

OFICINA ESPAÑOLA DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



(1) Número de publicación: **2 690 044** 

<sup>51</sup> Int. CI.:	
G01N 27/62	(2006.01)
G01N 27/70	(2006.01)
G01T 1/185	(2006.01)
H01J 49/42	(2006.01)
H01J 49/02	(2006.01)
H01J 49/06	(2006.01)
H01J 49/36	(2006.01)

(12)

## TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

(73) Titular/es:

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacion	esentación y número de la solicitud internacional: 25		14	PCT/US2014/018330
87) Fecha y número de publicación internacional:	04.09.	2014	WO141	134043
96) Fecha de presentación y número de la solicitud europea:	25.02.	2014	E 1475	6573 (3)
(97) Fecha y número de publicación de la concesión europea:	05.09.	2018	EP 296	62094

54 Título: Trampa de iones multipolar para espectrometría de masas

(30) Prioridad:

#### 01.03.2013 US 201313782708

(45) Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente: 19.11.2018

### THE ROCKEFELLER UNIVERSITY (100.0%) 1230 York Avenue New York, NY 10021-6399, US (72) Inventor/es: KRUTCHINSKY, ANDREW, N.; SHERMAN, VADIM; COHEN, HERBERT y CHAIT, BRIAN, T. (74) Agente/Representante: SALVÀ FERRER, Joan

Aviso:En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

#### DESCRIPCIÓN

Trampa de iones multipolar para espectrometría de masas

5 **[0001]** La investigación que ha dado lugar a la presente invención fue financiada, al menos en parte, por las subvenciones del NIH n.º RR00862 y GM103314. Por consiguiente, el Gobierno de los Estados Unidos puede poseer ciertos derechos en la invención.

#### CAMPO TÉCNICO

10

**[0002]** La presente memoria descriptiva se refiere a trampas de iones y, en particular, a un dispositivo de trampa de iones multipolar para el almacenaje de iones eficiente y de alta capacidad y la expulsión de iones paralela con selección de masa.

#### 15 ANTECEDENTES

[0003] Los espectrómetros de masas con trampa de iones han funcionado convencionalmente con un campo cuadrupolar tridimensional (3D) formado, por ejemplo, mediante un electrodo anular y dos tapas terminales. En esta configuración, el mínimo del pozo de energía potencial creado por la distribución del campo de radiofrecuencia (RF)
 20 se sitúa en el centro del anillo. Debido a que la energía cinética de los iones inyectados en una trampa de iones disminuye con las colisiones con las moléculas del gas amortiguador, normalmente helio, los iones inyectados se

- localizan de manera natural en el mínimo del pozo de potencial. Como se ha mostrado mediante la obtención de imágenes por tomografía láser, los iones que se encuentran en estas trampas de iones construidas de manera convencional se congregan en una distribución sustancialmente esférica, que suele ser menor de un 25 aproximadamente 1 milímetro de diámetro. El resultado es una degradación del rendimiento del dispositivo cuando
- se intenta atrapar un gran número de iones, debido a los efectos de las cargas espaciales.

[0004] Como posible solución a este problema, se lanzaron los espectrómetros de masas cuadrupolares con un campo eléctrico cuadrupolar bidimensional con el fin de ampliar la zona de almacenamiento de iones, pasando de 30 una pequeña esfera a una columna cilíndrica ampliada. Un ejemplo de este tipo de espectrómetro se encuentra en la

- patente de EE. UU. 5.420.425, de Bier y col., La patente de Bier y col. describe un espectrómetro de masas con trampa de iones sustancialmente cuadrupolar, con un volumen ocupado por iones ampliado o alargado. La trampa de iones presenta un límite de carga espacial que es proporcional a la longitud del dispositivo. Tras la relajación posterior a la colisión, los iones ocupan una región ampliada que coincide con el eje del dispositivo. La patente de
- 35 Bier y col. describe una trampa de iones bidimensional, que puede ser recta o tener forma circular o curva, así como una trampa de iones elipsoidal tridimensional con una capacidad de atrapamiento de iones incrementada. Los iones son expulsados de la trampa de iones de manera selectiva en función de su masa a través de una abertura alargada correspondiente a la zona de almacenamiento alargada.
- 40 **[0005]** Aunque la geometría de la trampa de iones de la patente de Bier y col. proporciona un incremento del volumen de almacenamiento de iones, la eficiencia y la versatilidad del espectrómetro de masas se ven afectadas, por ejemplo, debido a la ranura alargada y el posterior enfoque de los iones requerido tras su expulsión. Además, el volumen de almacenamiento está limitado por cuestiones prácticas, ya que la longitud del espectrómetro debe incrementarse con el fin de incrementar el volumen de almacenamiento de iones.
- 45

**[0006]** Los efectos de las cargas espaciales también pueden degradar el rendimiento de muchos espectrómetros de masas si se admiten demasiados iones a la vez para su análisis. Una solución que se ha propuesto con un éxito limitado consiste en dividir la corriente de iones en N canales de m/z independientes.

- 50 **[0007]** El documento EP 2058837 A2 muestra que las trampas de iones también pueden estar formadas por una pluralidad de electrodos individuales, estando la pluralidad de electrodos dispuesta, unos con respecto a otros, de manera que definen una estructura geométrica tridimensional en la que los electrodos individuales de la pluralidad de electrodos se encuentran situados en cada uno de los vértices de la estructura geométrica y en la que cada electrodo de la celda presenta una superficie curva frente a todos los demás electrodos de la celda. No
- 55 obstante, este documento solo contempla cubos como estructura geométrica y los electrodos se hallan exclusivamente en los vértices.

**[0008]** Por lo tanto, existe la necesidad de proporcionar una trampa de iones eficiente y versátil, en particular, para su uso en un espectrómetro de masas, que proporcione un buen volumen de almacenamiento de iones, así

como una eficiente expulsión de los iones seleccionados.

#### RESUMEN

- 5 **[0009]** Las características de la descripción se pondrán de manifiesto en la siguiente descripción detallada, considerada conjuntamente con los dibujos adjuntos. No obstante, se entenderá que todos los dibujos han sido concebidos únicamente como ilustraciones y no como una definición de los límites de la presente descripción.
- [0010] La descripción trata sobre un dispositivo de trampa de iones de alta capacidad y versátil. En un aspecto, el dispositivo de trampa de iones incluye una zona de contención para contener iones, y una estructura poliédrica que incluye una pluralidad de electrodos que circundan la zona de contención, en la que la zona de contención para contener iones corresponde sustancialmente a un volumen circundado por la estructura poliédrica. La trampa de iones también incluye una pluralidad de electrodos incluye una pluralidad de superficies poligonales regulares que definen la estructura poliédrica. La pluralidad de electrodos incluye una electrodo de vértice situado en cada
- 15 vértice de la pluralidad de vértices, y al menos cuatro de los electrodos de vértice están situados en una primera superficie de la pluralidad de superficies poligonales. La pluralidad de electrodos incluye también preferentemente otros electrodos en la primera superficie, que están configurados para formar una pluralidad de cuadrupolos en la primera superficie. Se aplica una primera tensión de RF a electrodos alternos de la pluralidad de electrodos y se aplica una segunda tensión de RF a los electrodos intercalados entre los electrodos alternos, siendo la primera y la
- 20 segunda tensión de RF de igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, de manera que los electrodos directamente contiguos de la pluralidad de electrodos se mantienen en fases opuestas. Esta configuración de la pluralidad de electrodos con fases de RF alternas forma una barrera de potencial para repeler los iones que se encuentran en la zona de contención desde las superficies poligonales que forman la estructura poliédrica.

