MOLECULAR

La espectrometría de masas transforma moléculas en iones y mide su relación masa/carga. El patrón resultante puede apoyar la identificación de un compuesto y revelar información estructural.

Qué es

Una técnica analítica que ioniza una muestra, separa los iones según m/z y registra su intensidad.

Masa molecular

El ion molecular o los estados de carga pueden relacionarse con la masa esperada. En péptidos es común observar varios estados de carga.

Confirmación de identidad

La coincidencia de masa esperada, patrón isotópico y fragmentación aumenta la confianza en la asignación.

El espectro

Es una gráfica de intensidad frente a m/z . Cada línea o pico corresponde a una población de iones detectada.

Ionización

Analizador m/z

Detector

patrón de iones

relación masa/carga (m/z)

IDEA CLAVE

Una masa compatible apoya identidad, pero no demuestra por sí sola pureza, contenido o estructura completa.

Espectrometría de masas

Conceptos prácticos para evaluar información científica y documental.

Cómo leer un espectro

- Eje X: relación masa/carga, m/z .
- Eje Y: intensidad relativa de los iones.
- Pico base: ion de mayor intensidad del espectro.
- Ion molecular: señal asociada a la molécula intacta, cuando es observable.
- Fragmentos: iones útiles para apoyar estructura o secuencia.

Ejemplo con un péptido

- Masa neutra ilustrativa: 3000 Da.
- Con carga +3 puede aparecer cerca de m/z 1001.
- Con carga +4 puede aparecer cerca de m/z 751.
- La deconvolución combina estados de carga para estimar la masa neutra.
- Los valores son educativos y no representan un producto AXIS.

Limitaciones

- Isómeros pueden compartir la misma masa nominal.
- Sales, aductos y modificaciones desplazan señales.
- La preparación y el modo de ionización influyen en el espectro.
- Una señal dominante no equivale a cuantificación absoluta.

Preguntas frecuentes

¿MS confirma que la muestra está pura?

No por sí sola. La pureza requiere un método de separación y criterios adecuados.

¿Por qué aparecen varios picos para la misma molécula?

Puede deberse a estados de carga, isótopos, aductos o fragmentos.

¿Masa exacta e identidad son lo mismo?

No. La masa exacta reduce posibilidades, pero la identidad se fortalece con evidencia complementaria.

REFERENCIAS EDUCATIVAS

NIST - Tandem Mass Spectral Library

NIST Chemistry WebBook - Molecular Weight Search

NIST - Pattern similarity measures applied to mass spectra

IUPAC Gold Book - Mass spectrometry terminology

Solo para uso de investigación. No destinado a uso humano ni veterinario. Contenido educativo general; no constituye asesoría médica, regulatoria o de laboratorio. Los requisitos y métodos aplicables dependen del material, la jurisdicción, la especificación y el contexto de investigación.