



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ
FACULTAD DE AGRONOMÍA Y VETERINARIA
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO



ANÁLISIS POR GC-MS DE COMPUESTOS FITOQUÍMICOS EN *Opuntia megarrhiza* (CACTACEAE), UNA ESPECIE MEXICANA EN PELIGRO DE EXTINCIÓN

Por:

Madeleyne Cupido Hernández

**Tesis presentada como requisito parcial para obtener el grado de
Maestra en Ciencias Agropecuarias**

Soledad de Graciano Sánchez, S.L.P.

Agosto 2021



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ
FACULTAD DE AGRONOMÍA Y VETERINARIA
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO



ANÁLISIS POR GC-MS DE COMPUESTOS FITOQUÍMICOS EN *Opuntia megarrhiza* (CACTACEAE), UNA ESPECIE MEXICANA EN PELIGRO DE EXTINCIÓN

Por:

Madeleyne Cupido Hernández

Tesis presentada como requisito parcial para obtener el grado de

Maestra en Ciencias Agropecuarias

Director de Tesis: Dr. Pablo Delgado Sánchez

Co-director: Dr. José Arturo de Nova Vázquez

Asesores:

Dr. Francisco Javier Pérez Vázquez

Dra. María de Luz Guerrero González

Soledad de Graciano Sánchez, S.L.P.

Agosto 2021



Análisis por GC-MS de compuestos fitoquímicos en *Opuntia megarrhiza* (Cactaceae),
una especie mexicana en peligro de extinción

por

Madeleyne Cupido Hernández

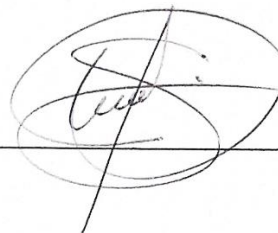
se distribuye bajo una

[Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional.](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

El trabajo titulado “Análisis por GC-MS de compuestos fitoquímicos en *Opuntia megarrhiza* (Cactaceae), una especie mexicana en peligro de extinción” fue realizado por la IAE Madeleyne Cupido Hernández como requisito parcial para obtener el grado de Maestra En Ciencias Agropecuarias, revisado y aprobado por el suscrito comité de tesis

Dr. Pablo Delgado Sánchez

Director



Dr. José Arturo de Nova Vázquez

Co-director



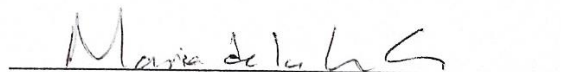
Dr. Francisco Javier Pérez Vázquez

Asesor



Dra. María de Luz Guerrero González

Asesora



Ejido Palma de la Cruz, municipio de Soledad de Graciano Sánchez, San Luis Potosí a los 23 días del mes de agosto de 2021

DEDICATORIA

Para mis hijos Sofía y Emilio Chiñas Cupido que son mi fuerza día con día, los amo.

A mi esposo Luis Eduardo por apoyar mis decisiones y por motivarme a crecer, te amo.

A mis padres Verónica y Fernando que siempre están a lado mío, los amo.

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Autónoma de San Luis Potosí y a la Facultad de Agronomía y Veterinaria.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca otorgada (CVU 1007054, No. de apoyo 745376) para la realización de mis estudios.

Al proyecto de investigación cooperativa internacional de la administración de desarrollo rural (RDA) de la República de Corea, con No. PJ012429012016 otorgado al Dr. Pablo Delgado Sánchez.

Al proyecto CONACyT con No. 2014-243454, responsable técnico Dr. José Arturo de Nova Vázquez.

A mi director de tesis Dr. Pablo Delgado por aceptarme en su laboratorio por su asesoría, apoyo y amistad en todo el proceso para lograr esta meta.

Al Dr. José Arturo de Nova por motivarme, guiarme y siempre apoyarme a lo largo de mis estudios y sobre todo por su amistad.

Al Dr. Francisco Javier Pérez por su entusiasmo y especialmente por enriquecer este trabajo.

A la Dra. Karen Beatriz por siempre responder mis dudas, apoyarme y la amistad que me ha brindado en esta etapa de mi carrera.

A la Dra. María de Luz Guerrero por su asesoría y revisión del manuscrito.

A la Dra Bertha que me brindo su espacio y amistad en su laboratorio.

Al ingeniero Francisco Javier Almendárez por abrirme las puertas de la Facultad de Agronomía.

A María Graciela Aguilar y Fidel Chiñas por siempre estar al pendiente de mis hijos.

A Pepe por ayudarme a estudiar.

A Beto por apoyarme a seguir estudiando en la Facultad de Agronomía.

A mis amigos agroecólogos por siempre hacerme sonreír y escucharme.

A mis compañeros del laboratorio de biotecnología de la facultad de agronomía, por su amistad y apoyarme en lo que necesitaba.

A Roberto por ser un gran amigo

A Mónica por motivarme a seguir adelante.

A Fabela por apoyarme en este proceso de la maestría.

A Candice por siempre acompañarme en la casa.

Índice

DEDICATORIA.....	iii
AGRADECIMIENTOS.....	iv
ÍNDICE DE FIGURAS.....	vii
RESUMEN.....	viii
SUMMARY	ix
INTRODUCCION	1
Justificación.....	3
Hipótesis.....	3
Objetivo General.....	3
REVISIÓN DE LITERATURA.....	4
La Familia Cactaceae	4
El Género <i>Opuntia</i>.....	5
<i>Opuntia megarrhiza</i>, la Especie en Estudio	6
Bioprospección de Compuestos Bioactivos en Plantas Medicinales	9
La Importancia de los Compuestos Fitoquímicos y la GC-MS.....	10
LITERATURA CITADA	13
GC-MS analysis of phytochemical compounds of <i>Opuntia megarrhiza</i> (Cactaceae), an endangered plant of Mexico	28
CONCLUSIÓN	56

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura		Página
1	Distribución geográfica de <i>Opuntia megarrhiza</i> , en el estado de San Luis Potosí, México.....	7
2	Esquema de <i>Opuntia megarrhiza</i>	8

RESUMEN

Opuntia megarrhiza es una planta endémica utilizada en la medicina tradicional mexicana para el tratamiento de fracturas de huesos en humanos y animales domésticos. Una de las técnicas más utilizadas para la detección y caracterización de compuestos fitoquímicos es la cromatografía de gases acoplada a la espectrofotometría de masas (GC-MS). Los objetivos del presente estudio fueron identificar y caracterizar los compuestos fitoquímicos presentes en individuos silvestres de *O. megarrhiza*. Se realizaron extractos con cloroformo y metanol que fueron analizados con GC-MS utilizando filtros de politetrafluoretileno y polivinilideno. Se detectaron 53 compuestos fitoquímicos, en los cuales 18 se han identificado previamente alguna actividad biológica. Los compuestos detectados son principalmente alcanos, alquenos, hidrocarburos aromáticos, ácidos grasos y cetonas. Se detectaron algunos patrones de fragmentación que se describen por primera vez para esta especie. Particularmente la actividad anti-inflamatoria de compuestos con altos índices de similitud en nuestros resultados, justifican el posible uso de la especie. Además, la variedad de metabolitos presentes en *O. megarrhiza* justifica el uso de esta planta en la medicina tradicional y representa una fuente de compuestos fitoquímicos con potencial biotecnológico.

Palabras clave: Bioprospección, endémica, metabolitos, perfil fitoquímico.

SUMMARY

Opuntia megarrhiza is an endemic plant used in Mexican traditional medicine for the treatment of bones fractures in humans and domestic animals. One of the most used technics for the detection and characterization of the structure of phytochemical compounds is the Gas Chromatography Coupled to Mass Spectrophotometry (GC-MS). The goals of the present study were to identify and characterize the phytochemical compounds present in wild individuals of *O. megarrhiza* using this technic. We used chloroform and methanol extracts from cladodes, filtered through a polytetrafluoroethylene and polyvinylidene filters, and analyzed in a gas chromatograph coupled to mass spectrometry detector with electronic impact using. We obtained 53 phytochemical compounds, 18 have previously identified with some biological activity. Most of these compounds are alkanes, alkenes, aromatic hydrocarbons, fatty acids, and ketones. We detected some fragmentation patterns that are described for the first time for this species. Particularly, the anti-inflammatory activity in compounds with a high similarity percentage in our results support its possible use. In addition, the variety of metabolites presents in *O. megarrhiza* justifies the medicinal use of this plant in traditional medicine and highlight it as a source of phytochemical compounds with potential biotechnology.

Keywords: Bioprospection, endemic, metabolites, phytochemicals screening.

INTRODUCCION

Las especies vegetales al ser organismos sésiles han desarrollado diversos mecanismos para adaptarse a su entorno, entre ellos, la producción de compuestos fitoquímicos (Yang *et al.*, 2018; Arnold *et al.*, 2019) que desempeñan una variedad de funciones para su sobrevivencia (Kroymann, 2011; Berini *et al.*, 2018). Se ha calculado que las plantas tienen unos 200,000 metabolitos diferentes tanto primarios como secundarios (Pichersky y Gang, 2000; Fiehn, 2001; Fiehn, 2002), entre los que se pueden mencionar aminoácidos, ácidos grasos, carbohidratos, lípidos y otros (Velmurugan y Anand, 2017; Banakar y Jayaraj, 2018). La familia Cactaceae representa un linaje evolutivo tan diverso y propio para América, (Barthlott and Hunt, 1993; Hunt *et al.*, 2006; Hernández-Hernández, *et al.*, 2011). Las especies de esta familia se han adaptado y evolucionado tanto en climas áridos y semiáridos lo que sugiere la presencia de compuestos fitoquímicos implicados en este proceso. Por lo tanto, el análisis de los miembros de esta familia representa una oportunidad para descubrir nuevos compuestos que pudieran ser de gran interés para la biotecnología debido a sus diversas aplicaciones como la farmacéutica (Aruwa *et al.*, 2018), para la formulación de raciones en alimentos debido a su gran aporte nutricional tanto en animales como en humanos (Kris-Etherton *et al.*, 2002; Gil-Chávez *et al.*, 2013; Kudanga *et al.*, 2017; Aruwa *et al.*, 2018) y en la agricultura, algunos de estos compuestos se utilizan para el control de microorganismos fitopatógenos (De Corato *et al.*, 2010).

Una de las técnicas que ha tomado gran relevancia para la identificación de compuestos fitoquímicos (metabolitos) en diferentes tipos de matrices es la metabolómica, la cual es una disciplina dedicada al estudio de los metabolitos presentes en diferentes tejidos, fluidos, cultivos celulares y organismos completos. La metabolómica utiliza diferentes plataformas analíticas como la Resonancia Magnética Nuclear, la Cromatografía de líquidos-MS y la Cromatografía de Gases acoplada a la Espectrometría de Masas (GC-MS, por sus siglas en inglés; Robertson, 2005). Esta última es una de las técnicas mayormente utilizadas en la investigación metabolómica, con la que se puede llegar a

determinar un patrón o perfil de metabolitos característicos en las plantas por medio de la selección, detección y caracterización (Harrigan y Goodacre, 2012; Fiehn, 2016) Las especies del género *Opuntia* (Cactaceae) tienen la capacidad de sintetizar compuestos fitoquímicos que pueden llegar a poseer actividades biológicas como antiinflamatorio, analgésico, antioxidante hipoglucemiante, hipocolesterolemia (Perfumi y Tacconi, 1996; Park, *et al.*, 2001; Ghasemzadeh y Ghasemzadeh, 2011), antiproliferativo, (Serra *et al.*, 2013; Yeddes *et al.*, 2013a; Yeddes *et al.*, 2013b), así como propiedades nutraceuticas, anticancerígenas y antivirales (Feugang, 2006; Bensadón *et al.*, 2010). Varios estudios en *Opuntia* se han centrado en el análisis de compuestos fitoquímicos con el fin de descubrir y producir nuevas moléculas que pudieran tener alguna aplicación para la salud, agricultura o la industria (Yahia y Mondragon-Jacobo, 2011; Weli *et al.*, 2019).

En este trabajo de investigación, se utilizó *Opuntia megarrhiza* Rose una especie endémica de México, conocida localmente como "nopal camote, nopalillo o sacasil" (Figura 1). Su distribución se encuentra restringida a algunas regiones del Desierto Chihuahuense, particularmente en el Estado de San Luis Potosí (Hernández *et al.*, 2001). Actualmente en la Lista Roja de la UICN se encuentra catalogada como en peligro de extinción (Hernández *et al.*, 2013). *O. megarrhiza* se ha localizado en hábitats como los matorrales xerófitos y los bosques templados (Hernández *et al.*, 2001; Segura-Venegas y Rendón-Aguilar, 2016). Esta especie se caracteriza por sus raíces que son grandes y pivotantes en comparación con sus cladodios que son relativamente pequeños (Bravo-Hollis y Sánchez-Mejorada, 1991; Hernández y Godínez, 1994). Dicha especie es utilizada por los lugareños en el tratamiento de fracturas de huesos, tanto en animales (cabras, caballos y vacas) como en humanos (Hernández *et al.*, 2001). En el Cerro el Borrego (Guadalcazar, San Luis Potosí); la raíz se aplica directamente en las fracturas, pero en otras localidades como el Xoconoxtle (Zaragoza, San Luis Potosí) la gente utiliza los cladodios o la planta entera, y en algunas ocasiones se mezcla con partes de nopal "cardón" (*Cylindropuntia* spp), para hacer una pasta, que se aplica con vendajes en las lesiones, que a los pocos días se seca provocando al final un material semiduro con una función similar a las férulas de yeso. (Segura-Venegas y Rendón-Aguilar, 2016).

Justificación

Opuntia megarrhiza es utilizada en la medicina tradicional mexicana para el tratamiento de fracturas de huesos, lo que la resalta como una especie endémica de México con importancia etnofarmacológica. Actualmente, no existen investigaciones previas sobre los compuestos fitoquímicos bioactivos presentes en esta especie, por lo que la presente investigación contribuye al conocimiento básico de la especie, y a la bioprospección de compuestos activos con aplicaciones potenciales en diferentes áreas de la ciencia.

Hipótesis

Opuntia megarrhiza contiene compuestos metabólicos con actividades biológicas asociadas a su uso en la medicina tradicional.

Objetivo General

Identificar por medio de GC-MS los compuestos fitoquímicos volátiles presentes en cladodios de individuos silvestres de *Opuntia megarrhiza*.

REVISIÓN DE LITERATURA

La Familia Cactaceae

La familia de Cactaceae es uno de los grupos más representativos y diversos de angiospermas en América (Estrada-Arellano *et al.*, 2018), con más de 1,450 especies y 127 géneros (Barthlott y Hunt 1993; Hunt *et al.*, 2006; Hernández-Hernández *et al.*, 2011). Estudios recientes han confirmado que en México hay más de 600 especies, de las cuales alrededor del 80% son endémicas (Guzmán *et al.*, 2003; Ortega-Baes y Godínez Alvarez, 2006). En la actualidad una gran cantidad de cactáceas se encuentran amenazadas o en peligro de extinción (Hunt, 1999; Lüthy, 2001; SEMARNAT, 2002; UICN, 2003). Más de 60 especies están incluidas en el Libro Rojo de la Unión Internacional para la Conservación de la Naturaleza (UICN, 2003) y unas 40 especies están incluidas en el Apéndice I de la Convención sobre el Comercio Internacional de Especies Amenazadas de Fauna y Flora Silvestres (CITES). Asimismo, alrededor de 200 especies han sido incluidas en la lista roja de la agencia ambiental mexicana (Norma Oficial Mexicana; SEMARNAT, 2002). Muchas de estas especies tienen una destacada importancia cultural, económica y biológica, esta última debido a las diversas interacciones que se dan entre animales y plantas (Nobel, 2002). Sin embargo, estas plantas presentan una alta vulnerabilidad debido a perturbaciones ambientales como la distribución geográfica restringida, largos ciclos de vida, así como bajas tasas de crecimiento individual (Hernández y Godínez 1994; Godínez-Alvarez *et al.*, 2003) y actividades antropogénicas que afectan a las poblaciones, como la recolección ilegal, mercado negro o la modificación del hábitat en el que se encuentran (Oldfield 1997; Hunt 1999; Boyle y Anderson, 2002). La familia de Cactaceae es uno de los grupos vegetales que inmediatamente son reconocibles por sus inusuales formas de crecimiento, que reflejan adaptaciones en ambientes áridos como semiáridos, donde las condiciones implican un estrés constante causado por factores bióticos y abióticos (Gibson y Nobel, 1986). Este estrés produce compuestos fitoquímicos derivados de rutas metabólicas que realiza la planta (Scossa *et al.*, 2018). Se ha observado que plantas de la misma familia usualmente sintetizan compuestos de clases similares, debido a la presencia de vías biosintéticas parecidas y enzimas reguladoras (Ntie-Kang *et al.*, 2013), mientras que en otros estudios se ha

reportado que la producción de compuestos puede llegar a variar dependiendo del orden taxonómico, así como la diferencia entre las partes vegetales (raíz, tallo, frutos, flores y hojas) (Lee *et al.*, 2015; Son *et al.*, 2016). En general, factores genéticos, el estado nutricional y las condiciones geo-climáticas influyen en la composición y acumulación fotoquímica en las diversas partes de la planta (Dias *et al.*, 2016).