# 25

- **[0011]** La descripción también trata sobre un espectrómetro de masas paralelo eficiente que incluye un dispositivo de trampa de iones formado de acuerdo con la descripción. En un aspecto, el espectrómetro de masas paralelo incluye: una fuente de iones que genera iones, una pluralidad de analizadores de masas y un dispositivo de trampa de iones conectado para recibir los iones emitidos por la fuente de iones y para expulsar los iones hacia la
- 30 pluralidad de analizadores de masas en función de la masa-carga. La trampa de iones también incluye una zona de contención para contener los iones recibidos desde la fuente de iones y una estructura poliédrica regular que incluye una pluralidad de electrodos que circundan la zona de contención, en la que la zona de contención para contener los iones corresponde sustancialmente a un volumen circundado por la estructura poliédrica. Una pluralidad de electrodos incluye una pluralidad de superficies poligonales definen la estructura poliédrica. La pluralidad de electrodos incluye una pluralidad de superficies poligonales definen la estructura poliédrica.
- 35 electrodo de vértice situado en cada vértice de la pluralidad de vértices, estando al menos cuatro de los electrodos de vértice situados sobre una primera superficie de la pluralidad de superficies poligonales. La pluralidad de electrodos también incluye preferentemente un conjunto de electrodos configurado para formar una pluralidad de cuadrupolos en la primera superficie. Se aplica una primera tensión de RF a electrodos alternos de la pluralidad de electrodos y se aplica una segunda tensión de RF a los electrodos intercalados entre los electrodos alternos, siendo
- 40 la primera y la segunda tensión de RF de igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, y manteniéndose en fases opuestas los electrodos contiguos de la pluralidad de electrodos. La pluralidad de electrodos con fases de RF alternas están configurados para formar una barrera de potencial para repeler los iones desde cada superficie de la pluralidad de superficies poligonales regulares que forman la estructura poliédrica.
- 45 [0012] Preferentemente, cada uno de la pluralidad de cuadrupolos situados en la primera superficie está configurado como un filtro de masas para la expulsión selectiva de los iones desde la zona de contención en una ventana predeterminada de relación masa/carga iónica. Una frecuencia de la primera tensión de RF y la segunda tensión de RF aplicadas a los electrodos en cada uno de la pluralidad de cuadrupolos corresponde a una frecuencia característica asociada con la ventana predeterminada de masa/carga iónica. Cada uno de la pluralidad de
- 50 cuadrupolos está conectado preferentemente con un analizador de masas diferente perteneciente a la pluralidad de analizadores de masas para su análisis paralelo.

[0013] La presente descripción también trata sobre un dispositivo de trampa de iones que incluye una zona de contención para contener iones; una estructura poliédrica que comprende una pluralidad de electrodos que 55 circundan la zona de contención, en la que la zona de contención corresponde sustancialmente a un volumen circundado por la estructura poliédrica; una pluralidad de vértices y una pluralidad de superficies y bordes poligonales regulares que definen la estructura poliédrica regular; incluyendo la pluralidad de electrodos un electrodo de borde situado a lo largo de cada borde de la pluralidad de estructuras poligonales, y al menos un electrodo adicional situado en cada una de la pluralidad de superficies poligonales; y una primera tensión de RF aplicada a

cada uno de los electrodos de borde, y una segunda tensión de RF aplicada a cada al menos un electrodo adicional, siendo la primera y la segunda tensión de RF de igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, siendo electrodos adyacentes el al menos un electrodo adicional y el electrodo de borde asociados con cada superficie, manteniéndose en fases opuestas los electrodos adyacentes, en el que la pluralidad de electrodos están 5 configurados para formar una barrera de potencial para contener los iones en la estructura poliédrica.

**[0014]** En diversos aspectos adicionales, cada uno de la pluralidad de electrodos de una trampa de iones de la presente descripción puede ser o una barra cilíndrica o una esfera.

10 [0015] En otros aspectos, los electrodos pueden ser electrodos de borde que siguen el contorno o los bordes de las superficies poligonales asociadas con la estructura poliédrica.

[0016] En algunos aspectos, los electrodos de fase alterna pueden tener forma de estructuras anulares anidadas, que pueden ser, por ejemplo, triangulares, rómbicas, cuadradas, hexagonales o de cualquier otra forma 15 correspondiente a la forma de una cara de un poliedro.

[0017] En otros aspectos, los electrodos de borde pueden alternarse en cuanto a su fase con electrodos adicionales situados sobre las superficies, o caras de la estructura poliédrica. En algunos aspectos, los electrodos adicionales pueden consistir en un único electrodo, que puede ser una esfera, centrada en cada cara de la 20 estructura poliédrica regular.

**[0018]** En otros aspectos, la estructura poliédrica regular de la trampa de iones puede tener forma de cubo, tetraedro, octaedro, icosaedro o dodecaedro.

25 [0019] En un aspecto, la estructura de un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción es un cubo, e un incluye un total de N<sup>3</sup> - (N - 2)<sup>3</sup> electrodos y N<sup>3</sup> - (N - 2)<sup>3</sup> - 2 cuadrupolos, en los que N representa un número entero mayor de 2.

[0020] En un aspecto adicional, un volumen de la zona de contención de un dispositivo de trampa de iones
 30 cúbico de la presente descripción es de aproximadamente 10 cm x 10 cm x 10 cm, teniendo el dispositivo de trampa de iones una capacidad de almacenamiento de iones superior a 10<sup>10</sup> iones.

**[0021]** En otros diversos aspectos, el dispositivo de trampa de iones de la presente descripción puede estar configurado como una celda de colisión, un reactor ion/ion, un reactor molécula/ion o un reactor fotón/ion.

35

**[0022]** En otros aspectos adicionales, un electrodo de placa está situado en el exterior de cada una de las superficies de la estructura poliédrica, y se aplica una primera tensión de CC, suficiente para impedir el agotamiento de iones de la zona de contención, a al menos un primer electrodo de placa. En otros aspectos, se aplica una segunda tensión de CC de detención, que es menor que la primera tensión de CC de detención, a un segundo

- 40 electrodo de placa situado en el exterior de otra de las superficies, generando la segunda tensión de CC de detención una barrera de potencial suficientemente alta para impedir el agotamiento de iones de carga múltiple y suficientemente baja para agotar los iones de carga única de la zona de contención. Preferentemente, el segundo electrodo de placa está situado fuera de una de las superficies de la estructura poliédrica que incluye una pluralidad de cuadrupolos. El agotamiento de los iones de carga única se amplifica preferentemente proporcionando múltiples
- 45 canales, o ejes, asociados con la pluralidad de cuadrupolos, para el agotamiento de los iones de carga única de la zona de contención.

#### **BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS DIBUJOS**

50 **[0023]** 

La Fig. 1A es una representación esquemática de una vista en perspectiva de una realización de un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción.

La Fig.1B es una representación esquemática de una vista en perspectiva de una realización de un sencillo 55 dispositivo de trampa de iones cúbico únicamente con fines ilustrativos.

La Fig. 1C es una vista en perspectiva de un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción parcialmente ensamblado.

La Fig. 2 es una representación gráfica de un potencial eficaz entre las paredes de una realización de un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción.

Las Figs. 3A-3C son representaciones esquemáticas de vistas en perspectiva de realizaciones adicionales de un dispositivo de trampa de iones con fines únicamente ilustrativos y que no forma parte de la invención de estructuras poliédricas regulares de orden superior.

Las Figs. 3D y 3E son representaciones esquemáticas de vistas en perspectiva de realizaciones adicionales de un 5 dispositivo de trampa de iones de la presente descripción.

La fig. 4 es una representación esquemática de simulaciones de trayectorias de iones asociadas con una realización de un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción.

La fig. 5 es una representación esquemática de una vista en sección transversal de una realización de un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción.

10 La fig. 6 es una representación esquemática de una vista en sección transversal de una realización de un espectrómetro de masas que incluye un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción.

