



Characterization of Chemical Profiling in Sanhuang Tablet by Ultra High Performance Liquid Chromatography Coupled with Quadrupole-Time-of-Flight Mass Spectrometry

Yingying ZHAO, Chun PENG, Ling TANG & Yan WANG *

College of Pharmacy and Chemistry, Dali University,
Dali 671000, China

SUMMARY. A high sensitivity, resolution and efficient ultra performance liquid chromatography combined with quadrupole time-of-flight mass spectrometry (UPLC-Q-TOF/MS) detection was implemented for structural characterization and identification of the overall chemical components of Sanhuang tablet, which was one of the most well known herbal preparation used widely in clinical applications. The chromatographic separation was carried out on an Acquity UPLC™ BEH C₁₈ column using a gradient elution. The MS detection was achieved on a Waters Q-TOF Xevo G2 mass spectrometer equipped with electrospray ionization source. A total of 28 constituents including 8 anthraquinones and 1 phenolic acid from *Rhei Radix et Rhizoma*, 18 flavonoids from *Scutellaria baicalensis* Georgi extractum and 1 alkaloid (berberine hydrochloride) were identified or tentatively characterized under the optimized conditions, among them, 8 ingredients were unequivocally identified by comparison with authentic standards in terms of the retention time, UV spectra and MS data, the rest constituents were tentatively identified by MS/MS characteristic fragmentation and related literatures searching. The developed UPLC-Q-TOF/MS method was expected to be accepted as a powerful and valuable pattern for comprehensive and systematic characterization of chemical information for Sanhuang tablet, which laid a solid foundation for the subsequent pharmacological substance basis study of the classic traditional Chinese medicine formula *in vivo*.

RESUMEN. Se implementó una cromatografía líquida de ultra alta eficiencia, alta sensibilidad y resolución combinada con detección de espectrometría de masas cuadrupolo de tiempo de vuelo (UPLC-Q-TOF/MS) para la caracterización estructural y la identificación de los componentes químicos generales de la tableta Sanhuang, una de las preparaciones herbales más conocidas y utilizada ampliamente en aplicaciones clínicas. La separación cromatográfica se llevó a cabo en una columna Acquity UPLC™ BEH C₁₈ usando una elución en gradiente. La detección de MS se logró en un espectrómetro de masas Waters Q-TOF Xevo G2 equipado con una fuente de ionización por electropulverización. Se identificaron un total de 28 componentes, incluidos 8 antraquinonas y 1 ácido fenólico de *Rhei Radix y Rhizoma*, 18 flavonoides de *Scutellaria baicalensis* Georgi extractum y 1 alcaloide (clorhidrato de berberina) en condiciones optimizadas. Entre ellos, 8 ingredientes fueron identificados de manera inequívoca en comparación con los estándares auténticos en términos del tiempo de retención, los espectros UV y los datos de MS; los componentes restantes se identificaron tentativamente mediante la fragmentación característica de MS/MS y la búsqueda de literatura relacionada. Se esperaba que el método desarrollado UPLC-Q-TOF/MS fuera aceptado como un patrón poderoso y valioso para la caracterización integral y sistemática de la información química de la tableta Sanhuang, que sentó una base sólida para el posterior estudio de base de sustancias farmacológicas de la medicina tradicional china clásica *in vivo*.

KEY WORDS: chemical components, identification, Sanhuang tablet, structural elucidation, UPLC-Q-TOF/MS.

* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* jessica9428@sina.com.