El Género *Opuntia*

México es considerado el centro de origen de *Opuntia*, el cual es uno de los géneros más representativo de la familia Cactaceae (Barthlott y Hunt, 1993; Reyes-Agüero *et al.*, 2004), adaptado a condiciones climáticas extremas con un rápido crecimiento en suelos pobres (Aragona, *et al.*, 2018). Sus especies se caracterizan por presentar cladodios en forma de raqueta y aréolas con glóquidas (ahuates, en náhuatl), que son espinas reducidas, dichas estructuras están adaptadas para la absorción y retención de agua (Scheinvar *et al.*, 2015).

En México las especies de *Opuntia* son de gran importancia pues se emplean como alimento para humanos y animales, así como en la elaboración de mermeladas, dulces, bebidas y edulcorantes naturales (Sáenz *et al.*, 1998), cercos vivos, combustible (González-Durán *et al.*, 2001; Reyes-Agüero *et al.*, 2005), y para reforestar zonas áridas, semiáridas y degradadas (Bravo-Hollis y Scheinvar, 1999; González *et al.*, 2001). También son aprovechadas en áreas como la industria química y alimentaria (Lefsih *et al.*, 2017), la cosmética, la agroquímica (Guaadaoui *et al.*, 2014) y para el tratamiento de aguas residuales (Zito *et al.*, 2013). Diferentes culturas ancestrales y actuales han utilizado especies de *Opuntia* en la medicina tradicional, debido a la actividad biológica que poseen sus compuestos fitoquímicos con estructuras únicas y complejas (Shedbalkar *et al.*, 2010; Bargougui *et al.*, 2013).

Los compuestos bioactivos se producen en cualquier planta en uno o varios de sus órganos y pueden utilizarse con fines terapéuticos, o bien son precursoras para la síntesis de medicamentos útiles para diversos padecimientos (Sofowora *et al.*, 2013). Es importante mencionar que, de acuerdo con la especie, el cultivar, las condiciones

climáticas y el tipo de suelo, los compuestos y la concentración puede llegar a cambiar (Paiva *et al.*, 2016).

De acuerdo con diversas investigaciones se ha comprobado que el género *Opuntia* produce compuestos como ácido gálico, terpenos, flavonoides, betalaínas, carotenoides, ácidos grasos, alcanos, terpenoides, taninos entre otros (Aruwa *et al.*, 2018).

Los extractos de cladodios en especies de *Opuntia* han sido evaluados para el tratamiento para la gastritis, hiperglucemia, hipercolesterolemia, arteriosclerosis, diabetes, hipertrofia prostática, para la regulación inmunológica del tracto gastrointestinal, como acción hipolipidémica y antioxidantes (Galati *et al.*, 2003; El-Mostafa *et al.*, 2014). Las flores han sido poco estudiadas, sin embargo, en la medicina tradicional se utilizan por su efecto diurético (Ammar *et al.*, 2012). Asimismo, las decocciones e infusiones que se preparan a partir de las flores son ricos en minerales como el potasio y calcio además de poseer compuestos como polifenoles, flavonoides y taninos (Ammar *et al.*, 2015). Las semillas contienen calcio, potasio, magnesio y fósforo en niveles elevados, por lo que son una fuente de micro y macrominerales (Al-Juhaimi y Özcan 2013). Se ha reportado que *O. dillenii* tiene efectos benéficos para la salud humana como antiinflamatoria, analgésica, hipoglucemiante e hipocolesterolemia (Perfumi y Tacconi, 1996; Park *et al.*, 2001) y con presencia de antioxidantes (Ghasemzadeh y Ghasemzadeh 2011).

***Opuntia megarrhiza*, la Especie en Estudio**

La especie *O. megarrhiza* Rose conocida localmente en su área de distribución como “nopal camote o nopalillo” es una especie endémica, que se distribuye en regiones del desierto Chihuahuense y San Luis Potosí, México, en pastizales perturbados, chaparrales y bosques templados dentro de serranías (Hernández *et al.*, 2001). En San Luis Potosí, México, esta especie se ha localizado escasamente en los municipios de Cerro de San Pedro, Guadalcázar y Zaragoza (Figura 1), en la Sierra de Álvarez, Sierra de la Trinidad y Monte Caldera, donde los suelos suelen ser de arcilla oscura y profunda con afloramientos de piedra caliza (Hernández *et al.*, 2001).

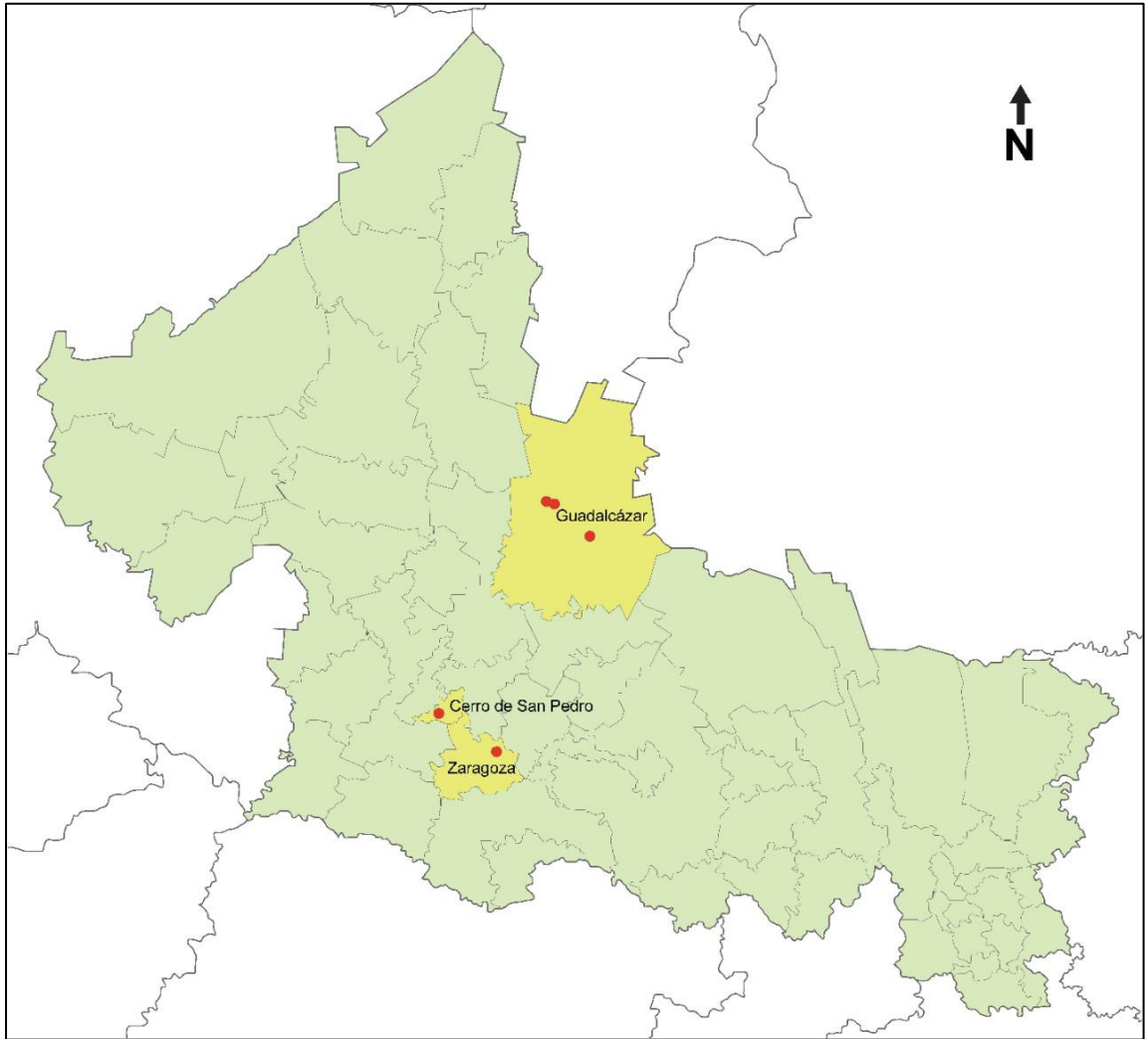


Figura 1. Distribución geográfica de *Opuntia megarrhiza* Rose, en el estado de San Luis Potosí, México. Modificado de Hernández *et al.* (2001).

De acuerdo con Bravo-Hollis y Sánchez-Mejorada (1999) y Hernández y colaboradores (2001), *O. megarrhiza* se caracteriza por tener raíces suculentas, largas, gruesas y profundas, de 30 a 60 cm de longitud con 5 a 10 cm de diámetro. Los tallos son ramificados y pequeños, de 25 a 40 cm de alto y con un diámetro de 5 a 10 cm. Por lo general, los cladodios son relativamente pequeños en comparación con otras especies del género, de color verde olivo y en algunas ocasiones rojizo en la parte de la areola. Las espinas son blancas, marrón claro o gris, con puntas amarillentas o marrones castañas o grises, de 3 a 5, aciculares, de 0.5 a 3.5 cm de longitud. Las flores son de color amarillo limón o bien de color rosado, de 3 a 5.5 cm de longitud; 2.5 a 6 cm de diámetro en antesis.

Los frutos son ovoides de 2.5 cm de longitud y semillas de color amarillo cremoso, aproximadamente de 4 mm de diámetro (Figura 2, Hernández *et al.*, 2001).

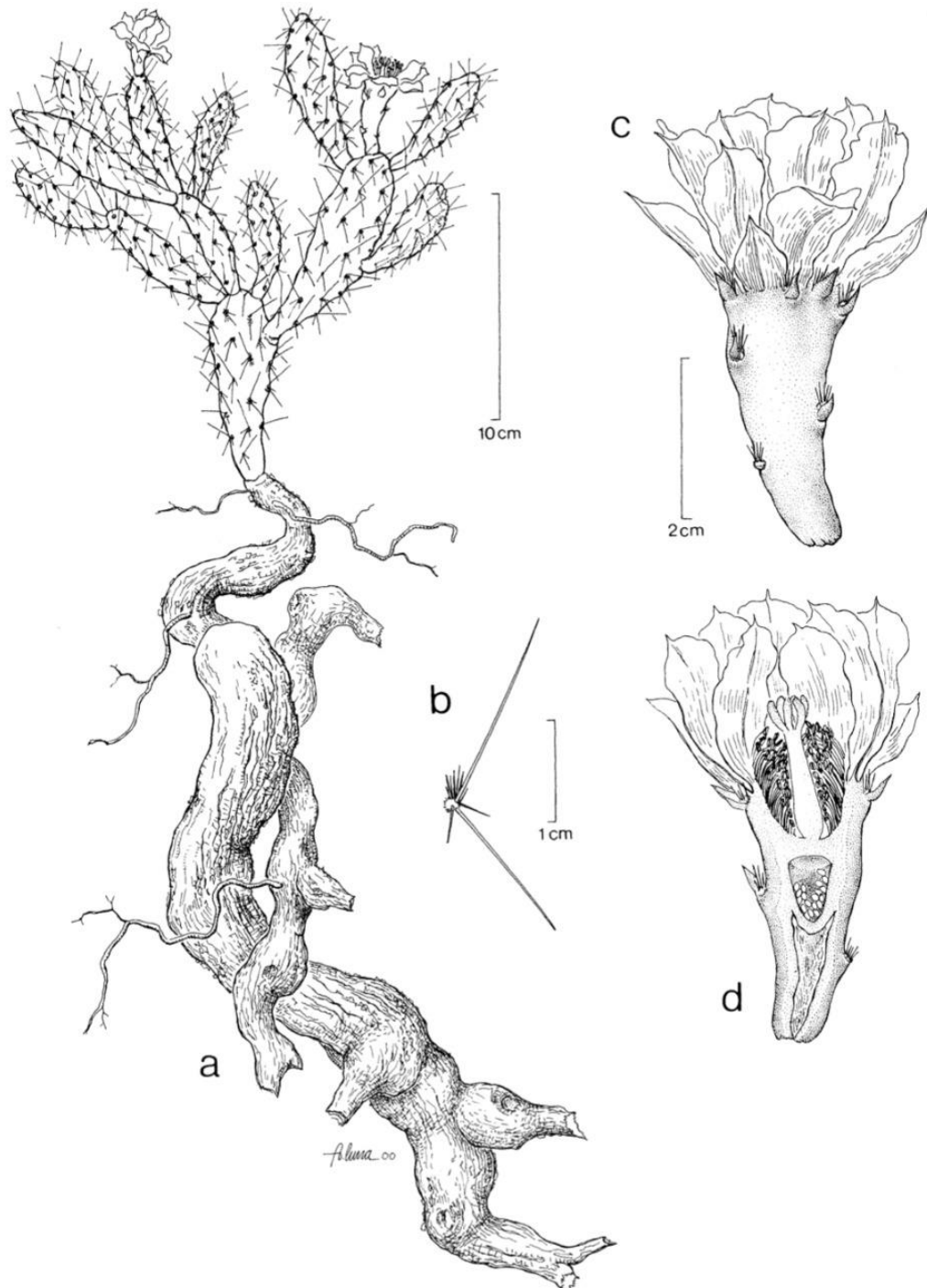


Figura 2. Esquema de *Opuntia megarrhiza* Rose: a) Planta adulta con sus características raíces pivotantes. b) Areola, c y d) Flor. Tomado de Hernández *et al.* (2001).

De acuerdo con Hernández y colaboradores (2001), la raíz de *O. megarrhiza* es utilizada en el estado de San Luis Potosí para tratar fracturas de huesos tanto en animales como en humanos. Por ejemplo, en la localidad el Cerro el Borrego (Mpio. Guadalcázar) la raíz se aplica directamente en la fractura. En otras localidades como el Xoconoxtle (Mpio. Zaragoza), se ocupan desde el cladodio a toda la planta y se mezcla con especies de *Cylindropuntia*, para formar una pasta que posteriormente se unta en el área dañada y se cubre con vendas.

Debido a su distribución, las poblaciones de *O. megarrhiza* están expuestas a altas y bajas temperaturas por lo que se ha reportado que los cladodios individuales pueden caducar, sin embargo, el rizoma tiene la capacidad de regenerar estructuras (Hernández *et al.*, 2001; Segura-Venegas y Rendón-Aguilar, 2016). La especie se encuentra catalogada en peligro de extinción de acuerdo con la Lista Roja de la IUCN debido a diversas actividades antropogénicas que afectan la población que están a su alrededor (IUCN, 2009). Además, esta especie se encuentra constantemente expuesta a incendios naturales y procesos antropogénicos, así como al forrajeo por animales (Hernández *et al.*, 2001) lo que la coloca en mayor riesgo.