#### DESCRIPCIÓN DETALLADA DE REALIZACIONES

- 15 **[0024]** Los siguientes apartados describen realizaciones de la presente descripción. Para los expertos en la materia, debería resultar evidente que las realizaciones descritas con las figuras adjuntas que se proporcionan en la presente memoria tienen fines únicamente ilustrativos y no limitativos, habiéndose presentado únicamente a modo de ejemplo.
- 20 **[0025]** Un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción consiste en una trampa de iones multipolar, que incluye una pluralidad de electrodos situados en torno a una zona de confinamiento, en un patrón regular. La pluralidad de electrodos están confinados en el área superficial, o caras, de un poliedro regular y están situados en al menos los vértices de la estructura poliédrica regular. La pluralidad de electrodos también incluye electrodos adicionales dispuestos a lo largo de los bordes y entre los bordes en un patrón regular en las superficies
- 25 o caras del poliedro. Mediante la aplicación apropiada de tensiones de RF, en las que los electrodos contiguos se mantienen en cualquier momento con polaridades o fases opuestas, estas disposiciones de electrodos en una estructura poliédrica proporcionan superficies con un alto potencial eléctrico, que repelen y contienen a los iones dentro de una zona de contención delimitada por la estructura poliédrica. Por consiguiente, el volumen de contención para el almacenamiento de iones corresponde sustancialmente al volumen circundado por el área superficial del 30 poliedro.

**[0026]** Por tanto, las trampas de iones de la presente descripción pueden ofrecer una capacidad de almacenamiento de iones muy elevada, que no ofrecen los sistemas cuadrupolares convencionales. Por ejemplo, una trampa de iones en forma de cubo con unas dimensiones de 10 cm x 10 cm x 10 cm, de la cual se proporciona

- 35 un ejemplo en la fig. 1A, puede almacenar más de 10<sup>10</sup> iones de acuerdo con las simulaciones llevadas a cabo por los presentes inventores y, en principio, solo está limitada por las dimensiones de la trampa de iones. La cifra es al menos 1000 veces mayor que la capacidad de la trampa de iones descrita, por ejemplo, en la patente de copropiedad US 7.323.683 de Krutchinsky y col. (en lo sucesivo, "Krutchinsky"), y de 10<sup>5</sup> a 10<sup>6</sup> veces mayor que la de las actuales trampas de iones comerciales que se emplean comúnmente como analizadores de masas para
- 40 analizar moléculas (a excepción de los grandes aceleradores circulares utilizados en física nuclear).

**[0027]** En referencia a la fig. 1A, en una realización 50 de un dispositivo de trampa de iones, una estructura poliédrica regular en forma de cubo delimita una zona de contención de iones 54. Una pluralidad de electrodos 52, que tienen forma de barras cilíndricas, están situados en un área superficial del cubo en un patrón regular, estando eituados los electrodos cilíndricas en los entre del cubo en un patrón regular, estando estandos en un área superficial del cubo en un patrón regular, estando entre del cubo enter del cubo entre del cubo entre del cubo entere del cub

- 45 situados los electrodos cilíndricos 52 en los ocho vértices del cubo y, además, entre los vértices en cada dimensión, de manera que hay N x N electrodos situados en cada superficie. En el ejemplo que se muestra en la fig. 1A, el número de electrodos N es igual a 8.
- [0028] Los electrodos del dispositivo de trampa de iones están confinados en las superficies del cubo de la 50 fig. 1A, lo cual proporciona un gran espacio interior 54 para contener los iones. En diversas realizaciones adicionales de un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción en forma de cubo, se puede calcular el número total de electrodos que circundan la zona de contención de iones como N<sup>3</sup> (N 2)<sup>3</sup> electrodos, siendo N cualquier número entero mayor de 2. Además, preferentemente, los extremos de los electrodos cilíndricos en la realización de la fig. 1A están dispuestos y orientados de manera apropiada para crear un total de N<sup>3</sup> (N- 2)<sup>3</sup> 2 cuadrupolos, a
- 55 partir de cuatro conjuntos de electrodos más próximos, en las superficies del cubo. Por consiguiente, la trampa de iones de la fig. 1A, en la que N es igual a 8, está formada por 296 electrodos, a partir de los cuales se pueden formar 294 cuadrupolos.
  - **[0029]** En las realizaciones preferidas, N es mayor de 2.

[0030] Los cuadrupolos son conocidos comúnmente por su uso como guías de iones y/o filtros de masas. Cada par de barras adyacentes de un cuadrupolo está conectado a un potencial de RF positivo o negativo de magnitud y frecuencia adecuadas para la aplicación concreta, de manera que los elementos directamente contiguos 5 se mantienen con polaridades o fases opuestas con la misma amplitud. Se sabe que esta disposición proporciona un confinamiento radial de iones en torno a un eje central del conjunto de barras que forma el cuadrupolo. En referencia

a la fig. 1B, por ejemplo, si se proporciona solamente un electrodo en cada uno de los ocho vértices 55 de un cubo que rodea una zona de contención de iones 60, y se aplican polaridades de RF opuestas 57 a los electrodos adyacentes 59, se forman seis cuadrupolos, uno en cada superficie del cubo, con el centro de cada superficie 10 cuadrada proporcionando un eje 65 de cuadrupolo en torno al cual se pueden confinar sustancialmente los iones.

[0031] En las trampas de iones de la presente descripción, se aplica este mismo patrón de señales de RF alternas a electrodos advacentes formados en cada superficie de una estructura poliédrica regular que circunda una zona de contención de iones. En el caso de la trampa de iones con forma cúbica 50, por ejemplo, se forman un total

15 de 294 cuadrupolos, que rodean la zona de contención 54. En referencia a la fig. 2, mediante la apropiada aplicación de fases de RF alternas, se puede formar una barrera de potencial alta 62 en las superficies del cubo con un pozo poco profundo 64 hacia el centro del dispositivo que repelerá de manera eficaz los iones positivos y negativos hacia el centro del dispositivo y atrapará los iones en el interior del volumen 54. De este modo, se puede atrapar en el dispositivo un número muy elevado de iones con un amplio intervalo de masas.

## 20

[0032] También a modo de ejemplo, la fig. 1C muestra un dispositivo de trampa de iones 66 parcialmente ensamblado en la que se han eliminado dos de sus superficies, que muestra con claridad una gran zona de contención de iones 68 vacía. En cada una de las superficies del cubo, hay un conjunto bidimensional regular de electrodos con forma de barra situados y orientados para proporcionar un conjunto de cuadrupolos en cada 25 superficie.

Volviendo a hacer referencia a la fig. 1A y a la fig. 1C, un dispositivo de trampa de iones de la presente [0033] descripción también puede incluir electrodos de placa 56 en el exterior de las superficies 70 de la estructura poliédrica regular del dispositivo. Haciendo referencia también a la fig. 1B, para evitar que los iones escapen de la

- 30 zona de contención de iones 60 a lo largo de los ejes de los cuadrupolos 65, en los que el campo de RF es pequeño, se puede aplicar un pequeño potencial de CC a un número cualquiera de electrodos de placa para repeler los iones y devolverlos hacia el centro de la zona de contención 60.
- [0034] En diversas realizaciones, se aplica una tensión de CC en el intervalo de entre aproximadamente 0V y 35 aproximadamente +1000 V, preferentemente en el intervalo de entre aproximadamente +0,02 CV y aproximadamente +100 V, a al menos una parte de los electrodos de placa para evitar, por ejemplo, que escapen los iones positivos.
- Cabe señalar que en las realizaciones descritas en la presente memoria, se considera que se atrapan [0035] 40 iones positivos para su posterior análisis. Un experto en la materia reconocerá que, asimismo, se pueden generar y atrapar en la zona de contención iones negativos producidos por una fuente de iones, para su análisis mediante, por ejemplo, un espectrómetro de masas. Por consiguiente, para iones negativos, se aplica una tensión de CC en el intervalo de entre aproximadamente 0V y aproximadamente -1000 V, preferentemente en el intervalo de entre aproximadamente -0,02V y aproximadamente -100V para evitar que escapen los iones negativos.
- 45

En referencia, por ejemplo, a la fig. 1A, cualquiera de los electrodos de placa 56 puede incluir unas [0036] aberturas 58 para permitir inyectar iones en la zona de contención de iones 54, y/o para expulsar iones de la zona de contención de iones 54.