Bioprospección de Compuestos Bioactivos en Plantas Medicinales

La etnofarmacología se define como la exploración científica interdisciplinaria de los agentes biológicamente activos que se emplean tradicionalmente (Süntar, 2020). Esta ciencia se apoya de diversas áreas como la botánica, la química y la farmacología. Desde tiempos coloniales, en México se desarrollaron dos trabajos importantes que recopilan las hierbas medicinales que utilizaban los pobladores (Ávila-Blomberg, 2012, Sánchez Ruiz *et al.*, 2012). El primero, desarrollado por Martín de la Cruz en 1552 quien elaboró un documento en náhuatl con ilustraciones a color, fue traducido al latín por Juan Badiano y conocido como “Códice De la Cruz-Badiano”, el cual contiene 263 plantas, que se distribuyen en 53 géneros y 61 familias. El segundo trabajo, es el desarrollado entre 1558 a 1582 por Fray Bernardino de Sahagún quien realizó el “Códice Florentino” que es una enciclopedia en 12 volúmenes donde abarca todos los aspectos de la vida y la cultura de los antiguos pueblos del Centro de México. Estos dos documentos muestran la importancia de varias plantas medicinales durante el período colonial y probablemente

reflejan hasta cierto punto su importancia desde antes de la conquista española. En la actualidad, en México se han registrado más de 3,000 plantas medicinales, pero sólo una pequeña proporción (1-2%) ha sido estudiada (Villaseñor 1993, Espejo-Serna *et al.*, 2004, Salazar-Aranda *et al.*, 2011). La medicina tradicional forma parte del proceso evolutivo de los seres humanos y explica como interactúan con las plantas descubriendo prácticas y técnicas de transformación, en la actualidad muchos medicamentos tienen su origen en la etnofarmacología y la medicina tradicional (Helmstädter y Staiger, 2014). Recientemente, se ha prestado mucha atención a los estudios farmacognósticos, fitoquímicos y farmacológicos de las plantas medicinales tradicionales ya que se han identificado una amplia gama de compuestos con diversas actividades biológicas derivados de plantas. Por lo tanto, estos estudios representan una oportunidad para identificar fuentes potenciales y nuevas moléculas para el desarrollo de fármacos (Süntar, 2020).

La Importancia de los Compuestos Fitoquímicos y la GC-MS

En los últimos años el descubrimiento de compuestos fitoquímicos en especies vegetales ha tomado gran importancia debido a las diversas actividades biológicas que poseen (Valtierra-Rodríguez *et al.*, 2010; Aremu *et al.*, 2011). Actualmente las investigaciones se enfocan en el análisis de compuestos para nuevos fármacos (Yahia y Mondragón, 2011), sin embargo, son escasos los estudios farmacéuticos para la identificación de principios activos. En México se ha estudiado a fondo tan solo el 1% de plantas medicinales (González-Stuart 2010), a pesar de que cerca del 25% de los fármacos utilizados por la humanidad se derivan de productos naturales en donde el uso etnobotánico ha sido una pieza clave para la identificación de estos compuestos (De Luca *et al.*, 2012; Berini *et al.*, 2018).

Se estima que existen cerca de 200,000 metabolitos en el reino vegetal (Lisec *et al.*, 2006), es por ello que la metabolómica y la transcriptómica han sido fundamentales para la investigación y comprensión de dichos metabolitos, las vías metabólicas implicadas en su síntesis y las diferencias entre la composición de metabolitos en distintas etapas fisiológicas (Rejeb *et al.*, 2014). Estas ciencias también han permitido desarrollar estrategias para la detección, caracterización, aislamiento, producción de compuestos naturales en ambientes controlados, así como el descubrimiento de nuevos compuestos

(Osorio-Esquivel *et al.*, 2011; Hubert *et al.*, 2017; Liu y Locasale, 2017 Allard *et al.*, 2018).

Por su parte, la cromatografía de gases (GC, por sus siglas en inglés), descrita por primera vez por Martin y James en 1952, es un Método de Separación que se fundamenta en una distribución “asimétrica” de los analitos o componentes ya sea volátiles o semivolátiles de una muestra en una mezcla, (Rödel y Wölm, 1987; Schomburg, 1990; Pool y Poole, 1991; Ettre y Hinshaw, 1993). En la GC la muestra se inyecta en la fase móvil, la cual es un gas inerte (He, H₂, N₂, Ar). En esta fase, los distintos componentes de la muestra pasan a través de la fase estacionaria que se encuentra fijada en una columna que tiene la capacidad de separar componentes con una alta resolución (Hübschmann, 2009). La elución de los componentes de la columna GC depende de 3 factores: 1) la naturaleza química del analito, 2) tipo de ambas fases, móvil y estacionaria y 3) afinidad del analito con la fase móvil y estacionaria (Stashenko y Martínez, 2010). Sin embargo, una vez que se logra separar, detectar e incluso cuantificar los compuestos de una mezcla en el GC, el único dato del que se dispone para la identificación de cada uno de los compuestos es el tiempo de retención de los correspondientes picos cromatográficos. Lo anterior, resulta insuficiente para la identificación de compuestos, es por eso que el uso acoplado de la espectrometría de masas (MS, por sus siglas en inglés) ayuda a identificar de manera casi inequívoca cualquier compuesto. La MS se basa en la obtención de iones y fragmentación de moléculas que puede suceder por ionización con impacto de electrones (EI) o por ionización química (CI) tanto en iones positivos como negativos, una vez obtenidos estos iones, se separan de acuerdo a su masa y su carga (m/z), y finalmente se detectan por medio de un dispositivo (Hübschmann, 2009). Por lo tanto, la asociación de GC y MS da lugar a una técnica combinada que permite la separación e identificación de mezclas complejas, la GC-MS (Stashenko y Martínez, 2010).

La GC-MS es el método más utilizado para la detección de grupos funcionales y la identificación y caracterización de la estructura de los compuestos fitoquímicos, incluidos varios compuestos terapéuticos bioactivos que están presentes en las plantas medicinales (Fan *et al.*, 2018; Satapute *et al.*, 2019). Esta herramienta es una técnica, rápida y precisa, para detectar diversos compuestos, incluyendo alcoholes, alcaloides, nitrocompuestos,

hidrocarburos de cadena larga, ácidos orgánicos, esteroides, ésteres y aminoácidos, teniendo como ventaja que se requiere un pequeño volumen de extractos vegetales (Razack *et al.*, 2015). Por su parte, los avances tecnológicos en la GC-MS, han permitido que la metabolómica sea aplicada en campos de investigación, como las ciencias biomédicas y agrícolas (Harvey *et al.*, 2015). Es importante destacar que la GC-MS, así como otros sistemas analíticos, no cubre todo el metaboloma, sin embargo, alcanza un rango relativamente amplio de diversos compuestos como ácidos orgánicos, aminoácidos, azúcares, alcoholes de azúcar (alditales), entre otros compuestos (Sumner *et al.*, 2003). En los últimos tiempos, los avances en la metabolómica de las plantas han permitido la selección, aislamiento e identificación de metabolitos secundarios tanto individuales como desconocidos, así como la comprensión de las rutas metabólicas que ocurren dentro de la planta.

LITERATURA CITADA

- Al-Juhaimi, F. & Özcan, M. M. (2013). Determination of some mineral contents of prickly pear (*Opuntia ficus-indica* L.) seed flours. *Environmental monitoring and assessment*, 185(5), pp. 3659–3663. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10661-012-2817-4>
- Allard, P. M., Bisson, J., Azzollini, A., Pauli, G. F., Cordell, G. A., & Wolfender, J. L. (2018). Pharmacognosy in the digital era: shifting to contextualized metabolomics. *Current Opinion in Biotechnology*, 54, pp. 57–64. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.copbio.2018.02.010>
- Ammar, I., Bardaa, S., Mzid, M., Sahnoun, Z., Rebai, T., Attia, H., & Ennouri, M., (2015). Antioxidant, antibacterial and in vivo dermal wound healing effects of *Opuntia* flower extracts, *International Journal of Biological Macromolecules*, 81, pp. 483–490. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2015.08.039>
- Ammar, I., Ennouri, M., Khemakhem, B., Yangui, T., & Attia, H. (2012). Variation in chemical composition and biological activities of two species of *Opuntia* flowers at four stages of flowering, *Industrial Crops and Products*, 37(1), pp. 34–40. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2011.11.027>
- Andrade-Cetto, A., & Wiedenfeld, H. (2011). Anti-hyperglycemic effect of *Opuntia streptacantha* Lem. *Journal of Ethnopharmacology*, 133(2), pp. 940–943. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jep.2010.11.022>
- Aragona, M., Lauriano, E. R., Pergolizzi, S., & Faggio, C. (2018). *Opuntia ficus-indica* (L.) Miller as a source of bioactivity compounds for health and nutrition. *Natural Product Research*, 32(17), pp. 2037–2049. DOI: <https://doi.org/10.1080/14786419.2017.1365073>
- Aremu, A. O., Amoo, S. O., Ndhlala, A. R., Finnie, J. F., & Van Staden, J. (2011). Antioxidant activity, acetylcholinesterase inhibition, iridoid content and mutagenic evaluation of *Leucosidea sericea*. *Food and Chemical Toxicology*, 49(5), pp. 1122–1128. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fct.2011.02.003>

- Arnold, P. A., Kruuk, L. E. & Nicotra, A. B. (2019). How to analyse plant phenotypic plasticity in response to a changing climate. *New Phytol.*;222(3), pp 1235– 41. DOI: <https://doi.org/10.1111/nph.15656>
- Aruwa, C. E., Amoo, S. O., & Kudanga, T. (2018). *Opuntia* (Cactaceae) plant compounds, biological activities and prospects—A comprehensive review. *Food Research International*, 112, pp. 328–344. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.06.047>
- Ávila-Blomberg, A. (2012). Yerba del coyote, veneno del perro: la evidencia léxica para identificar plantas en el Códice de la Cruz Badiano. *Acta botánica mexicana*, (100) pp 489-526.
- Banakar, P., & Jayaraj, M. (2018). GC-MS analysis of bioactive compounds from ethanolic leaf extract of *Waltheria indica* Linn. and their pharmacological activities. *International Journal of Pharmaceutical Sciences And Research*, 9, pp. 2005–2010. DOI: [https://doi:10.13040/IJPSR.0975-8232.9\(5\).2005-10](https://doi:10.13040/IJPSR.0975-8232.9(5).2005-10)
- Bargougui, A., Le Pape, P., & Triki, S. (2013). Antiplasmodial efficacy of fruit extracts and cladodes of *Opuntia ficus-indica*. *Journal of Natural Sciences Research*, 3(6), pp. 31–37.
- Barthlott, W., & Hunt, D. (1993). “Cactaceae”. En Kubitzki, K. Rohmer, J. G. & Bittridi, V. (Eds.), *The families and Genera of Vascular Plants*. pp. 161–197. Springer, Germany.
- Bensadón, S., Hervert-Hernández, D., Sáyo-Ayerdi, S. G., & Goñi, I. (2010). By-Products of *Opuntia ficusindica* as a Source of Antioxidant Dietary Fiber. *Plant Foods for Human Nutrition*, 65, pp. 210–216. Doi: <https://doi.org/10.1007/s11130-010-0176-2>
- Berini, J. L., Brockman, S. A., Hegeman, A. D., Reich, P. B., Muthukrishnan, R., Montgomery, R. A. & Forester, J. D. (2018). Combinations of abiotic factors differentially alter production of plant secondary metabolites in five woody plant

- species in the boreal-temperate transition zone. *Frontiers in Plant Science* (9), p. 1257. Doi: <https://doi.org/10.3389/fpls.2018.01257>
- Boyle, T. H., & Anderson, E. (2002). Biodiversity and Conservation. Nobel P.S. (ed.), *Cacti. Biology and Uses*. University of California Press, Los Angeles, pp. 125–141.
- Bravo-Hollis, H., & Sánchez-Mejorada, H. (1991). *Las Cactáceas de México*. Universidad Nacional Autónoma de México, México.
- Bravo-Hollis, H., & Scheinvar, L. (1999). El interesante mundo de las cactáceas. (Fondo de Cultura Económica. México D.F., pp. 23-25.
- Caballero-Gutiérrez, L., & Gonzáles, G. (2016). Alimentos con efecto anti-inflamatorio. *Acta Medica Peruana* 33(1), pp. 1–50. DOI: <https://doi.org/10.35663/amp.2016.331.18>
- De Corato, U., Maccioni, O., Trupo, M., & Di Sanzo, G. (2010). Use of essential oil of *Laurus nobilis* obtained by means of a supercritical carbon dioxide technique against post harvest spoilage fungi. *Crop Protection*, 29(2), pp. 142–147. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cropro.2009.10.012>
- De Luca, V., Salim, V., Atsumi, S. M. & Yu, F. (2012). Mining the biodiversity of plants: a revolution in the making. *Science*. (336), pp. 1658–61. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1217410>. 15.
- Dias, M. I., Sousa, M. J., Alves, R. C., & Ferreira, I. C. (2016). Exploring plant tissue culture to improve the production of phenolic compounds: A review. *Industrial Crops and Products*, 82, pp. 9–22. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2015.12.016>
- El-Mostafa, K., Kharrassi, Y., Badreddine, A., Andreoletti, P., Vamecq, J., Kebbaj, M., Latruffe, N., Lizard, G., Nasser, B., & Cherkaoui-Malki, M. (2014). Nopal cactus (*Opuntia ficus-indica*) as a source of bioactive compounds for nutrition, health and disease. *Molecules*, 19(17), pp. 14879–14901. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules190914879>

- Ennouri, M., Fetoui, H., Bourret, E., Zeghal, N., & Attia, H. (2006). Evaluation of some biological parameters of *Opuntia ficus indica*. 1. Influence of a seed oil supplemented diet on rats. *Bioresource Technology*, 97(12), pp.1382–1386. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2005.07.010>
- Espejo-Serna, A.; López-Ferrari, A. R. & Salgado-Ugarte, I. (2004). A current estimate of angiosperm diversity in Mexico. *Biodiversity and Conservations*. (53), pp 127-130. DOI: <https://doi.org/10.2307/4135497>
- Estrada-Arellano, J. R., Estrada-Castillón, A. E., Salinas-Rodríguez, M. M., Sánchez-Salas, J., Rueda-Puente, E. O., & Márquez-Hernández, C. (2018). Cactus diversity in the Sierra del Rosario, Durango, Mexico. *Ecosistemas y recursos agropecuarios*, 5(13), pp. 133-141. DOI: <https://doi.org/10.19136/era.a5n13.1024>
- Estrada-Castillón, E., Soto-Mata, B., Garza-López, M., Villarreal-Quintanilla, J., Jiménez-Pérez, J., Pando-Moreno, M., Sánchez-Salas, J., Scott-Morales, L., & Cotera-Correa, M. (2012). Medicinal plants in the southern region of the State of Nuevo León, México. *Journal of Ethnobiology and Ethnomedicine*, 11(8), pp. 8–45. DOI: <https://doi.org/10.1186/1746-4269-8-45>
- Ettre, L. S. and Hinshaw, J. V. (1993) Basic relationships of gas chromatography, Advanstar, Cleveland, USA, p. 177
- Fan, S., Chang, J., Zong, Y., Hu, G., & Jia, J. (2018). GC-MS Analysis of the Composition of the Essential Oil from *Dendranthema indicum* Var. *Aromaticum* Using Three Extraction Methods and Two Columns. *Molecules*, 23(3), pp. 576. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules23030576>
- Feugang, J. M. (2006). Nutritional and medicinal use of Cactus pear (*Opuntia* spp.) cladodes and fruits. *Frontiers in Bioscience*, 11(1), pp. 2574–2589. DOI: <https://doi.org/10.2741/1992>
- Fiehn, O. (2001). Combining genomics, metabolome analysis, and biochemical modelling to understand metabolic networks. *Comparative and Functional Genomics*, 2(1), pp. 155–168. DOI: <https://doi.org/10.1002/cfg.82>

- Fiehn, O. (2002). Metabolomics the link between genotypes and phenotypes. *Plant Molecular Biology*, 48, pp, 155–171. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1013713905833>
- Fiehn, O. (2016). Metabolomics by Gas Chromatography-Mass Spectrometry: Combined Targeted and Untargeted Profiling. *Current Protocols in Molecular Biology*, 114, pp. 30.4.1–30.4.32. DOI: <https://doi.org/10.1002/0471142727.mb3004s114>
- Galati, E. M., Mondello, M. R., Giuffrida, D., Dugo, G., Miceli, N., Pergolizzi, S., & Taviano, M. F. (2003). Chemical characterization and biological effects of Sicilian *Opuntia ficus indica* (L.) mill. Fruit juice: antioxidant and antiulcerogenic activity. *Journal of agricultural and food chemistry*, 51(17), pp. P4903–4908. DOI: <https://doi.org/10.1021/jf030123d>
- Ghasemzadeh, A., & Ghasemzadeh, N. (2011). Flavonoids and phenolic acids: Role and biochemical activity in plants and human. *Journal of Medicinal Plants Resesearch*, 5(4), pp. 6696–6703. DOI: <https://doi.org/10.5897/jmpr11.1404>
- Gibson, A. C., & Nobel, P. S. (1986) *The cactus primer*. Cambridge, Massachusetts, Harvard University press, p. 286.
- Gil-Chávez, J. G., Villa, J. A., Ayala-Zavala, F. J., Heredia, J. B., Sepúlveda, D., Yahia, E. M., & González-Aguilar, G. A. (2013). Technologies for extraction and production of bioactive compounds to be used as nutraceuticals and food ingredients: an overview. *Comprehensive reviews in food science and food safety*, 12(1), pp. 5–23. DOI: <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12005>
- Godínez-Alvarez, H., Valverde, T., & Ortega-Baes, P. (2003). Demographic trends in the Cactaceae. *The Botanical Review*, 69, pp. 173-203. DOI: [https://doi.org/10.1663/0006-8101\(2003\)069\[0173:DTITC\]2.0.CO;2](https://doi.org/10.1663/0006-8101(2003)069[0173:DTITC]2.0.CO;2)
- González-Durán, A., Riojas, L., & Arreola, N. *El género Opuntia en Jalisco. Guía de campo*. (Universidad de Guadalajara-Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad, México, 2001).

- González-Stuart A. (2010). Use of Medicinal Plants in Monterrey, Mexico. *Notulae Scientia Biologicae*, 2(4), pp. 2067-3264.
- Guaadaoui, A., Benaicha, S., Elmajdoub, N., Bellaoui, M., & Hamal, A. (2014). What is a Bioactive Compound? A Combined Definition for a Preliminary Consensus. *International Journal of Nutrition and Food Sciences*, 3(3), pp. 174–179. DOI: <https://doi.org/10.11648/j.ijnfs.20140303.16>
- Gurrieri, S., Miceli, L., Lanza, C. M., Tomaselli, F., Bonomo, R. P., & Rizzarelli, E. (2000). Chemical characterization of Sicilian prickly pear (*Opuntia ficus indica*) and perspectives for the storage of its juice. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 48(11), pp. 5424–5431. DOI: <https://doi.org/10.1021/jf9907844>
- Guzmán, U., Arias, S., & Dávila P. (2003). Catálogo de Cactáceas Mexicanas. Universidad Nacional Autónoma de México and Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad, México, D.F.
- Harlev, E., Nevo, E., Lansky, E. P., Lansky, S., & Bishayee, A. (2012). Anticancer attributes of desert plants: a review. *Anti-Cancer Drugs*, 23(3), pp. 255–271. DOI: <https://doi.org/10.1097/cad.0b013e32834f968c>
- Harrigan, G., & Goodacre, R. (2012). *Metabolic Profiling: Its Role in Biomarker Discovery and Gene Function Analysis*. (Springer, USA)
- Harvey, A. L., Edrada-Ebel, R., & Quinn, R. J. (2015). The re-emergence of natural products for drug discovery in the genomics era. *Nature reviews. Drug discovery*, 14(2), pp. 111–129. DOI: <https://doi.org/10.1038/nrd4510>
- Helmstädter, A. & Staiger, C. (2014). Traditional use of medicinal agents: a valid source of evidence. *Drug Discovery Today*. (19), pp 4-7. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2013.07.016>
- Hernández, H. M., Gómez-Hinostrosa, C., Goettsch, B.K., & Sotomayor, M. (2013). *Opuntia megarrhiza*. The IUCN Red List of Threatened Species 2013: e.T41219A2952324. DOI: <https://dx.doi.org/10.2305/IUCN.UK.2013-1.RLTS.T41219A2952324>

- Hernández, H., & Godínez, A. H. (1994). Contribución al conocimiento de las cactáceas mexicanas amenazada. *Acta Botánica Mexicana*, 26, pp. 33–52 DOI: <https://doi.org/10.21829/abm26.1994.690>
- Hernández, H., Gómez-Hinostrosa, C., & Bárcenas, R. (2001). Studies on Mexican Cactaceae. II. *Opuntia megarrhiza*, a poorly known endemic from San Luis Potosí, Mexico. *Brittonia*, 53, pp. 528–533. DOI: <https://doi.org/10.1007/bf02809653>
- Hernández-Hernández, T., Hernández, H. M., De-Nova, J. A., Puente, R., Eguiarte, L. E., & Magallón, S. (2011). Phylogenetic relationships and evolution lineages within Cactaceae. *American journal of botany*, 98(1), pp. 44–61. DOI: <https://doi.org/10.3732/ajb.1000129>
- Hubert, J., Nuzillard, J. M., & Renault, J. H. (2017). Dereplication strategies in natural product research: How many tools and methodologies behind the same concept. *Phytochem Rev* 16, pp. 55–95. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11101-015-9448-7>
- Hübschmann, H.-J. (2009) Handbook of GC/MS. 2a Ed. Wiley V. C. H., Weinheim, p. 719.
- Hunt, D. (1999). CITES. Cactaceae checklist. Royal Botanic Gardens Kew and International Organization for Succulent Plant Study, U.K.
- Hunt, D., Taylor, N. P., & Charles, G. (2006) The new cactus lexicon. dh Books, Milborne Port, UK., p. 899.
- IUCN [International Union for the Conservation of Nature and Natural Resources] (2003). Red List of Threatened Species. www.redlist.org
- Kim, S., Chen, J., Cheng, T., Gindulyte, A., He, J., He, S., Li, Q., Shoemaker, B. A., Thiessen, P. A., Yu, B., Zaslavsky, L., Zhang, J., & Bolton, E. E. (2019). PubChem in 2021: new data content and improved web interfaces. *Nucleic Acids Res.* 49, D1388–D1395. DOI: <https://doi.org/10.1093/nar/gkaa971>
- Kris-Etherton, P. M., Hecker, K. D., Bonanome, A., Coval, S. M., Binkoski, A., Hilpert, F. K., Griel, A. E., & Etherton, T. D. (2002). Bioactive compounds in foods: their

role in the prevention of cardiovascular disease and cancer. *The American Journal of medicine*, 113(9), pp. 71–88. DOI: [https://doi.org/10.1016/s0002-9343\(01\)00995-0](https://doi.org/10.1016/s0002-9343(01)00995-0)

Kroymann, J. (2011). Natural diversity and adaptation in plant secondary metabolism. *Current Opinion in Plant Biology* 14(3), pp. 246–51. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pbi.2011.03.021>.

Kudanga, T., Nemadziva, B., & Le Roes-Hill, M. (2017). Laccase catalysis for the synthesis of bioactive compounds. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 101 pp. 13–33. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00253-016-7987-5>

Lee, S., Oh, D. G., Lee, S., Kim, G. R., Lee, J. S., Son, Y. K., Bae, C H., Yeo, J., & Hwan Lee, H. C. (2015). Chemotaxonomic Metabolite Profiling of 62 Indigenous Plant Species and Its Correlation with Bioactivities. *Molecules*, 19(7), pp. 19–34. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules201119652>

Lefsih, K., Giacomazza, D., Dahmoune, F., Mangione, M. R., Bulone, D., San Biagio, P. L., Passantino, R., Costa, M. A., Guarrasi, V., & Madani, K. (2017). Pectin from *Opuntia ficus-indica*: optimization of microwave-assisted extraction and preliminary characterization. *Food Chemistry*, 221, pp. 91–99. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.10.073>

Lisec, J., Schauer, N., Kopka, J. Willmitzer, L., & Fernie A. R. (2006). Gas chromatography mass spectrometry–based metabolite profiling in plants. *Nature Protocols*, 1, pp. 387–396. DOI: <https://doi.org/10.1038/nprot.2006.59>

Liu, X., & Locasale, J. W. (2017). Metabolomics: A Primer. *Trends in biochemical sciences*, 42(4), pp. 274–284. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tibs.2017.01.004>

Lüthy, J. M. (2001). The Cactaceae of CITES Appendix I. CITES Management Authority of Switzerland, Bern

Martins, S., Mussatto, S. I., Martínez-Ávila, G., Montañez-Sáenz, J., Aguilar, C. N., & Teixeira, J. A. (2011). Bioactive phenolic compounds: production and extraction by

solid-state fermentation. *Biotechnology Advances*, 29(3), pp. 365–373. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2011.01.008>

Nobel, P. S. (2002). *Cacti. Biology and uses*. University of California Press, Los Angeles, USA. Oldfield S. (compiler). 1997. *Cactus and succulent plants: status survey and conservation action plan*. IUCN/SSC cactus and succulent specialist group. International Union for Conservation of Nature and Natural Resources, Gland, Switzerland, and Cambridge, United Kingdom

Ntie-Kang, F., Lifongo, L. L., Mbaze, L. M., Ekwelle, N., Owono, L. C., & Megnassan, E. (2013). Cameroonian medicinal plants: a bioactivity versus ethnobotanical survey and chemotaxonomic classification. *BMC Complementary and Alternative*, 26(13), pp. 140–147. DOI: <https://doi.org/10.1186/1472-6882-13-147>

Oldfield, S. (compiler) (1997). *Cactus and succulent plants: status survey and conservation action plan*. IUCN/SSC cactus and succulent specialist group. International Union for Conservation of Nature and Natural Resources, Gland, Switzerland, and Cambridge, United Kingdom

Ortega-Baes, P., & Godínez-Alvarez, H. (2006). Global diversity and conservation priorities in the Cactaceae. *Biodiversity and Conservation*, 15, pp. 817-827. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10531-004-1461-x>

Osorio-Esquivel, O., Ortiz-Moreno, A., Álvarez, V., Dorantes-Álvarez, L., & Giusti, M. (2011). Phenolics, betacyanins and antioxidant activity in *Opuntia joconostle* fruits. *Food Research International*, 44(7), pp. 2160–2168. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2011.02.011>

Paiva, P. M., Souza, I. F., Costa, M. C., Santos A. F., & Coelho, L. C. (2016). *Opuntia* sp. Cactus: Biological Characteristics, Cultivation and Applications. *Advances in Research*, 7(3), pp. 1–14.

Paiz, R. C., Juárez-Flores, B. I., Aguirre-Rivera, J. R., Cárdenas C. N., Reyes-Agüero J. A. García-Chávez, E., & Álvarez Fuentes, G. (2010). Glucose-lowering effect of xoconostle (*Opuntia joconostle* A. Web., Cactaceae) in diabetic rats. *Journal of*

Medicinal Plant Research, 22(4), pp. 2326–2333. DOI: <https://doi.org/10.5897/JMPR10.294>

Park, E. H., Kahng, J. H., Lee, S. H., & Shin, K. H. (2001). An anti-inflammatory principle from cactus. *Fitoterapia*, 72(3), pp. 288–290. DOI: [https://doi.org/10.1016/s0367-326x\(00\)00287-2](https://doi.org/10.1016/s0367-326x(00)00287-2)

Pawar, A.V., Killedar, S. G., & Dhuri, V. G. (2017). *Opuntia*: medicinal plant. *International Journal of Advance Research, Ideas and Innovations in Technology*, 3(2), pp. 148–154.

Perfumi, M., & Tacconi, R. (1996). Antihyperglycemic Effect of Fresh *Opuntia dillenii* Fruit from Tenerife (Canary Islands). *International Journal of Pharmacognosy*, 34(1), pp. 41–47. DOI: <https://doi.org/10.1076/phbi.34.1.41.13186>

Piattelli, M., Minale, L., & Prota, G. (1965). Pigments of Centrospermae III: Betaxanthins from *Beta vulgaris* L. *Phytochemistry*, 4(1), pp. 121–125. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)86153-1](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)86153-1)

Pichersky, E., & Gang, D. (2000). Genetics and biochemistry of secondary metabolites in plants: an evolutionary perspective. *Trends in Plant Science*, 5(10), pp. 439–445. DOI: [https://doi.org/10.1016/s13601385\(00\)01741-6](https://doi.org/10.1016/s13601385(00)01741-6)

Poole, C. F., & Poole, S. K. (1991). *Chromatography today*, Elsevier, Amsterdam, Holanda, p. 1026.

Razack, S., Kumar, K. H., Nallamuthu, I., Naika, M., & Khanum, F. (2015). Antioxidant, biomolecule oxidation protective activities of *Nardostachys jatamansi* DC and its phytochemical analysis by RP-HPLC and GC-MS. *Antioxidants* 4(1), pp. 185–203. DOI: <https://doi.org/10.3390/antiox4010185>

Rejeb, I. B., Pastor, V. & Mauch-Mani, B. (2014). Plant responses to simultaneous biotic and abiotic stress: molecular mechanisms. *Studies in Natural Products Chemistry*. 3(4), pp. 458–475. DOI: <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-63281-4.00009-4>

- Reyes-Agüero, J. A. Aguirre, R., Carlín, F., & Miller, E. (2004). Esparza G, Valdez R, Méndez G (eds.) Análisis preliminar de la variación morfológica de 38 variantes mexicanas de *Opuntia ficus-indica* (L.) pp. 21–47. El Nopal, Tópicos de actualidad. Univ. Autónoma Chapingo-Colegio de Postgraduados, México.
- Reyes-Agüero, J. A., Aguirre-Rivera, J., & Hernández, M. (2005). Notas sistemáticas y descripción detallada de *Opuntia ficus-indica* (L.) Mill. (Cactaceae). *Agrociencia*, 39(4), pp. 395-408.
- Robertson, D. G. (2005). Metabonomics in Toxicology: A Review. *Toxicological Sciences*, 85(2), 809–822. DOI: <https://doi.org/10.1093/toxsci/kfi102>
- Rödel, W., & Wölm, G. A (1987) Guide to gas chromatography, Hüthig, Heilderberg, p. 211.
- Sáenz, C., Estévez, A. M., Sepúlveda, E., & Mecklenburg, P. (1998). Cactus pear fruit: a new source for a natural sweetener. *Plant Foods for Human Nutrition Plant*, 52, pp. 141–149. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1008033704523>
- Salazar-Aranda, R.; Pérez-López, L. A.; López-Arroyo, J.; Alanís-Garza, B. A. & Waksman, T. N. (2011). Antimicrobial and antioxidant activities of plants from Northeast of Mexico. *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine*. p. 536139. DOI: <https://doi.org/10.1093/ecam/nep127>
- Sánchez Ruiz, J. F.; Tejeda R. M.; Sánchez, J. F. & Sánchez, T. M (2012). La farmacia, la medicina y la herbolaria en el código florentino. *Revista mexicana de ciencias farmacéuticas*, 43(3), pp. 55-66.
- Satapute, P., Murali, K. P., Kurjogi, M., & Jogaiah, S. (2019). Physiological adaptation and spectral annotation of Arsenic and Cadmium heavy metal-resistant and susceptible strain *Pseudomonas taiwanensis*. *Environmental Pollution*, 251, pp. 555–563. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2019.05.054>
- Scheinvar, L., Olalde-Parra, G. Gallegos-Vázquez, C. (2015). Una nueva especie del género *Opuntia* (Cactaceae) para el estado de Veracruz, México. *Botanical Sciences*, 93(1), pp. 33–39. DOI: <https://doi.org/10.17129/botsci.133>