- 50 [0037] En una realización, para guiar los iones hacia la zona de contención 54, el conjunto bidimensional de electrodos con forma de barra situado en una de las superficies del cubo puede incluir una quía de iones cuadrupolar 72 para quiar los iones hacia un volumen de contención y/o una quía de iones cuadrupolar 74 para quiar los iones hacia el exterior del volumen de contención. En la realización que se muestra, los cuadrupolos para el guiado de iones y el filtrado de masas se forman a partir de conjuntos de barras ampliadas. Como observarán los
- 55 expertos en la materia, parámetros como la longitud de las barras ampliadas y la tensión y frecuencia de la señal de RF aplicada a las barras de las guías de iones cuadrupolares 72, 74 se pueden ajustar de manera apropiada para el guiado de iones y/o el filtrado de masas para una ventana concreta de masa/carga. Por consiguiente, se pueden expulsar iones en función de la relación masa/carga a través de una abertura 58 en un electrodo de placa 56, por ejemplo, situado de manera apropiada para coincidir con la zona centrada a lo largo del eje del cuadrupolo 74.

**[0038]** En particular, aplicando una tensión de RF con una frecuencia característica correspondiente a un intervalo concreto de masas iónicas, se puede lograr la expulsión de iones selectiva en función de su masa a lo largo del eje del cuadrupolo 74.

5

[0039] En diversas realizaciones, el dispositivo de iones puede incluir un gran número de cuadrupolos. Como se muestra en la fig. 1A, en una realización, se puede proporcionar un conjunto de barras ampliadas 76 y utilizarlo para el análisis paralelo de los valores de la relación masa/carga de un gran abanico de iones almacenados en la trampa. Mediante la aplicación apropiada de diferentes frecuencias características correspondientes a diferentes 10 ventanas de masa/carga, la expulsión de iones selectiva en función de su masa se puede llevar a cabo de manera

periódica o continua a lo largo de cualquiera de los N<sup>3</sup> – (N – 2)<sup>3</sup> – 2 ejes de los cuadrupolos, o de todos ellos.

**[0040]** Por consiguiente, un espectrómetro de masas paralelo de la presente descripción puede incluir hasta  $N^3 - (N - 2)^3 - 2$  analizadores de masas individuales, uno para cada una de las ventanas de masa/carga de iones

- 15 expulsados de cada cuadrupolo para el análisis paralelo simultáneo de los iones almacenados en el dispositivo. Por lo tanto, se puede proporcionar una espectrometría de masas paralela muy eficiente y libre de pérdidas asociada con un barrido de iones secuencial convencional mediante la aplicación del dispositivo de iones de la presente descripción.
- 20 **[0041]** Aunque los electrodos que se muestran en las figs. 1A y 1C son barras cilíndricas, dentro del alcance de la presente invención se contempla cualquier electrodo con una forma apropiada.

**[0042]** En diversas realizaciones, los electrodos pueden ser esféricos, cilíndricos, cúbicos, hiperbólicos o anillos de diversas formas, tal como se muestra en las figs. 3D y 3E (circular, triangular, cuadrada, etc.).

- **[0043]** En realizaciones adicionales, los electrodos pueden tener un diámetro de entre aproximadamente 1 mm y 20 mm, preferentemente entre aproximadamente 5 mm y 10 mm.
- [0044] En otras realizaciones, una distancia de centro a centro entre los electrodos alineados en una 30 superficie de la estructura poliédrica puede ser de entre aproximadamente 1,25 D y aproximadamente 1,75 D, siendo D un diámetro de los electrodos alineados en la superficie.

**[0045]** En otras realizaciones o en realizaciones adicionales, la distancia de centro a centro puede ser de aproximadamente 1,2 D a 1,5 D.

35

25

**[0046]** Se ha descubierto que unas realizaciones concretas de una estructura superficial que circunda la zona de contención constituyen, sorprendentemente, trampas de iones muy eficientes. Aunque la estructura superficial de la presente descripción se puede describir generalmente como una estructura poliédrica regular, con electrodos de fase de RF alterna situados en al menos los vértices, se descubrió que se pueden lograr resultados superiores con estructura a divisione adjuntante descripciones en los vértices.

- 40 estructuras cúbicas que incluyen tanto electrodos situados en los vértices, como electrodos adicionales situados a intervalos regulares entre los vértices. Las estructuras preferidas también pueden incluir estructuras poliédricas regulares de orden superior.
- [0047] Por ejemplo, En referencia a las figs. 3A a 3E, una trampa de iones multipolar de la presente 45 descripción puede incluir una pluralidad de electrodos situados en torno a una zona de confinamiento de iones en un patrón regular proporcionado por poliedros regulares de orden superior. Aunque el cubo es una de las formas más simples de estructura poliédrica uniforme y regular, en la que se sitúan los electrodos, también se contemplan otras formas. Por ejemplo, los electrodos 84 pueden estar situados en los vértices 85 de una estructura tetraédrica 86, y una tensión de RF aplicada con polaridad alterna, tal como se muestra. Otras realizaciones también podrían
- 50 presentar electrodos adicionales situados en conjuntos bidimensionales en una cualquiera o más de las superficies de la estructura 86.

[0048] En referencia a la fig. 3B otra realización de una estructura poliédrica adecuada para circundar una zona de contención de iones de una trampa de iones de la presente descripción consiste en una estructura 55 octaédrica 88. Situando 24 electrodos en cada vértice del (4,6,6)-octaedro 88 y aplicando una tensión de RF con polaridad alterna a los electrodos adyacentes, se forman seis (6) cuadrupolos y ocho (8) hexapolos en las superficies que circundan la zona de contención de iones.

[0049] En otras realizaciones, se contemplan dentro del alcance de la invención poliedros regulares de orden

superior tales como estructuras icosaédricas 90. Preferentemente, los multipolos 3D de orden superior adecuados incluirán un número par de electrodos en cada lado de la estructura poliédrica.

**[0050]** En referencia a la fig. 3D, también se puede construir una realización de un multipolo 3D 150 5 utilizando los bordes y los lados (caras) de un poliedro, situando electrodos anulares alternos 152, 154 que definen el contorno de la forma de cada una de las caras poliédricas, y dispuestas en un patrón anidado. Para un cubo, por ejemplo, en una realización, se sitúan electrodos anulares cuadrados de tamaño decreciente en los 6 lados del cubo, y se aplica un potencial alterno, tal como se muestra, a los pares alternos. Esta estrategia se puede extender a cualquier poliedro regular.

10

[0051] En referencia a la fig. 3E, se puede construir otra realización de un multipolo 3D 160 a partir de una pluralidad de electrodos que incluyen múltiples electrodos que definen los bordes 164 de un poliedro, con electrodos adicionales 162 de polaridad opuesta como los bordes definidos 164 en sus caras. En la realización que se muestra en la fig. 3E, se construye un multipolo 3D en forma de dodecaedro aplicando potenciales de RF alternos de 15 polaridad opuesta a los bordes de los electrodos 164 (-U₀senΩωt) y a electrodos esféricos 162 (+U₀senωt) situados

en los centros de las 12 caras del dodecaedro.