- Schomburg, G. (1990). *Gas chromatography: A practical course*. Weinheim: VCH, p. 320
- Scossa, F., Benina, M., Alseekh, S., Zhang, Y., & Fernie, A. R. (2018). The integration of metabolomics and next-generation sequencing data to elucidate the pathways of natural product metabolism in medicinal plants. *Planta Medica*, 84(12–13), pp. 855–873. DOI: <https://doi.org/10.1055/a-0630-1899>
- Segura-Venegas, D., & Rendón-Aguilar, B. (2016). *Opuntia megarrhiza* Rose (Cactaceae) en San Luis Potosí, México: Uso tradicional y distribución de nuevas poblaciones. *Cactáceas y Suculentas Mexicanas*, 62(2), pp. 36–47.
- SEMARNAT [Secretaría del Medio Ambiente y Recursos Naturales] (2002). Norma Oficial Mexicana NOM-059-ECOL2001, Protección ambiental-Especies nativas de México de flora y fauna silvestres-Categorías de riesgo y especificaciones para su inclusión, exclusión o cambio-Lista de especies en riesgo. Diario Oficial de la Federación. 2a Sección, 6 de marzo de 2002.
- Serra, A., Poejo, T., Matias, J., Bronze, A., & Duarte, C. (2013). Evaluation of *Opuntia* spp. derived products as antiproliferative agents in human colon cancer cell line (HT29). *Food Research International*, 54(1), pp. 892–901. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.08.043>
- Shedbalkar, U. U., Adki, V. S., Jadhav, J. P., & Bapat, V. A. (2010). *Opuntia* and Other Cacti: Applications and Biotechnological Insights. *Tropical Plant Biology*, 3, pp. 136–150. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12042-010-9055-0>
- Sim, K. S., Sri-Nurestri, A. M., Sinniah, S. K., Kim, K. H., & Norhanom, A.W. (2010). Acute oral toxicity of *Pereskia bleo* and *Pereskia grandifolia* in mice. *Pharmacognosy Magazine*, 6(21), pp. 67–70. DOI: <https://doi.org/10.4103/0973-1296.59969>
- Sofowora, A., Ogunbodede, E., & Onayade, A. (2013). The role and place of medicinal plants in the strategies for disease prevention. *African journal of traditional, complementary, and alternative medicines*, 10(5), pp. 210–229. DOI: <https://doi.org/10.4314/ajtcam.v10i5.2>

- Son, S. Y., Kim, N.K., Lee, S., Singh, D., Kim, G. R., Lee, J. S., Yang, H. S., Yeo, J., Lee, S., & Lee C. H. (2016). Metabolite fingerprinting, pathway analyses, and bioactivity correlations for plant species belonging to the Cornaceae, Fabaceae, and Rosaceae families. *Plant Cell Reports Plant*, 35(9), pp. 1917-31. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00299-016-2006-y>
- Stashenko, E. E., & Martínez, J. R. (2010) GC y GC-MS: Configuración del Equipo Versus Aplicaciones *Scientia Chromatographica*, 2(3) pp, 33-59.
- Stintzing, F., Schieber, A., & Carle, R. (2001). Phytochemical and nutritional significance of cactus pear. *European Food Research and Technology*, 212, pp. 396–407. DOI: <https://doi.org/10.1007/s002170000219>
- Strack, D., Vogt, T., & Schliemann, W. (2003). Recent advances in betalain research. *Phytochemistry*, 62(3), pp. 247–269. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(02\)00564-2](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(02)00564-2)
- Sumner, L. W., Mendes, P., & Dixon, R. A. (2003). Plant metabolomics: large-scale phytochemistry in the functional genomics era. *Phytochemistry*, 62(6), pp. 817–836. DOI: [https://doi.org/10.1016/s0031-9422\(02\)00708-2](https://doi.org/10.1016/s0031-9422(02)00708-2)
- Süntar, I. (2020). Importance of ethnopharmacological studies in drug discovery: role of medicinal plants. *Phytochemistry Reviews*. (19), pp 199–1209. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11101-019-09629-9>
- Valtierra-Rodríguez, D., Heredia, N. L., García, S., & Sánchez, E. (2010). Reduction of *Campylobacter jejuni* and *Campylobacter coli* in poultry skin by fruit extracts. *Journal of food protection*, 73(3), pp. 477–482. DOI: <https://doi.org/10.4315/0362-028x-73.3.477>
- Velmurugan, G., & Anand, P. (2017). GC-MS Analysis of Bioactive Compounds on Ethanolic Leaf Extract of *Phyllodium pulchellum* L. Desv. *International Journal of Pharmacognosy and Phytochemical Research*, 9(1), pp. 114–118. DOI: <https://10.25258/ijpapr.v9i1.8051>

- Villaseñor, J. L. (1993) La familia Asteraceae en México. *Revista de la Sociedad Mexicana de Historia Natural* (XLIV), pp 117-124. DOI: <http://dx.doi.org/10.22201/ib.20078706e.2018.1.2203>
- Weli, A., Al-Kaabi, A., Al-Sabahi, J., Said, S., Hossain, M. A., & Al-Riyami, S. (2019). Chemical composition and biological activities of the essential oils of *Psidium guajava* leaf. *Journal of King Saud University – Science*, 31(4), pp. 993–998. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jksus.2018.07.021>
- Yahia, E., & Mondragon-Jacobo, C. (2011). Nutritional components and anti-oxidant capacity of ten cultivars and lines of cactus pear fruit (*Opuntia* spp.). *Food Research International*, 44(7), pp. 2311–2318. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2011.02.042>
- Yang, L., Wen, K. S., Ruan, X., Zhao, Y. X., Wei, F. & Wang, Q. (2018). Response of plant secondary metabolites to environmental factors. *Molecules*. 23(4), p. E762. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules23040762>. 2
- Yeddes, N., Chérif, J., Guyot, S., Sotin, H., & Ayadi, M. (2013a). Comparative Study of Antioxidant Power, Polyphenols, Flavonoids and Betacyanins of the Peel and Pulp of Three Tunisian *Opuntia* Forms. *Antioxidants* 2(2), pp. 37–51. DOI: <https://doi.org/10.3390/antiox2020037>
- Yeddes, N., Chérif, J., Guyot, S., Baron, A., & Trabelsi-Ayadi, M. (2013b). Phenolic Profile of Tunisian *Opuntia ficus-indica* Thornless form Flowers via Chromatographic and Spectral Analysis by Reversed Phase-High Performance Liquid Chromatography-UV-Photodiode Array and Electrospray Ionization-Mass Spectrometer. *International Journal of Food Properties*, 17(4), pp. 741–751. DOI: <https://doi.org/10.1080/10942912.2012.665404>
- Zito, P., Sajeve, M., Bruno, M., Rosselli, S., Maggio, A., & Senator, F. (2013) Essential oils composition of two Sicilian cultivars of *Opuntia ficus-indica* (L.) Mill. (Cactaceae) fruits (prickly pear). *Natural Product Research*, 27(14), pp. 1305-1314. DOI: <https://doi.org/10.1080/14786419.2012.734823>

Anexo 1. Manuscrito sometido a Scientific Reports en mayo de 2021.

GC-MS analysis of phytochemical compounds of *Opuntia megarrhiza* (Cactaceae), an endangered plant of Mexico

Madeleyne Cupido¹, Arturo De-Nova^{2,3,*}, Pablo Delgado-Sánchez^{2*}, María de la Luz Guerrero-González², Francisco Javier Pérez-Vázquez⁴, Karen Beatriz Méndez-Rodríguez⁴

¹Programa de Maestría en Ciencias Agropecuarias, Facultad de Agronomía y Veterinaria de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí. Soledad de Graciano Sánchez, 78321 San Luis Potosí, México

²Facultad de Agronomía y Veterinaria de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí. Soledad de Graciano Sánchez, 78321 San Luis Potosí, México

³Instituto de Investigación de Zonas Desérticas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí. 78377 San Luis Potosí, México

⁴Coordinación para la Innovación y Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, 78377 San Luis Potosí, México

*Corresponding authors: arturo.denova@uaslp.mx (JADN); pablo.delgado@uaslp.mx (PDS)

Abstract

Opuntia megarrhiza is an endemic plant used in Mexican traditional medicine for the treatment of bones fractures in humans and domestic animals. One of the most used technics for the detection and characterization of the structure of phytochemical compounds is the Gas Chromatography Coupled to Mass Spectrophotometry. The goals of the present study were to identify and characterize the phytochemical compounds present in wild individuals of *O. megarrhiza* using this technic. We used chloroform and methanol extracts from cladodes, and they were analyzed in a gas chromatograph coupled to mass spectrometry detector with electronic impact. We obtained 53 phytochemical compounds, 18 have previously identified with some biological activity. Most of these compounds are alkanes, alkenes, aromatic hydrocarbons, fatty acids, and ketones. We

detected some fragmentation patterns that are described for the first time for this species. The variety of metabolites presents in *O. megarrhiza* justifies the medicinal use of this plant in traditional medicine and highlight it as a source of phytochemical compounds with potential in medicine and biotechnology.

Introduction

The members of Cactaceae represent a diverse evolutionary lineage endemic to America, including over 1,450 species belonging to ca. 127 genera¹⁻³. They are successful plants adapted to arid and semiarid environments, where the conditions imply a constant stress, so they have developed different phytochemical compounds with an important biological activity such as alkaloids, amino acids, antioxidant phenol components (betalains and flavonoids), carotenoids, coumarins, esters, fibers, sterols, tannins terpenes, and vitamins C and E⁴⁻¹¹. Bioactive phytochemical compounds are of great interest since their possible applications in biotechnology and industry, and they are usually categorized into phenolic and nonphenolic compounds and pigments^{10,12}. Some of them have nutritional benefits^{13,14}, pharmaceutical applications¹⁰, and are used in the production of nutraceuticals^{10,15}, in novel food formulations^{10, 16,17} and for animal feed supplementation^{10,18}.

The species of genus *Opuntia* (Cactaceae) are native of Mexico where they originated and diversified^{1,19}. Different cultures, ancient and modern, have used them as fuel, forage, fences, food, and particularly in traditional medicine²⁰⁻²². Several *Opuntia* species have the ability to synthesize molecules with unique and complex structures with therapeutic potential²³⁻²⁵. For example, *Opuntia dillenii* (Ker Gawl.) Haw. has beneficial effects for the human health as anti-inflammatory, analgesic, hypoglycemic, hypocholesterolemic, and antioxidant²⁶⁻²⁸. Other edible species like *Opuntia ficus-indica* (L.) Mill. present antioxidant and antiproliferative activities useful in colon cancer²⁹⁻³¹, and have nutraceutical, anticarcinogen, and antiviral properties useful in the digestive processes, reducing the risks of obesity, gastrointestinal suffering, high levels of cholesterol^{32,33}. Usually, the used parts are the fruit, stem, cladode, and root³⁴. It has been estimated that plants have ca. 200,000 different metabolites, primary and secondary³⁵⁻³⁷, like amino acids, fatty acids, carbohydrates, lipids, and more^{38,39}. Several studies in *Opuntia* have focused on the analysis of phytochemical compounds as alkaloids,

carotenoids, flavonoids, phenols, and C and E vitamin in different plant species in order to discover and produce new drugs for several illness^{25,40}, as well as nutritional supplements since they provide metabolites, mineral, and vitamins essential for the human organism⁴¹. In the agriculture, some of these compounds are used for the control of phytopathogen microorganisms⁴². Some other, are used industrially for the production of detergents, cosmetics and dermatological products, solvents, lubricants, textiles, and others⁴³.

The main technics for the detection and characterization of the structure of phytochemical compounds are the Thin-Layer Chromatography, the UV Resonance, the Nuclear Magnetic Resonance, and the Gas Chromatography Coupled to Mass Spectrophotometry (GC-MS)⁴⁴. The last one is the most used in the metabolomic research since it is a very selective technic for the detection and characterization of metabolites⁴⁵. The GC-MS together with the metabolomic analysis are a key for the profiling of metabolites in plants since they perform the qualitative and quantitative characterization of all the molecules (metabolites) present in their cellules⁴⁶.

Opuntia megarrhiza Rose is a species endemic to Mexico, locally known as “nopal camote” (Figure 1). It is restricted to some regions of the Chihuahuan Desert, particularly in the State of San Luis Potosi⁴⁷, and it is listed as endangered in the Red List of the IUCN⁴⁸. It grows in different habitats as xerophytic scrubs, oak forest, and other mountain forests^{47,49}. This species is characterized by its massive roots, which are succulent, gross, and deeply buried in ground, 30 to 60 cm long and 5 to 10 cm diameter^{50,51}. The cladodes are relatively small contrasting with other *Opuntia* species. The flowers are yellowish green to pink, 3 to 5.5 cm long and 2.5 to 6 cm diameter at anthesis. Fruits are ovoid, 2.5 cm long, and the seeds are ca. 4 mm diameter^{47,52}.

Opuntia megarrhiza is used by locals in the treatment of bones fractures, both animals and humans⁴⁷. In Cerro el Borrego (Guadalcazar, San Luis Potosi), the root is applied directly in the fractures, but in other localities like Xoconoxtle (Zaragoza, San Luis Potosi) people use cladodes or the whole plant, and some time is mixed with parts of *Cylindropuntia* spp., to make a paste that is applied with bandages in the injury⁴⁹. Given the ethnopharmacological value of *O. megarrhiza*, previously highlighted by the empirical traditional medicine, the goals of the present study were to identify and characterize the

phytochemical compounds present in cladodes from wild individuals of the species, using GC-MS. There are not previous studies about the bioactive phytochemical compounds in this species, so its phytochemical characterization will contribute to increase the knowledge of the species and its potential biotechnological applications.

Results

A total of 53 phytochemical compounds were detected based on the analyses of the obtained chromatograms (Tables 1 to 4). The CH₃CH₃/MeOTH extract showed eleven peaks with the PVDF filter and twelve with the PTFE filter. The CH₃CH₃/CHCl₃ extract showed twenty-three peaks with PVDF and seven with PTFE (Figure 2). The analysis from MeOTH extract with PVDF filter showed the presence of eleven phytochemical constituents. Five alkanes: Octane, 2,3,6,7-tetramethyl (1.17%), Decane, 2,3,5,8-tetramethyl (1.78%), Heptadecane (1.03%), Hexadecane, 7-methyl- (1%), Decane, 2,3,6-trimethyl- (1.80%). One aromatic hydrocarbon: Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl) (1.78%). One ester: R-(+)-Methyl-2-isopropyl-5-oxohexanoate (2.78%). One Ketones: 4-Isopropyl-1,3-cyclohexanedione (2.19%). One Halogenated hydrocarbons: Tetrapentacontane, 1,54-dibromo- (1.41%). Two fatty acids: n-Hexadecanoic acid (4.67%), Octadecanoic acid (2.47%) (Table 1).

The analysis from the MeOTH extract with PTFE filter twelve phytochemical constituents were detected. Eight alkanes: Decane, 4-methyl- (1.44%), Heptacosane (0.98%), Pentacosane (1.66%), Heneicosane (0.98%), Nonacosane (2.28%), Triacontane (1.4%), Hentriacontane (1.63%), Octacosane (1.28%). Two aromatic hydrocarbons: Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)- (3.53%), Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl) (2.13%). One ketone: 4-Isopropyl-1,3-cyclohexanedione (1.84%). One lipid: gamma-Sitosterol (1.76%) (Table 2).

The analysis from the CH₃CN extract with PVDF filter showed the presence of twenty-three phytochemical constituents. Three alkanes: Tetratriacontane (0.92%), Tetrapentacontane (0.93%), Eicosane (1.34%). Three aromatic hydrocarbons Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl- (2.27%), Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl- (0.51%), Benzothiazole (5.33%). Three ketones 2H-Pyran-2-one, 6-hexyltetrahydro- (0.58%), 7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro (4,5) deca-6,9-diene-2,8-dione (1.61%), Aspidospermidin-17-ol, 1-acetyl-epoxy-15,16-dimethoxy (0.84%). Two alcohols: Phytol (0.45%), 2-Methyl-Z,Z-3,13-

octadecadienol (0.45%). One aldehyde: Tridecanedial (0.58%). Five alkenes: 1,3-Cyclopentadiene, 1,2,3,4-tetramethyl-5-methylene- (0.82%), 5-Octadecene, (E)- (0.67%), 9-Octadecene, (E)- (1.65%), 2,6,10,14,18-Pentamethyl-,18-eicosapentaene (4.80%), Stigmastan-3,5-diene (13.80%). Six fatty acids: Hexadecanoic acid, methyl ester (1.1%), 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)-, methyl ester (0.65%), Octadecanoic acid, methyl ester (0.97%), Hexadecanoic acid, butyl ester (4.83%), Phosphonic acid, dioctadecyl ester (0.55%), Octadecanoic acid, 2-methylpropyl ester (3.10%) (Table 3).

The analysis from CH₃CN extract with PTFE filter seven compounds were observed. One alkane: Cyclohexane, 1-(1,5-dimethylhexyl) -4-(4-methylpentyl)- (1.20%). Four aromatic hydrocarbons: Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl- (2.51%), Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl- (4.24%), Benzene, 2-ethyl-1,3-dimethyl- (0.83%), Phenol, bis(1,1-dimethylethyl)- (5.28%). One ester: 1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono (2-ethylhexyl) ester (7.55%). One fatty acid: Octadecanoic acid, 2-methylpropyl ester (10.83%) (Table 4).

From the identified compounds 18 have been previously reported with biological activity (Tables 6 and 7). Some examples and their chemical structures are shown in Figure 3. The analyses revealed different nature kinds for the identified compounds alkanes, aromatic hydrocarbons, esters, ketones halogenated hydrocarbons, alcohols, aldehydes, alkenes, lipids, and fatty acids, some of them with a biological activity previously reported (Tables 5, 6, and 7).

Ten phytochemical compounds shown in Figure 4 were the most prevailing in the two extracts (CH₃CN and MeOTH) and both filters (PVDF and PTFE): Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl) (4.19 %) in MetOH₃/PVDF and (3.53 %) in (MetOH₃/PTFE), n-Hexadecanoic acid (4.67 %) in MetOH₃/PVDF; Benzothiazole (5.33 %), Hexadecanoic acid, butyl ester (4.83 %), Octadecanoic acid, 2-methylpropyl ester (3.10 %), 2,6,10,14,18-Pentamethyl-2,6,10,14,18-eicosapentaene (4.80 %), and Stigmastan-3,5-diene (13.80%) in CHCl₃/ PVDF; and Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl- (4.24 %), Phenol, bis(1,1-dimethylethyl)- (5.28 %) and 1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono (2-ethylhexyl) ester (7.55 %) in CHCl₃/PTFE.

Finally, 35 compounds with no identified biological activity were found, eight in the CH₃CH₃/MeOTH extract with PVDF filter (MetOH₃/PVDF), five in the CH₃CH₃/MeOTH

extract with PTFE (MeOH/PTFE), 16 in the CH₃CH₃/CHCl₃ extract with PVDF (CHCl₃/PVDF), and six in the CH₃CH₃/CHCl₃ extract with PTFE (CHCl₃/PTFE).

Discussion

The use of *Opuntia megarrhiza* in traditional medicine in Mexico has been reported previously⁴⁹, however, this is the first study that demonstrate the presence of 18 phytochemical compounds with biological activities, with similarity values of identification above 93%. Previously, it has been reported that several *Opuntia* species are used in the world as local medicinal interventions for chronic diseases and as food sources, mainly because they possess nutritional properties and biological activities that has been recently reviewed¹⁰. Our results are the first report that numerous phytochemical compounds responsible for several biological activities are present in *O. megarrhiza*, highlighting the relevance of the species as biocultural heritage in Mexico.

GC-MS is one of the most precise methods to identify various metabolites present in plant extracts⁸²⁻⁹¹ since some of these chromatographs include preloaded libraries or databases (NIST and Pubchem) that allows to know the possible identity of the metabolites by comparing the resulting mass spectra with the mass spectra found as reference in these libraries^{43, 92}.

Several studies indicate that *Opuntia* plants contain different phytochemical groups such as phenolic acids, sterols, esters, coumarins, terpenoids, and alkaloids with several health benefits^{4-8, 10}. However, the nature of the compound extracted depends largely on their solubility in the extraction solvent, the degree of polymerization of the phenols, and the interaction of the phenols with other constituents of the plant^{93, 94}.

The major phytochemical compounds found in our study have been reported to possess several biological activities. Some alkanes like Hentriacontane and Triacontane have antibacterial activity^{58, 62, 63, 80}. Heptadecane have antifungal activity⁵⁵. Eicosane has both antibacterial and antifungal activity⁵⁸. Heneicosane, Heptadecane, Octacosane, and Pentacosane have antimicrobial activity^{54, 60, 61, 65}. Heptadecane and Hentriacontane have anti-inflammatory activity^{53, 64}. Heptacosane, Heptadecane, Octacosane, and Pentacosane have antioxidant activity^{53, 60, 65}. Eicosane and Triacontane have antitumor activity^{58, 62}. Triacontane has antidiabetic activity⁶². Heneicosane has been reported as an antiasthmatic and urine acidifier⁶¹.

Fatty acids like Octadecanoic acid have antibacterial or antifungal activity^{58, 59}. n-Hexadecanoic acid have antiallopecic, anti-androgenic, antifibrinolytic, antioxidant, antipsychotic, hemolytic, hypocholesterolemic, nematocide, pesticide, 5-Alpha reductase inhibitor⁵⁶, and anti-inflammatory⁵⁷. Octadecanoic acid have been reported as anticarcinogen or antitumoral^{58, 59}. Fatty acid like Hexadecanoic acid, butyl and methyl ester and Octadecanoic acid, methyl ester has antimicrobial activity^{77, 78}. Benzenoids like 1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono 2-ethylhexyl) ester has been reported as cytotoxic⁸¹. The diterpene Phytol has been reported to have multiple activities like anticarcinogen, anticonvulsant, antifungal, anti-inflammatory, antimalaria, antimicrobial, antinociceptive, antioxidant, antitubercular, antispasmodic, anxiolytic, autophagy and apoptosis inducing, cytotoxic, immune-modulating, metabolism-modulating, resistant to gonorrhoea, and stimulant^{56, 67-75}, and the 1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono (2-ethylhexyl) ester has anti-inflammatory, antimicrobial, antioxidant, antiviral, and cytotoxicity activities⁸¹.

Conclusions

The GC-MS analysis of cladode extracts of *Opuntia megarrhiza* conducted here proves the presence of several phytochemical compounds responsible for biological activities previously reported support the medicinal use of this plant in traditional medicine. Particularly, the anti-inflammatory activity in compounds with a high similarity percentage in our results (e.g. n-Hexadecanoic acid, Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl), Hentriacontane, Benzothiazole, and Hexadecanoic acid, methyl ester), support its use treating bone fractures. Hence, *O. megarrhiza* represents a source for finding phytochemical compounds with potential use in medicine and biotechnology.

Methods

Sampling. All the protocols involving plants were adhered to relevant ethical guidelines and we use permissions for plant sampling from herbaria JAAA and SLPM (SGPA/DGGFS/712/0501/18). Non-lethal samples of cladodes were obtained from ten wild individuals, sampling randomly, of *Opuntia megarrhiza* localized in Cerro San Pedro (San Luis Potosi). We do not collect whole plants and the identification was conducted in field by taxonomists Arturo de Nova and Eleazar Carranza from herbarium SLPM and registered with photographs then confirmed with Research Grade in iNaturalist

(46236747, 46978331). The Figure 1a show a reference herbarium voucher from the studied locality for identification (SLPM 22132).

Extracts. The extractions were conducted at Laboratorio de Biotecnología de la Facultad de Agronomía y Veterinaria, UASLP and Centro Regional de Biociencias, UASLP. Cladode fragments were cleaned using brushes and distilled water to eliminate possible associated microorganism. We used 95 g of sample, which was macerated to make a semisolid past and then we aggregate 25 ml for extraction 1 of methanol (MeOTH) and 25 ml for extraction 2 of chloroform (CHCl₃). These solutions were mixed by centrifuge one hour to prevent conglomeration and sedimentation of small particles. The extracts were filtered three times using Whatman paper, grade 1, 5 and 6 in order, in a vacuum chamber. The volumes were adjusted to 10 mg/ml for all extracts. Subsequently, we make a dilution for each solution using acetone as solvent (1:1): 1) acetone-chloroform (CH₃CH₃, CHCl₃), and 2) acetone-methanol (CH₃CH₃, MeOTH). Before depositing in a vial, extracts were filtered through a polytetrafluoroethylene (PTFE) and polyvinylidene (PVDF) filter (which characteristics hydrophobic and hydrophilic, respectively) and transferred to a vial for analysis in the GC-MS.

GC-MS analysis Scan Mode and identification of phytochemical compounds. This process was conducted at Coordinación para la Innovación y la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, UASLP. We used the Hewlett Packard gas chromatograph HP 6890, coupled to mass spectrometry detector with electronic impact HP 5973 (Agilent Technologies, Palo Alto, CA, USA) with a column HP 5MS (60m x 0.25 mm x 0.25 μm). Helium was used as carrier gas, and the flow rate was 1 ml/min. The GC oven temperature gradient was: 60 °C (hold for 3 min) initially, then increased 5°C each minute until 300°C, this final temperature was hold 5 minutes. The transfer line temperature was 280 °C. The ion source temperature was 230 °C and the MS was scanned at 50 to 550 mass range. The essays were processed in the ChemStations software (Houston, TX, USA) to generate the chromatograms for the interpretation of the specters.

The identification of the compounds was performed by examination of mass spectral data in the National Institute of Standards and Technology (NIST) Standard Reference Database v11⁹⁵ and the retention times. In the databases NIST Standard Reference 69⁹⁶ and PubChem⁴³ we identified the compound name, synonyms, molecular formula,

compound nature, chemical structure, molecular weight, and the mass spectrum. Relative quantification of the compounds present in each sample was obtained from the relative area of the peaks in the chromatograms. Biological activity for each identified compound was obtained with an exhaustive search in scientific publications and from the Dr.Duke phytochemical and ethnobotanical databases⁵⁶.

References

1. Barthlott, W. & Hunt, D. "Cactaceae". In: Kubitzki K, Rohmer JG, Bittridi V (eds) *The families and Genera of Vascular Plants*. 161–197 (Springer, Germany, 1993).
2. Hunt, D., Taylor, N. P. & Charles, G. *The new cactus lexicon*. (dh Books, Milborne Port, UK., 2006)
3. Hernández-Hernández, T. *et al.* Phylogenetic relationships and evolution lineages within Cactaceae. *Am. J. Bot.* **98**, 44–61. <https://doi.org/10.3732/ajb.1000129> (2011).
4. Piattelli, M., Minale, L. & Prota, G. Pigments of Centrospermae III: Betaxanthins from *Beta vulgaris* L. *Phytochemistry* **4**, 121–125. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)86153-1](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)86153-1) (1965).
5. Stintzing, F., Schieber, A. & Carle, R. Phytochemical and nutritional significance of cactus pear. *Eur. Food Res. Technol.* **212**, 396–407. <https://doi.org/10.1007/s002170000219> (2001).
6. Strack, D., Vogt, T. & Schliemann, W. Recent advances in betalain research. *Phytochemistry* **62**, 247–269. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(02\)00564-2](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(02)00564-2) (2003).
7. Paiz, R. *et al.* Glucose-lowering effect of xoconostle (*Opuntia joconostle* A. Web., Cactaceae) in diabetic rats. *J. Med. Plant Res.* **4**, 2326–2333 (2010).
8. Osorio-Esquivel, O., Ortiz-Moreno, A., Álvarez, V., Dorantes-Álvarez, L. & Giusti, M. Phenolics, betacyanins and antioxidant activity in *Opuntia joconostle* fruits. *Int. Food Res. J.* **44**, 2160–2168. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2011.02.011> (2011).
9. Harlev, E., Nevo, E., Lansky, E. P., Lansky, S. & Bishayee, A. Anticancer attributes of desert plants. *Anti-Cancer Drugs* **23**, 255–271. <https://doi.org/10.1097/cad.0b013e32834f968c> (2012).

10. Aruwa, C. E., Amoo, S. O. & Kudanga, T. *Opuntia* (Cactaceae) plant compounds, biological activities and prospects—A comprehensive review. *Food. Res. Int.* **112**, 328–344. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.06.047> (2018).
11. Sim, K. S., Sri-Nurestri, A. M., Sinniah, S. K., Kim, K. H. & Norhanom, A.W. Acute oral toxicity of *Pereskia bleo* and *Pereskia grandifolia* in mice. *Pharmacogn. Mag.* **6**, 67–70. <https://doi.org/10.4103/0973-1296.59969> (2010).
12. Martins, S. *et al.* Bioactive phenolic compounds: production and extraction by solid-state fermentation. *Biotechnol. Adv.* **29**, 365–373. <https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2011.01.008> (2011).
13. Kris-Etherton, P. M. *et al.* Bioactive compounds in foods: their role in the prevention of cardiovascular disease and cancer. *Am. J. Med.* **113**, 71–88. [https://doi.org/10.1016/s0002-9343\(01\)00995-0](https://doi.org/10.1016/s0002-9343(01)00995-0) (2002).
14. Kudanga, T., Nemadziva, B. & Le Roes-Hill, M. Laccase catalysis for the synthesis of bioactive compounds. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* **101**, 13–33. <https://doi.org/10.1007/s00253-016-7987-5> (2017).
15. Gil-Chávez, J. G. *et al.* Technologies for extraction and production of bioactive compounds to be used as nutraceuticals and food ingredients: an overview. *Compr. Rev. Food Sci. F.* **12**, 5–23. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12005> (2013).
16. Gurrieri, S. *et al.* Chemical characterization of Sicilian prickly pear (*Opuntia ficus indica*) and perspectives for the storage of its juice. *J. Agric. Food Chem.* **48**, 5424–5431. <https://doi.org/10.1021/jf9907844> (2000).
17. Pawar, A.V., Killedar, S. G. & Dhuri, V. G. *Opuntia*: medicinal plant. *IJARIT* **3**, 148–154 (2017).
18. Ennouri, M., Fetoui, H., Bourret, E., Zeghal, N. & Attia, H. Evaluation of some biological parameters of *Opuntia ficus indica*. 1. Influence of a seed oil supplemented diet on rats. *Bioresour. Technol.* **97**, 1382–1386. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2005.07.010> (2006).
19. Reyes-Agüero, J. A. Aguirre, R. & Carlín, F. Miller en Esparza G, Valdez R, Méndez G (eds.) *Análisis preliminar de la variación morfológica de 38 variantes mexicanas de Opuntia ficus-indica (L.)* 21–47 (El Nopal, Tópicos de actualidad. Univ. Autónoma Chapingo - Colegio de Postgraduados, México, 2004).