[0052] Haciendo referencia ahora a la fig. 4, se llevaron a cabo simulaciones para iones almacenados en el interior de otro dispositivo de trampa de iones 92 de la presente descripción, con una estructura cúbica, construidos 20 a partir de 56 esferas (N = 4), aplicando tensiones de RF apropiadas a los cuadrupolos formados por los electrodos. Se muestran las trayectorias iónicas de 93 de 100 iones de masa 1500 Da y m/z = 501, 007 (z = 3) proyectadas sobre un plano de sección transversal, que atraviesa el centro de la zona de contención, para el caso en el que no se aplicó una tensión de atrapamiento a los electrodos de placa circundantes. El 20% de los iones se escapó a través de los ejes de los cuadrupolos tras 10 ms. Se mostró que se puede permitir o fomentar el escape de los iones

- 25 a lo largo de cualquiera de los 54 ejes entre los electrodos 94, o de todos ellos, y que se pueden expulsar iones con diferentes intervalos de m/z de manera selectiva a lo largo de los ejes 96 escogidos. Por consiguiente, se demostró el potencial para el análisis simultáneo de hasta 54 diferentes ventanas de m/z.
- [0053] Se llevaron a cabo simulaciones adicionales para comprobar que los iones pudieran ser repelidos 30 sustancialmente tras el mismo intervalo de 10 ms aplicando una tensión apropiada de detención o atrapamiento en los electrodos de placa. En un caso, tal como se muestra, con una tensión de 10 V de CC, no escapó ningún ion tras 10 ms.
- [0054] El resultado lustrado por la fig. 4 indica que los dispositivos de iones de la presente descripción se 35 pueden utilizar como divisores de haces de iones de gran eficiencia. Además, cuantos más electrodos se utilicen para construir la trampa, mayor será el número de cuadrupolos a través de los cuales puedan escapar los iones. Una consecuencia importante de este resultado es que si cada cuadrupolo está configurado para transmitir o expulsar de manera selectiva una estrecha ventana de m/z, entonces el análisis de m/z se puede llevar a cabo en paralelo. Por ejemplo, un dispositivo de trampa de iones de 17 x 17 x 17 (construido a partir de 17<sup>3</sup> – 15<sup>3</sup>, o 1538
- 40 electrodos) puede proporcionar un análisis paralelo para la espectrometría de masas de todos los iones almacenados en la trampa de iones en un intervalo de m/z de aproximadamente 1500 (el intervalo empleado actualmente para la espectrometría de masas ESI) con ventanas con una amplitud de 1 m/z. De este modo, se proporciona un instrumento que es potencialmente 1000 veces más eficiente que los espectrómetros de masas que se comercializan en la actualidad y que seleccionan de manera secuencial ventanas estrechas de m/z, al tiempo que
- 45 rechazan y, por tanto, desperdician, el resto de iones durante el análisis.

[0055] Además, se mostró que se puede impedir que los iones escapen a lo largo de los ejes de los cuadrupolos aplicando un potencial de CC apropiado en los electrodos de placa 56 que circundan la trampa. En estas condiciones, los iones se pueden almacenar en la trampa durante un largo periodo de tiempo, durante el cual 50 ocupan básicamente la totalidad del volumen interior de contención de iones. Al extrapolar los resultados experimentales de una trampa de iones simulada en la que se almacenaban 10<sup>7</sup> iones en ~300 mm<sup>3</sup>, se espera que un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción con unas dimensiones de 100 mm x 100 mm x 100 mm tenga una capacidad de ~3 x 10<sup>10</sup> iones.

- 55 **[0056]** También se puede utilizar un dispositivo de trampa de iones formado de acuerdo con la presente descripción como un dispositivo eficiente para el enriquecimiento en tiempo real de iones de carga múltiple, creando las condiciones para un agotamiento selectivo muy eficiente de iones de carga única.
  - [0057] El agotamiento selectivo de iones de carga simple resulta especialmente importante en sistemas que

utilizan fuentes de tipo MALDI y ESI. En ambos casos, en los espectros de masas de ruido químico predominan ampliamente los iones de carga única. Por tanto, a menudo resulta deseable eliminar estas especies de carga única del haz de iones, para enriquecer de manera eficaz el componente iónico de carga múltiple, que constituyen los principales portadores de información en muchos experimentos de proteómica. De hecho, en análisis llevados a

- 5 cabo con combinaciones de trampas de iones Orbitrap, resulta habitual descartar mediante filtrado los iones de carga única tras el barrido del Orbitrap de alta resolución para dedicar el máximo tiempo a obtener espectros MS/MS de las especies de carga múltiple, que contienen más información. No obstante, en principio es mejor filtrar estos iones de carga única desde el propio haz de iones en lugar de hacerlo posteriormente, por dos motivos. En primer lugar, dicho filtrado aumenta la relación señal/ruido y, en segundo lugar, la reducción de esta señal iónica no 10 deseada debería aumentar la capacidad de la trampa de iones para las especies iónicas de carga múltiple que
- resultan analíticamente útiles.

**[0058]** Se ha mostrado que al reducir el potencial de detención aplicado, por ejemplo, a los electrodos terminales en un cuadrupolo lineal, la barrera de potencial se puede reducir lo suficientemente como para permitir 15 que los iones de carga única escapen con mayor preferencia que los iones de carga múltiple.

[0059] Como se describe en el apartado del Ejemplo, en simulaciones de realizaciones del presente dispositivo de trampa de iones, se ha mostrado, sorprendentemente, que el agotamiento selectivo de iones de carga única se amplifica con una eficiencia superior a la que se logra con las trampas de iones conocidas, lo que da lugar 20 a un dispositivo muy eficiente para el enriquecimiento en tiempo real de iones de carga múltiple.

**[0060]** En referencia a la fig. 5, se muestra una realización de una trampa de iones cúbica con 296 electrodos de barra, que incluye al menos dos electrodos de placa 95 mantenidos a un potencial de CC (por ejemplo, +10 V) suficiente para contener iones en el volumen de contención de iones. Si se aplica el mismo potencial a cada una de

- 25 las placas, los iones se pueden contener durante un largo periodo de tiempo, por ejemplo, del orden de segundos a minutos. No obstante, si se reduce la tensión de CC de atrapamiento en uno o más de los electrodos de placa 96 hasta un valor suficientemente bajo, por ejemplo, ~+0,03 V, los iones de carga única escaparán a través de esta pequeña barrera de potencial, pero no así los iones de carga múltiple. Debido al gran número de canales de escape (N<sup>3</sup> (N 2)<sup>3</sup> 2 cuadrupolos), los iones de carga única se "evaporarán" rápidamente de la trampa, lo que 20 preparaisan una construição de carga el aprecipitor en construição de carga múltiple.
- 30 proporciona una oportunidad para el enriquecimiento en tiempo real de los iones de carga múltiple que entran y abandonan la trampa. La velocidad de la evaporación de iones de carga única se puede amplificar aumentando el número de placas mantenidas con el pequeño potencial de detención, y aumentando el número de canales 98.
- [0061] Dicho dispositivo en el que un sencillo ajuste de una única tensión eliminaría de manera eficiente 35 todos los iones de carga única del haz de iones tiene posibilidades de convertirse en una potente herramienta para mejorar la relación señal/ruido de los análisis de MS y para la tan deseada reducción discriminatoria del número de iones del haz sin desechar información.
- [0062] Un sistema de espectrometría de masas de la presente descripción incluye una realización de la trampa de iones. En una realización de la trampa de iones que se describe en la presente memoria, los múltiples cuadrupolos de la trampa de iones se pueden utilizar como filtros de masas, cada uno con una ventana de m/z diferente para condicionar el haz de iones para su análisis. Por consiguiente, en una realización, se proporciona un espectrómetro de masas paralelo que incluye un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción para llevar a cabo el análisis paralelo de todos los iones contenidos en el espacio delimitado (cubo).
- 45

**[0063]** En diversas realizaciones adicionales, la trampa de iones está adaptada para enriquecer de manera selectiva iones de carga múltiple en tiempo real a través del agotamiento de iones de carga única a medida que atraviesan la trampa de iones. Al reducir el ruido en la etapa de almacenamiento/filtrado/fragmentación del análisis, la relación señal/ruido global del análisis de MS se incrementa ventajosamente.