20. González-Durán, A., Riojas, L. & Arreola, N. *El género Opuntia en Jalisco. Guía de campo*. (Universidad de Guadalajara-Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad, México, 2001).
21. Reyes-Agüero, J. A., Aguirre-Rivera, J. & Hernández, M. Notas sistemáticas y descripción detallada de *Opuntia ficus-indica* (L.) Mill. (Cactaceae). *Agrociencia* **39**, 395-408 (2005).
22. Andrade-Cetto, A. & Wiedenfeld, H. Anti-hyperglycemic effect of *Opuntia streptacantha* Lem. *J. Ethnopharmacol.* **133**, 940–943. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2010.11.022> (2011).
23. Shedbalkar, U. U., Adki, V. S., Jadhav, J. P. & Bapat, V. A. *Opuntia* and Other Cacti: Applications and Biotechnological Insights. *Trop. Plant Biol.* **3**, 136–150. <https://doi.org/10.1007/s12042-010-9055-0> (2010).
24. Bargougui, A., Le Pape, P. & Triki, S. Antiplasmodial efficacy of fruit extracts and cladodes of *Opuntia ficus-indica*. *J. Nat. Sci. Res.* **6**:31–37 (2013).
25. Weli, A. *et al.* Chemical composition and biological activities of the essential oils of *Psidium guajava* leaf. *J. King Saud Univ. Sci.* **31**, 993–998. <https://doi.org/10.1016/j.jksus.2018.07.021> (2019).
26. Perfumi, M. & Tacconi, R. Antihyperglycemic Effect of Fresh *Opuntia dillenii* Fruit from Tenerife (Canary Islands). *Int. J. Pharmacogn.* **34**, 41–47. <https://doi.org/10.1076/phbi.34.1.41.13186> (1996).
27. Park, E. H., Kahng, J. H., Lee, S. H. & Shin, K. H. An anti-inflammatory principle from cactus. *Fitoterapia* **72**, 288–290. [https://doi.org/10.1016/s0367-326x\(00\)00287-2](https://doi.org/10.1016/s0367-326x(00)00287-2) (2001).
28. Ghasemzadeh, A. & Ghasemzadeh, N. Flavonoids and phenolic acids: Role and biochemical activity in plants and human. *J. Med. Plant Res.* **5**, 6696–6703. <https://doi.org/10.5897/jmpr11.1404> (2011).
29. Serra, A., Poejo, T., Matias, J., Bronze, A. & Duarte, C. Evaluation of *Opuntia* spp. derived products as antiproliferative agents in human colon cancer cell line (HT29). *Food Res. Int.* **54**, 892–901. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.08.043> (2013).

30. Yeddes, N., Chérif, J., Guyot, S., Sotin, H. & Ayadi, M. Comparative Study of Antioxidant Power, Polyphenols, Flavonoids and Betacyanins of the Peel and Pulp of Three Tunisian *Opuntia* Forms. *Antioxidants* **2**, 37–51. <https://doi.org/10.3390/antiox2020037> (2013).
31. Yeddes, N., Chérif, J., Guyot, S., Baron, A. & Trabelsi-Ayadi, M. Phenolic Profile of Tunisian *Opuntia ficus-indica* Thornless form Flowers via Chromatographic and Spectral Analysis by Reversed Phase-High Performance Liquid Chromatography-UV-Photodiode Array and Electrospray Ionization-Mass Spectrometer. *Int. J. Food Prop.* **17**, 741–751. <https://doi.org/10.1080/10942912.2012.665404> (2013).
32. Feugang, J. M. Nutritional and medicinal use of Cactus pear (*Opuntia* spp.) cladodes and fruits. *Front Biosci.* **11**, 2574–2589. <https://doi.org/10.2741/1992> (2006).
33. Bensadón, S., Hervert-Hernández, D., Sáyo-Ayerdi, S. G. & Goñi, I. By-Products of *Opuntia ficus-indica* as a Source of Antioxidant Dietary Fiber. *Plant Foods Hum. Nutr.* **65**, 210–216. <https://doi.org/10.1007/s11130-010-0176-2> (2010).
34. Estrada-Castillón, E., *et al.* Medicinal plants in the southern region of the State of Nuevo León, México. *J. Ethnobiol. Ethnomedicine* **11**, 8–45. <https://doi.org/10.1186/1746-4269-8-45> (2012).
35. Pichersky, E. & Gang, D. Genetics and biochemistry of secondary metabolites in plants: an evolutionary perspective. *Trends Plant Sci.* **5**, 439–445. [https://doi.org/10.1016/s1360-1385\(00\)01741-6](https://doi.org/10.1016/s1360-1385(00)01741-6) (2000).
36. Fiehn, O. Combining genomics, metabolome analysis, and biochemical modelling to understand metabolic networks. *Comp. Funct. Genomics* **2**, 155–168. <https://doi.org/10.1002/cfg.82> (2001).
37. Fiehn, O. Metabolomics the link between genotypes and phenotypes. *Plant Mol. Biol.* **48**, 155–171. <https://doi.org/10.1023/A:1013713905833> (2002).
38. Banakar, P. & Jayaraj, M. GC-MS analysis of bioactive compounds from ethanolic leaf extract of *Waltheria indica* Linn. and their pharmacological activities. *Int. J. Pharm. Sci. Res.* **9**, 2005–2010. [https://doi:10.13040/IJPSR.0975-8232.9\(5\).2005-10](https://doi:10.13040/IJPSR.0975-8232.9(5).2005-10) (2018).

39. Velmurugan, G. & Anand, P. GC-MS Analysis of Bioactive Compounds on Ethanolic Leaf Extract of *Phyllodium pulchellum* L. Desv. *Int. J. Pharmacogn. Phytochem. Res.* **1**, 114–118 <https://doi.org/10.25258/ijpapr.v9i1.8051> (2017).
40. Yahia, E. & Mondragon-Jacobo, C. Nutritional components and anti-oxidant capacity of ten cultivars and lines of cactus pear fruit (*Opuntia* spp.). *Food Res. Int.* **44**, 2311–2318. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2011.02.042> (2011).
41. Caballero-Gutiérrez, L. & Gonzáles, G. Alimentos con efecto anti-inflamatorio. *Acta Med. Peruana* **33**, 1–50. <https://doi.org/10.35663/amp.2016.331.18> (2016).
42. De Corato, U., Maccioni, O., Trupo, M. & Di Sanzo, G. Use of essential oil of *Laurus nobilis* obtained by means of a supercritical carbon dioxide technique against post harvest spoilage fungi. *Crop. Prot.* **29**, 142–147. <https://doi.org/10.1016/j.cropro.2009.10.012> (2010).
43. Kim, S. *et al.* PubChem in 2021: new data content and improved web interfaces. *Nucleic Acids Res.* **49**, D1388–D1395. <https://doi.org/10.1093/nar/gkaa971>. Accessed 28 January 2021 (2019).
44. Robertson, D. G. Metabonomics in Toxicology: A Review. *Toxicol. Sci.* **85**, 809–822. <https://doi.org/10.1093/toxsci/kfi102> (2005).
45. Fiehn, O. Metabolomics by Gas Chromatography-Mass Spectrometry: Combined Targeted and Untargeted Profiling. *Curr. Protoc. Mol. Biol.* **114**, 30.4.1–30.4.32. <https://doi.org/10.1002/0471142727.mb3004s114> (2016).
46. Harrigan, G. & Goodacre, R. *Metabolic Profiling: Its Role in Biomarker Discovery and Gene Function Analysis*. (Springer, USA 2012).
47. Hernández, H., Gómez-Hinostrosa, C. & Bárcenas, R. Studies on Mexican Cactaceae. II. *Opuntia megarrhiza*, a poorly known endemic from San Luis Potosí, Mexico. *Brittonia* **53**, 528–533. <https://doi.org/10.1007/bf02809653> (2001).
48. Hernández, H. M., Gómez-Hinostrosa, C., Goettsch, B.K. & Sotomayor, M. *Opuntia megarrhiza*. *The IUCN Red List of Threatened Species 2013*: e.T41219A2952324. <https://dx.doi.org/10.2305/IUCN.UK.2013-1.RLTS.T41219A2952324.en> (2013).

49. Segura-Venegas, D. & Rendón-Aguilar, B. *Opuntia megarrhiza* Rose (Cactaceae) en San Luis Potosí, México: Uso tradicional y distribución de nuevas poblaciones. *Cact. Suc. Mex.* **62**, 36–47 (2016).
50. Bravo-Hollis, H. & Sánchez-Mejorada, H. *Las Cactáceas de México*. (Universidad Nacional Autónoma de México, México, 1991).
51. Hernández, H. & Godínez, A. H. Contribución al conocimiento de las cactáceas mexicanas amenazada. *Acta. Bot. Mex.* **26**, 33–52 <https://doi.org/10.21829/abm26.1994.690> (1994).
52. Bravo-Hollis, H. & Scheinvar, L. *El interesante mundo de las cactáceas*. (Fondo de Cultura Económica. México D.F., 1999).
53. Kim, D. H. *et al.* Molecular Study of Dietary Heptadecane for the Anti-Inflammatory Modulation of NF- κ B in the Aged Kidney. *PLoS ONE* **8**, 1–10 <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0059316> (2013).
54. Rahbar, N., Shafagha, A. & Salimi, F. Antimicrobial activity and constituents of the hexane extracts from leaf and stem of *Origanum vulgare* L. sp. *viride* (Boiss.) Hayek. Growing wild in Northwest Iran. *J. Med. Plant Res.* **6**, 2681–2685 (2012).
55. Adeleye, I. A., Daniels, F. V. & Omadime, M. Characterization of volatile components of epa-ijebu: a native wonder cure recipe. *J. Pharmacol. Toxicol.* **6**, 97–100. <https://doi.org/10.3923/jpt.2011.97.100> (2010).
56. USDA [U.S. Department of Agriculture, Agricultural Research Service] (1992-2016). Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases. Home Page, <https://phytochem.nal.usda.gov/> (2021).
57. Aparna, V. *et al.* Anti-Inflammatory Property of n-Hexadecanoic Acid: Structural Evidence and Kinetic Assessment. *Chem. Biol. Drug Des.* **80**, 434–439. <https://doi.org/10.1111/j.1747-0285.2012.01418.x> (2012).
58. Hsouna, A. B. *et al.* Chemical composition, cytotoxicity effect and antimicrobial activity of *Ceratonia siliqua* essential oil with preservative effects against *Listeria* inoculated in minced beef meat. *Int. J. Food Microbiol.* **148**, 66–72. <https://doi.org/10.1016/j.ijfoodmicro.2011.04.028> (2011).

59. Gehan, M. A., Hanan, A. E., Hassan, A. H. & Okbah, M. A. Marine natural products and their potential applications as anti-infective agents. *World Appl. Sci. J.* **7**, 872–880 (2009).
60. Marrufo, T. *et al.* Chemical composition and biological activity of the essential oil from leaves of *Moringa oleifera* Lam. cultivated in Mozambique. *Molecules* **18**, 10989–11000. <https://doi.org/10.3390/molecules180910989> (2013).
61. Usha Nandhini, S., Sangareshwari, S. & Lata, K. Gas chromatography-mass spectrometry analysis of bioactive constituents from the marine Streptomyces. *Asian J. Pharm. Clin. Res.* **8**, 244–246 (2015).
62. Tiagy, T. & Agarwal, M. Phytochemical screening and GC-MS analysis of bioactive constituents in the ethanolic extract of *Pistia stratiotes* L. and *Eichhornia crassipes* (Mart.) solms. *J. Pharmacogn. Phytochem.* **6**, 195–206 (2017).
63. Olubunmi, A., Gabriel, O. A., Stephen, A. O. & Scott, F. O. Antioxidant and Antimicrobial Activity of Cuticular Wax from *Kigelia africana*. *FABAD Indian J. Pharm. Sci.* **34**, 187–194 (2009).
64. Kim, S., Chung, W., Kim, S., Ko, S. & Um, J. Anti-inflammatory Effect of *Oldenlandia diffusa* and its Constituent, Hentriacontane, through Suppression of Caspase-1 Activation in Mouse Peritoneal Macrophages. *Phytother. Res.* **25**, 1537–1546. <https://doi.org/10.1002/ptr.3443> (2011).
65. Jun, M., Rui-Rui, X., Yao, L., Di-Feng, R. & Jun, L. Composition, Antimicrobial and Antioxidant Activity of Supercritical Fluid Extract of *Elsholtzia ciliata*, *J. Essent. Oil-Bear. Plants* **21**, 556–562. <https://doi.org/10.1080/0972060X.2017.1409657> (2018).
66. Siddiqui, N., Khan, S. A. & Rana, A. Benzothiazoles: A new profile of biological activities. *Indian J. Pharm. Sci.* **69**, 10. <https://doi.org/10.4103/0250-474x.32100> (2007).
67. Hema, R., Kumaravel, S. & Alagusundaram, K. GC/MS Determination of Bioactive components of *Murraya koenigii*. *Am. J. Sci.* **7**, 80–83 (2011).
68. Islam, M. T. *et al.* Phytol: A review of biomedical activities. *Food Chem. Toxicol.* **121**, 82–94. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fct.2018.08.032> (2018).

69. Lee, K. L., Lee, S. H. & Park, K. Anticancer activity of phytol and eicosatrienoic acid identified from *Perilla* leaves. *J. Ethnopharmacol.* **28**, 1107–1112 (1999).
70. Costa, J. P., Ferreira, P. B., Sousa, D. P., Jordan, J. & Freitas R. M. Anticonvulsant effect of phytol in a pilocarpine model in mice. *Neuroscience Letters.* **523**:115–118. <https://doi.org/10.1016/j.neulet.2012.06.055> (2012).
71. Okiei, W., Ogunlesi, M., Ofor, E. & Osibote, E. A. Analysis of essential oil constituents in hydro-distillates of *Calotropis procera* (Ait.). *R. Br. Res. J. Phytochem.* **3**, 44–53. <https://doi.org/10.3923/rjphyto.2009.44.53> (2009).
72. Silva, R. *et al.* Phytol a diterpene alcohol, inhibits the inflammatory response by reducing cytokine production and oxidative stress. *Fundam. Clin. Pharmacol.* **28**, 455–464. <https://doi.org/10.1111/fcp.12049> (2014).
73. Mohammad, G., Omran, A. M. & Hussein, H. Antibacterial and phytochemical analysis of *Piper nigrum* using gas chromatography mass spectrum and fourier-transform infrared spectroscopy. *Int. J. Pharmacogn. Phytochem. Res.* **8**, 977–996 (2016).
74. Saikia, D. *et al.* Antitubercular potential of some semisynthetic analogues of phytol. *Bioorganic. Med. Chem. Lett.* **20**, 508–512. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2009.11.107> (2010).
75. Pongprayoon, U., Baeckström, P., Jacobsson, U., Lindström, M. & Bohlin, L. Antispasmodic activity of beta-damascenone and e-phytol isolated from *Ipomoea pes-caprae*. *Planta Med.* **58**, 19–21. <https://doi.org/10.1055/s-2006-961381> (1992).
76. Agoramoorthy, G., Chandrasekaran, M., Venkatesalu, V. & Hsu, M. J. Antibacterial and antifungal activities of fatty acid methyl esters of the blind-your-eye mangrove from India. *Braz. J. Microbiol.* **38**, 739–742. <https://dx.doi.org/10.1590/S1517-83822007000400028> (2007).
77. Abubakar, M. & Majinda, R. GC-MS analysis and preliminary antimicrobial activity of *Albizia adianthifolia* Schumach and *Pterocarpus angolensis* DC. *Medicines* **3**, 1–9. <https://doi.org/10.3390/medicines3010003> (2016).
78. Sujatha, M., Karthika, K., Sivakamasundari, S., Mariajancyrani, J. & Chandramohan, G. GC-MS analysis of phytocomponents and total antioxidant

- activity of hexane extract of *Sinapis alba*. *Int. J. Pharm. Chem. Biol. Sci.* **4**, 112–117 (2014).
79. Prakash, O. Gondwal, M. & Pant, A. K. Essential oils composition and antioxidant activity of water extract from seeds and fruit pulp of *Skimmia anquetilia* N.P. Taylor & Airy Shaw. *J. Asian Nat. Prod. Res.* **2**, 435–441 (2011).
80. Boussaada, O. *et al.* Chemical composition and antimicrobial activity of volatile components from capitula and aerial parts of *Rhaponticum acaule* DC growing wild in Tunisia. *Microbiol. Res.* **16**, 87–95. <https://doi.org/10.1016/j.micres.2007.02.010> (2008).
81. Krishnan, K., Mani, A. & Jasmine, S. Cytotoxic Activity of Bioactive Compound 1, 2- Benzene Dicarboxylic Acid, Mono 2- Ethylhexyl Ester Extracted from a Marine Derived *Streptomyces* sp. VITSJK8. *Int. J. Mol. Cell Med.* **3**, 246–254 (2014).
82. Fiehn, O, *et al.* Metabolite profiling for plant functional genomics. *Nat. Biotechnol.* **18**, 1157–1161. <https://doi:10.1038/81137> (2000).
83. Roessner, U. *et al.* Metabolic profiling allows comprehensive phenotyping of genetically or environmentally modified plant systems. *Plant Cell* **13**, 11–29. <https://doi:10.1105/tpc.13.1.11> (2001).
84. Roessner, U., Wagner, C., Kopka, J., Trethewey, R. N. & Willmitzer, L. Simultaneous analysis of metabolites in potato tuber by gas chromatography–mass spectrometry. *Plant J.* **23**, 131–142. <https://doi:10.1046/j.1365-313x.2000.00774.x> (2000).
85. Kopka, J. Current challenges and developments in GC-MS based metabolite profiling technology. *J. Biotechnol.* **124**, 312–322. <https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2005.12.012> (2006).
86. Kopka, J. Gas Chromatography Mass Spectrometry. In: Saito K., Dixon R.A., Willmitzer L. (eds) *Plant Metabolomics. Biotechnol. Agric. For.* **57**, 3–20. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/3-540-29782-0_1 (2006).
87. Fiehn, O. Metabolite profiling in *Arabidopsis*. In: Totowa NJ, Salinas J, Sanchez-Serrano JJ (eds) *Arabidopsis protocols. Methods Mol. Biol. Humana Press*, 439–447. <https://doi:10.1385/1-59745-003-0:439> (2006).