50

**[0064]** En referencia a la fig. 6, un espectrómetro de masas paralelo 100 incluye una realización de una trampa de iones 110 de acuerdo con la presente descripción, con múltiples salidas paralelas 115 de iones en múltiples ventanas de m/z. El espectrómetro de masas puede incluir una pluralidad de analizadores de masas 120 para el análisis de masas paralelo, con cada analizador de masas conectado con una abertura de salida 115

55 diferente. La trampa de iones 110, que en esta realización concreta incluye 296 electrodos de barra cilíndricos, puede estar conectada con cualquier fuente de iones 122 apropiada, tal como una fuente de ionización por electrospray (ESI), o una fuente de desorción/ionización láser asistida por matriz (MALDI) apropiada. El espectrómetro de masas 100 también puede incluir otros elementos conocidos en la técnica, tales como un dispositivo de colimación 124 para conectar los iones de la fuente de iones 122 con la trampa de iones 110. En la

realización que se muestra en la fig. 5, los iones se conectan con una zona de contención de iones 126 a través de una abertura 128 en uno 130 de los seis electrodos de placa que rodean la estructura cúbica de iones que circunda la zona de contención 126. En otras realizaciones, se pueden proporcionar aberturas de entrada adicionales para conectar fuentes de iones, o de otro tipo, adicionales.

El electrodo de placa 130 está preferentemente polarizado con una alta tensión de CC (por ejemplo, de aproximadamente +10 V) para la contención de los iones inyectados en la zona de contención 126. Otras placas 132 adicionales pueden estar polarizados con una pequeña tensión de CC, por ejemplo, de aproximadamente +0,03 V, para el agotamiento de iones de carga única. Tal como se explica más adelante, el agotamiento de estos iones de 10 carga única proporciona un espectrómetro de masas caracterizado por una alta relación señal/ruido.

**[0066]** La expulsión de iones de manera selectiva en función de su masa de realizaciones del dispositivo de trampa de iones con múltiples salidas filtradas por masa, tales como el dispositivo 110, se puede llevar a cabo de manera periódica o continua a lo largo de cualquiera de los  $N^3 - (N - 2)^3 - 2$  ejes de cuadrupolo, o de todos ellos. La

- 15 expulsión, o filtrado, de iones de manera selectiva en función de su masa se puede llevar a cabo de acuerdo con procedimientos conocidos en la técnica, tales como la expulsión de iones por resonancia de masas, o mediante una inyección de iones de resonancia en cada eje (canal) de cuadrupolo aportando una excitación de resonancia de banda ancha que contiene todas las frecuencias que excitan todos los iones contenidos en la trampa, a excepción de los iones caracterizados por una relación m/z concreta. Estos iones atraviesan el cuadrupolo para ser detectados
- 20 en la salida mediante múltiples detectores de iones, o mediante un gran conjunto de detectores, tal como un CCD, o en el caso del análisis de ensayos químicos y biológicos, un dispositivo de especies "depositadas suavemente".

[0067] Como debería quedar de manifiesto, el dispositivo de trampa de iones de la presente descripción es extremadamente versátil. Por ejemplo, una celda de colisión incluye un dispositivo de trampa de iones de la presente descripción. La zona de contención de iones de la celda de colisión incluye un gas amortiguador apropiado y los filtros de masas están formados por cuadrupolos en la superficie de la estructura poliédrica para acelerar los iones

[0068] En otras realizaciones, el dispositivo de trampa de iones de la presente descripción está configurado 30 como un reactor ion/ion, molécula/ion o fotón/ion.

#### EJEMPLO

- [0069] Se simuló el efecto del agotamiento selectivo de iones de carga única para una trampa de iones de 35 múltiples cuadrupolos de la presente descripción, tal como se describe en referencia a la fig. 5, por ejemplo, construida a partir de 296 cuadrupolos. Los resultados simulados mostraron que se perdieron 60 iones de los 100 iones atrapados en un principio con un MW (peso molecular) = 500 y una carga única z = 1 (m/z 501,007) tras 100 ms atrapados en la zona de contención, mediante la simulación de una tensión de detención de aproximadamente 0,03 V y una de RF de aproximadamente 5 V.
- 40

**[0070]** En comparación, para la misma estructura y condiciones, se perdieron 25 iones de los 100 iones con MW = 2500 y una carga z = 5 (la misma m/z de 501,007) tras 100 ms atrapados en la zona de contención. Los resultados de esta simulación confirman que los iones de carga única se agotan en la trampa al menos dos veces más rápido que los iones con carga 5+. Esperamos que en la realidad el efecto sea mucho mayor.

45

[0071] Debería resultar evidente para los expertos en la materia que las realizaciones descritas de la presente invención que se proporcionan en la presente memoria tienen únicamente fines ilustrativos y no limitativos, y han sido presentadas únicamente a modo de ejemplo. Tal como se describe en la presente memoria, todas las características descritas en la presente descripción se pueden sustituir por características alternativas que tengan 50 los mismos fines o similares, a menos que se estipule expresamente lo contrario.

Materia suplementaria

# **[0072]** 55

1. Un dispositivo de trampa de iones, que comprende:

de una estrecha ventana de m/z hacia la zona de contención.

una zona de contención para contener iones; una estructura poliédrica regular que comprende una pluralidad de electrodos que circunda la zona de contención, en la que la zona de contención para contener iones corresponde sustancialmente a un volumen circundado por la estructura poliédrica regular;

una pluralidad de vértices y una pluralidad de superficies poligonales regulares que definen la estructura poliédrica regular, incluyendo la pluralidad de electrodos un electrodo de vértice situado en cada vértice de la pluralidad de 5 vértices, estando al menos cuatro de los electrodos de vértice situados en una primera superficie de la pluralidad de superficies poligonales regulares, incluyendo la pluralidad de electrodos unos electrodos adicionales configurados para formar una pluralidad de cuadrupolos en la primera superficie; y

- una primera tensión de RF aplicada a electrodos alternos de la pluralidad de electrodos, y una segunda tensión de RF aplicada a electrodos intercalados entre los electrodos alternos, siendo la primera y la segunda tensión de RF de 10 igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, manteniéndose en fases opuestas los electrodos contiguos de la pluralidad de electrodos, con la pluralidad de electrodos configurada para formar una barrera de potencial para repeler los iones desde cada una de la pluralidad de superficies poligonales regulares que forman la estructura poliédrica regular.
- 15 2. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, que además comprende una pluralidad de electrodos de placa, estando cada electrodo de placa situado en el exterior de una superficie correspondiente de la pluralidad de superficies poligonales regulares, comprendiendo la pluralidad de electrodos de placa un electrodo de placa de entrada y un electrodo de placa de salida, comprendiendo el electrodo de placa de entrada una abertura de entrada para inyectar iones en la zona de contención, comprendiendo el electrodo de placa de salida una abertura de salida 20 para expulsar iones de la zona de contención, y en el que se aplica una primera tensión de detención de CC al
- 20 para explusar iones de la zona de contención, y en el que se aplica una primera tensión de detención de CC a electrodo de placa de entrada y al electrodo de placa de salida para contener los iones en la zona de contención.

El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, en el que la estructura poliédrica regular es cúbica, y en el que el dispositivo de trampa de iones incluye un total de N<sup>3</sup> – (N - 2)<sup>3</sup> electrodos y N<sup>3</sup> – (N - 2)<sup>3</sup> – 2 cuadrupolos, en los que 25 N representa un número entero mayor de 2.

4. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 2, en el que se aplica una segunda tensión de detención de CC, que es menor que la primera tensión de detención de CC, en el electrodo de placa situado en el exterior de la primera superficie, generando la segunda tensión de detención de CC una barrera de potencial suficientemente alta para

30 evitar el agotamiento de iones de carga múltiple y suficientemente baja para agotar los iones de carga única de la zona de contención.

5. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, en el que cada uno de la pluralidad de electrodos es una barra cilíndrica.

35

6. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, en el que cada uno de la pluralidad de electrodos tiene forma de esfera.

7. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, en el que la estructura poliédrica regular tiene una de las 40 siguientes formas: tetraédrica, octaédrica e icosaédrica.

8. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 3, en el que un volumen de la zona de contención es de aproximadamente 10 cm x 10 cm x 10 cm, teniendo el dispositivo de trampa de iones una capacidad de almacenamiento de iones superior a  $10^{10}$  iones.

45

9. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, en el que cada uno de la pluralidad de cuadrupolos está configurado como un filtro de masas para la expulsión selectiva de los iones desde la zona de contención en una ventana predeterminada de relación masa/carga iónica, correspondiendo una frecuencia de la primera tensión de RF y la segunda tensión de RF aplicadas a los electrodos en cada uno de la pluralidad de cuadrupolos a una frecuencia 50 característica asociada con la ventana concreta de masa/carga iónica.

10. Un espectrómetro de masas paralelo que comprende el dispositivo de trampa de iones del aspecto 9, comprendiendo el espectrómetro de masas paralelo una pluralidad de analizadores de masas conectados con la pluralidad de cuadrupolos para el análisis paralelo de los iones en cada ventana de masa/carga iónica.

55

11. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, en el que la pluralidad de cuadrupolos incluye al menos un cuadrupolo que se extiende longitudinalmente hacia el exterior desde la primera superficie, estando el al menos un cuadrupolo configurado para guiar los iones hacia el interior o hacia el exterior de la zona de contención.

12. Una celda de colisión que comprende el dispositivo de trampa de iones del aspecto 11, estando el al menos un cuadrupolo configurado para guiar los iones hacia la zona de contención en una ventana concreta de relación masa/carga, en la que la zona de contención también comprende un gas amortiguador, el dispositivo de trampa de iones comprende además un segundo cuadrupolo que se extiende longitudinalmente hacia el exterior desde una de 5 la pluralidad de superficies poligonales regulares, y el segundo cuadrupolo está configurado para expulsar iones fragmentados de la zona de contención.

13. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 1, configurado para su uso como uno de entre un reactor ion/ion, molécula/ion y fotón/ion.

10

14. Un dispositivo de trampa de iones, que comprende:

una zona de contención para contener iones;

una estructura poliédrica regular que incluye una pluralidad de electrodos que circundan la zona de contención, en la 15 que la zona de contención para contener iones corresponde sustancialmente a un volumen circundado por la estructura poliédrica regular;

una pluralidad de vértices y una pluralidad de superficies poligonales regulares que definen la estructura poliédrica regular, incluyendo la pluralidad de electrodos un electrodo de vértice situado en cada vértice de la pluralidad de vértices;

- 20 en el que cada una de la pluralidad de superficies poligonales regulares comprende al menos seis electrodos; y una primera tensión de RF aplicada a electrodos alternos de la pluralidad de electrodos que circunda la zona de contención, y una segunda tensión de RF aplicada a los electrodos intercalados entre los electrodos alternos, siendo la primera y la segunda tensión de RF de igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, manteniéndose en fases opuestas los electrodos contiguos de la pluralidad de electrodos, estando configurada la
- 25 pluralidad de electrodos para formar una barrera de potencial para repeler los iones desde cada una de la pluralidad de superficies poligonales regulares que forman la estructura poliédrica regular.

15. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 14, en el que la estructura poliédrica regular es cúbica, y en el que el dispositivo de trampa de iones incluye un total de N<sup>3</sup> – (N - 2)<sup>3</sup> electrodos, en los que N representa un número 30 entero mayor de 2.

16. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 14, en el que la pluralidad de electrodos comprende electrodos adicionales formados en cada una de la pluralidad de superficies poligonales regulares, estando los electrodos de vértice y los electrodos adicionales de cada superficie dispuestos para formar un conjunto bidimensional, 35 manteniéndose en fases opuestas los electrodos contiguos a lo largo de cada dimensión del conjunto bidimensional.

17. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 16, que además comprende un primer cuadrupolo que se extiende longitudinalmente hacia el exterior desde uno de los conjuntos bidimensionales de electrodos, con el primer cuadrupolo configurado para filtrar y guiar los iones de una ventana predeterminada de masa/carga hacia la zona de 40 contención.

- 18. Un espectrómetro de masas paralelo, comprendiendo el espectrómetro de masas paralelo: una fuente de iones que genera iones, una pluralidad de analizadores de masas y un dispositivo de trampa de iones conectado para recibir los iones emitidos por la fuente de iones y para expulsar los iones hacia la pluralidad de analizadores de 45 masas en función de la relación masa-carga, comprendiendo además la trampa de iones:
- 45 masas en función de la relación masa-carga, comprendiendo ademas la trampa de lones. una zona de contención para contener los iones recibidos desde la fuente de iones; una estructura poliédrica regular que comprende una pluralidad de electrodos que circundan la zona de contención, en la que la zona de contención para contener los iones corresponde sustancialmente a un volumen circundado por la estructura poliédrica regular;
- 50 una pluralidad de vértices y una pluralidad de superficies poligonales regulares que definen la estructura poliédrica regular, incluyendo la pluralidad de electrodos un electrodo de vértice situado en cada vértice de la pluralidad de vértices, estando al menos cuatro de los electrodos de vértice situados en una primera superficie de la pluralidad de superficies poligonales regulares, incluyendo la pluralidad de electrodos un conjunto de electrodos configurado para formar una pluralidad de cuadrupolos en la primera superficie; y
- 55 una primera tensión de RF aplicada a electrodos alternos de la pluralidad de electrodos, y una segunda tensión de RF aplicada a los electrodos intercalados entre los electrodos alternos, siendo la primera y la segunda tensión de RF de igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, y manteniéndose en fases opuestas los electrodos contiguos de la pluralidad de electrodos, estando la pluralidad de electrodos configurados para formar una barrera de potencial para repeler los iones desde cada superficie de la pluralidad de superficies poligonales

regulares que forman la estructura poliédrica regular; y

en el que cada uno de la pluralidad de cuadrupolos está configurado como un filtro de masas para la expulsión selectiva de los iones desde la zona de contención en una ventana predeterminada de masa/carga iónica, correspondiendo una frecuencia de la primera tensión de RF y la segunda tensión de RF aplicadas a los electrodos 5 en cada uno de la pluralidad de cuadrupolos a una frecuencia característica asociada con la ventana predeterminada

5 en cada uno de la pluralidad de cuadrupolos a una frecuencia característica asociada con la ventana predeterminada de masa/carga iónica, estando cada uno de la pluralidad de cuadrupolos conectado con un analizador de masas diferente perteneciente a la pluralidad de analizadores de masas para su análisis paralelo.

 19. El espectrómetro de masas paralelo del aspecto 18, que además comprende una pluralidad de electrodos de placa, estando cada electrodo de placa situado en el exterior de una superficie correspondiente de la pluralidad de superficies poligonales regulares, comprendiendo la pluralidad de electrodos de placa un electrodo de placa de entrada y un electrodo de placa de salida, comprendiendo el electrodo de placa de entrada una abertura de entrada para inyectar iones en la zona de contención, comprendiendo el electrodo de placa de salida una abertura de salida para expulsar iones de la zona de contención, y en el que se aplica una primera tensión de detención de CC al 15 electrodo de placa de entrada y al electrodo de placa de salida para contener los iones en la zona de contención.

20. El espectrómetro de masas paralelo del aspecto 19, en el que la pluralidad de electrodos también incluye un conjunto adicional de electrodos configurado para formar una pluralidad de segundos cuadrupolos en una segunda superficie de la pluralidad de superficies poligonales regulares, en el que se aplica una segunda tensión de RF de detención, que es menor que la primera tensión de RF de detención, en el electrodo situado en el exterior de la consuma de la consuma de la consuma de la portención de RF.

- segunda superficie, generando la segunda tensión de RF de detención una barrera de potencial suficientemente alta para evitar el agotamiento de los iones de carga múltiple y suficientemente baja para agotar los iones de carga única de la zona de contención a lo largo de un eje asociado con cada uno de la pluralidad de segundos cuadrupolos.
- 25 21. Una trampa de iones, que comprende:

una zona de contención para contener iones;

una estructura poliédrica regular que comprende una pluralidad de electrodos que circundan la zona de contención, en la que la zona de contención corresponde sustancialmente a un volumen circundado por la estructura poliédrica 30 regular;

una pluralidad de vértices y una pluralidad de superficies y bordes poligonales regulares que definen la estructura poliédrica regular,

incluyendo la pluralidad de electrodos un electrodo de borde situado a lo largo de cada borde de la pluralidad de estructuras poliédricas regulares, y al menos un electrodo adicional situado en cada una de la pluralidad de 35 superficies poligonales regulares; y

una primera tensión de RF aplicada a cada uno de los electrodos de borde, y una segunda tensión de RF aplicada a cada al menos un electrodo adicional, siendo la primera y la segunda tensión de RF de igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, siendo electrodos adyacentes el al menos un electrodo adicional y el electrodo de borde asociados con cada superficie, manteniéndose los electrodos adyacentes en fases opuestas, en

40 el que la pluralidad de está configurada para formar una barrera de potencial para contener los iones en la estructura poliédrica regular.

22. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 21, en el que la estructura poliédrica regular es un cubo, y en el que el al menos un electrodo adicional es un anillo cuadrado.

45

23. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 21, en el que cada al menos un electrodo adicional está centrado en cada una de las superficies de la pluralidad de superficies poligonales regulares.

24. El dispositivo de trampa de iones del aspecto 23, en el que el al menos un electrodo adicional es una esfera.

50

#### REIVINDICACIONES

1. Un dispositivo de trampa de iones, que comprende una zona de contención poliédrica vacía (54, 60, 68) para contener iones; y

una estructura poliédrica (50, 66) que cuenta con una pluralidad de superficies poligonales (70) que circundan la zona de contención (54, 60, 68), estando definida cada una de las superficies (70) de la estructura poliédrica (50, 66) por una pluralidad de vértices (55) y bordes;

- 10 en el que la estructura poliédrica (50, 66) comprende una pluralidad de electrodos (52) confinados en el área superficial de la estructura poliédrica (50, 66) con los electrodos situados en cada vértice de la pluralidad de vértices (55) de las superficies (70) y electrodos adicionales dispuestos a lo largo de los bordes y entre los bordes en un patrón regular en las superficies (70) de la estructura poliédrica (50, 66) que circunda la zona de contención (54, 60, 68) y
- 15

5

en el que los electrodos alternos de la pluralidad de electrodos (52) están configurados para la aplicación de una primera tensión de RF, y los electrodos intercalados entre los electrodos alternos están configurados para la aplicación de una segunda tensión de RF, de manera que la pluralidad de electrodos (52) forma una pluralidad de cuadrupolos (65) en cada superficie de la estructura poliédrica (50, 66), siendo la primera y la segunda tensión de

- 20 RF de igual amplitud y polaridad opuesta en un momento determinado, manteniéndose en fases opuestas los electrodos contiguos de la pluralidad de electrodos (52), y estando la pluralidad de electrodos (52) configurada para formar una barrera de potencial para repeler los iones desde cada una de las superficies poligonales (70) que forman la estructura poliédrica (50, 66).
- 25 2. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, que además comprende una pluralidad de electrodos de placa (56), estando cada electrodo de placa situado en el exterior de una superficie correspondiente de la pluralidad de superficies poligonales (70), comprendiendo la pluralidad de electrodos de placa (56) un electrodo de placa de entrada y un electrodo de placa de salida, comprendiendo el electrodo de placa de entrada una abertura de entrada para inyectar iones en la zona de contención (54, 60, 68), comprendiendo el electrodo de placa de salida
- 30 una abertura de salida para expulsar iones de la zona de contención (54, 60, 68), y en el que se aplica una primera tensión de detención de CC al electrodo de placa de entrada y al electrodo de placa de salida para contener los iones en la zona de contención (54, 60, 68).
- El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, en el que la estructura poliédrica (50, 66) es
   cúbica, y en el que el dispositivo de trampa de iones incluye un total de N<sup>3</sup> (N 2)<sup>3</sup> electrodos y N<sup>3</sup> (N 2)<sup>3</sup> 2 cuadrupolos, en los que N representa un número entero mayor de 2.

4. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 2, en el que se aplica una segunda tensión de detención de CC, que es menor que la primera tensión de detención de CC, en el electrodo de placa situado en el
40 exterior de la primera superficie, generando la segunda tensión de detención de CC una barrera de potencial suficientemente alta para evitar el agotamiento de iones de carga múltiple y suficientemente baja para agotar los iones de carga única de la zona de contención (54, 60, 68).

5. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, en el que cada uno de la pluralidad de 45 electrodos (52) es una barra cilíndrica.

6. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, en el que cada uno de la pluralidad de electrodos (52) tiene forma de esfera.

50 7. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, en el que la estructura poliédrica (50, 66) tiene una de las siguientes formas: tetraédrica, octaédrica e icosaédrica.

El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 3, en el que un volumen de la zona de contención (54, 60, 68) es de aproximadamente 10 cm x 10 cm x 10 cm, teniendo el dispositivo de trampa de iones 55 una capacidad de almacenamiento de iones superior a 10<sup>10</sup> iones.

9. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, en el que cada uno de la pluralidad de cuadrupolos (65) está configurado como un filtro de masas para la expulsión selectiva de los iones desde la zona de contención (54, 60, 68) en una ventana predeterminada de relación masa/carga iónica, correspondiendo una

frecuencia de la primera tensión de RF y la segunda tensión de RF aplicadas a los electrodos en cada uno de la pluralidad de cuadrupolos (65) a una frecuencia característica asociada con la ventana concreta de masa/carga iónica.

- 5 10. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, en el que la pluralidad de cuadrupolos (65) incluye al menos un cuadrupolo que se extiende longitudinalmente hacia el exterior desde la primera superficie, estando el al menos un cuadrupolo configurado para guiar a los iones hacia el interior o hacia el exterior de la zona de contención (54, 60, 68).
- El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1, configurado para su uso como uno de entre un 10 11. reactor ion/ion, molécula/ion y fotón/ion.

12. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 1.

en el que la estructura poliédrica (50, 66) comprende una pluralidad de superficies poligonales (70), comprendiendo 15 cada una de la pluralidad de superficies poligonales al menos seis electrodos.

El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 12, en el que la estructura poliédrica (50, 66) es 13. cúbica, y en el que el dispositivo de trampa de iones incluye un total de N<sup>3</sup> – (N - 2)<sup>3</sup> electrodos, en los que N representa un número entero mayor de 2.

20

14. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 12, en el que la pluralidad de electrodos (52) comprende electrodos adicionales formados en cada una de la pluralidad de superficies poligonales (70), estando los electrodos de vértice y los electrodos adicionales de cada superficie dispuestos para formar un conjunto bidimensional, manteniéndose en fases opuestas los electrodos contiguos a lo largo de cada dimensión del conjunto 25 bidimensional.

15. El dispositivo de trampa de iones de la reivindicación 14, que además comprende un primer cuadrupolo que se extiende longitudinalmente hacia el exterior desde uno de los conjuntos bidimensionales de electrodos, con el primer cuadrupolo configurado para filtrar y guiar los iones de una ventana predeterminada de 30 masa/carga hacia la zona de contención (54, 60, 68).

