88. Fernie, A. R. The future of metabolic phytochemistry: larger numbers of metabolites, higher resolution, greater understanding. *Phytochemistry* **68**, 2861–2880. <https://doi:10.1016/j.phytochem.2007.07.010> (2007).
89. Saito, K. & Matsuda, F. Metabolomics for functional genomics, systems biology, and biotechnology. *Annu. Rev. Plant Biol.* **61**, 463–489. <https://doi:10.1146/annurev.arplant.043008.092035> (2010).
90. Tiago, F. J. *et al.* Massspectrometry-based plant metabolomics: metabolite responses to abiotic stress. *Mass Spectrom. Rev.* **35**, 620–649. <https://doi:10.1002/mas.21449> (2016).
91. Dinesh-Kumar, G. & Rajakumar, R. GC-MS analysis of bioactive compounds from ethanolic leaves extract of *Eichhornia crassipes* (Mart) Solms. and their pharmacological activities. *J. Pharm. Innov.* **7**, 459–462 (2018).
92. Wei, X., Koo, I., Kim, S. & Zhang, X. Compound identification in GC-MS by simultaneously evaluating the mass spectrum and retention index. *The Analyst* **139**, 2507–2514. <https://doi.org/10.1039/C3AN02171H> (2014).
93. Choi, C. W. *et al.* Antioxidant activity and free radical scavenging capacity between Korean medicinal plants and flavonoids by assay-guided comparison. *Plant Sci.* **163**, 1161–1168. [https://doi.org/10.1016/S0168-9452\(02\)00332-1](https://doi.org/10.1016/S0168-9452(02)00332-1) (2002).
94. El Cadi, H. *et al.* Wild strawberry (*Arbutus unedo*): Phytochemical screening and antioxidant properties of fruits collected in northern Morocco. *Arab. J. Chem.* **13**, 6299–6311. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2020.05.022> (2020).
95. NIST/NIH/EPA. Mass Spectral Library Standard Reference Database 1, NIST 11. Standard Reference Data Program, National Institute of Standards and Technology: Gaithersburg, MD, USA. <https://www.nist.gov/srd> (2021)
96. William E, Acree Jr, James S, et al. “NIST Chemistry WebBook”, NIST Standard Reference Database Number 69. Linstrom PJ, Mallard WG, (eds) National Institute of Standards and Technology, USA. <https://doi.org/10.18434/T4D303>. Accessed 28 January 2021 (2013).

Acknowledgments: The first author gratefully acknowledges the support of CONACYT (Graduate Studies Scholarship 1007054). This research was funded by the international cooperative research of Rural Development Administration (RDA) from Republic of Korea, (grant PJ012429012016 to PDS) and CONACyT (grant 2014-243454 to JADN). We thank Bertha Irene Juárez Flores (IIZD Labs) for laboratory training and advice.

Author Contributions: MC carried out the study, performed the GC-MS analyses, compile the antimicrobial activity, and wrote the initial version of the paper. ADN supervised the work, collected the plant, realized the botanical identification, wrote the initial version of the paper, and performed the final critical review of the paper. PDS create the original idea of the research, designed the experiments, supervised the work and performing the final critical review of the paper. MLGG performed the final critical review of the paper. FJPV assisted in determining the chromatographic conditions and performed the GC-MS analyses, and performed the final critical review of the paper. KBMR assisted in determining the chromatographic conditions and performed the GC-MS analyses, and performed the final critical review of the paper.



Figure 1. *Opuntia megarrhiza* Rose from wild populations. (a) Herbarium specimen from the studied locality; (b) Flowering adult plant; (c) Adult plant showing part of its characteristic massive roots. Photos (a) and (b) by J.A. de Nova, (c) by P. Delgado.

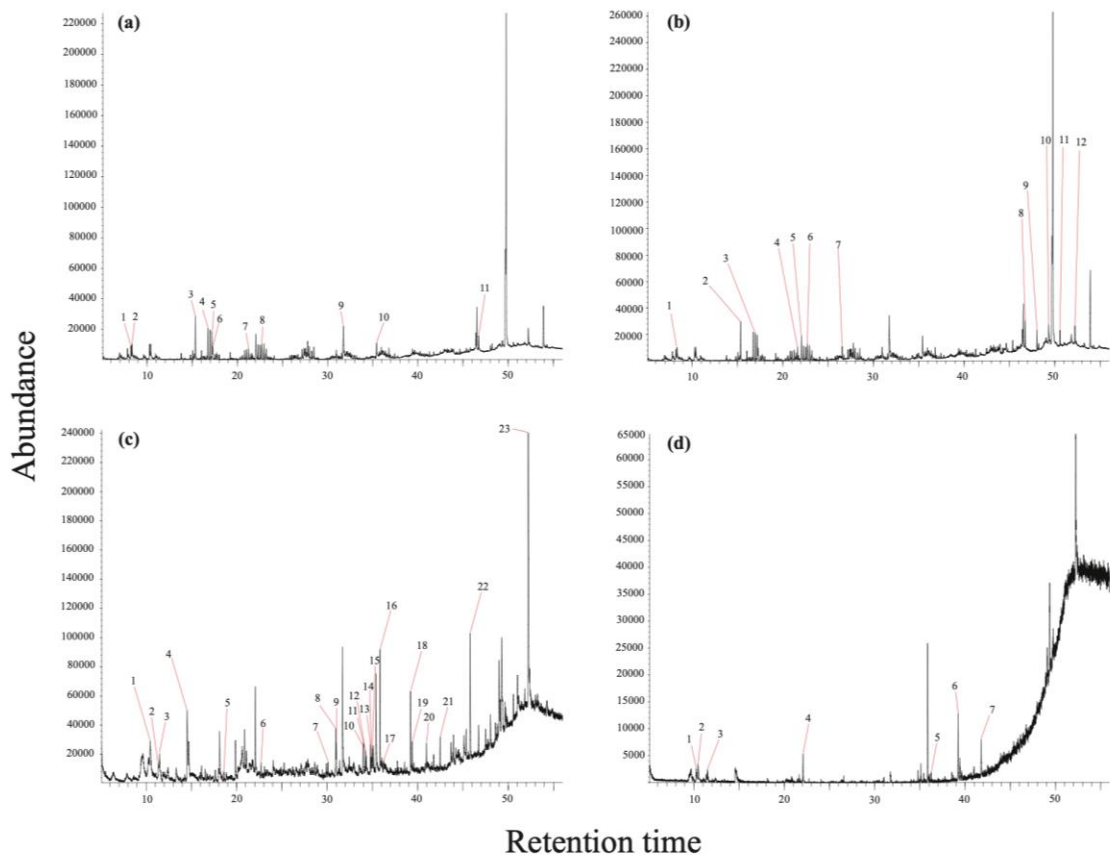


Figure 2. GC-MS chromatograms. (a) MeOTH extract with PVDF filter, (b) MeOTH extract with PTFE filter. (c) CH₃CN extract with PVDF filter, and (d) CH₃CN extract with PTFE filter.

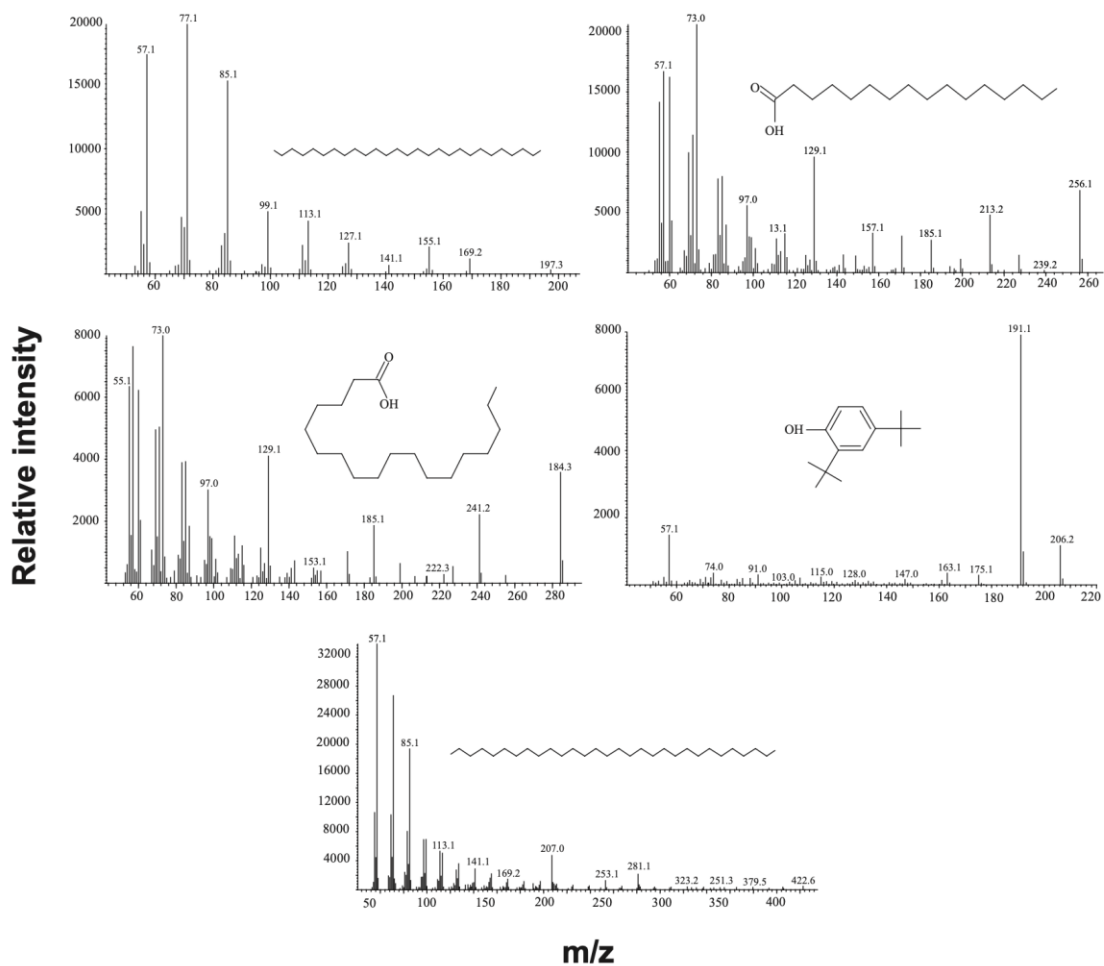


Figure 3. Mass spectra and chemical structure of some phytochemical compounds identified by GC-MS in the CH₃CN and MeOH extracts of *Opuntia megarrhiza*. **(a)** Heptacosane MetOH3/PTFE; **(b)** n-hexadecanoic acid MetOH3/PVDF; **(c)** octadecanoic acid MetOH3/PVDF; **(d)** Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl) MetOH3/PTFE; **(e)** Triacontane MetOH3/PTFE.

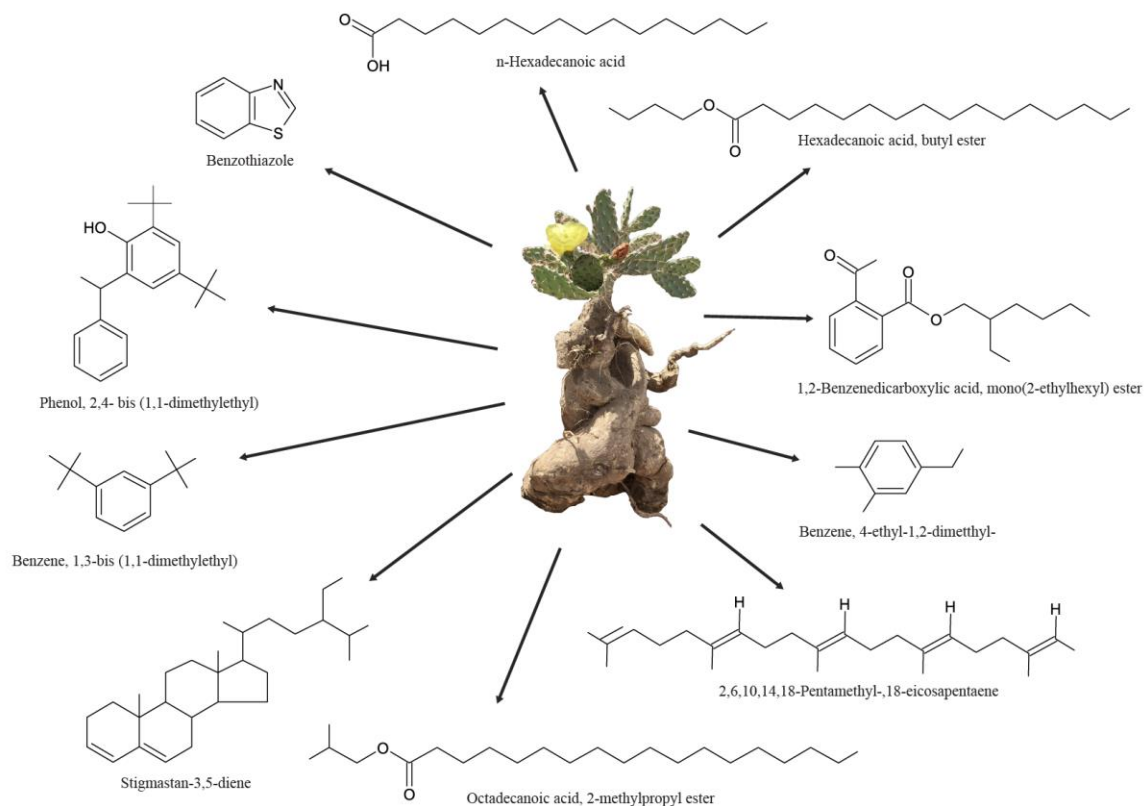


Figure 4. Chemical structures of the most prevailing phytochemical compounds of *Opuntia megarrhiza* identified in GC-MS analysis in CH₃CN and MeOH extracts with PVDF and PTFE filters.

Table 1. Phytochemical compounds identified by GC-MS from MeOH extract with PVDF filter. RT: Retention time. *Percentage of similarity to the reference spectrum of the NIST library.

Peak No.	RT (min)	Name of the compound	Molecular Weight (g/mol)	Peak area (%)	*Similarity (%)	Molecular formula	Compound nature
1	8.21	Octane, 2,3,6,7-tetramethyl-	170.33	1.17	64	C ₁₂ H ₂₆	Alkane
2	8.33	Decane, 2,3,5,8-tetramethyl	198.38	1.78	64	C ₁₄ H ₃₀	Alkane
3	15.35	Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)	190.32	4.19	95	C ₁₄ H ₂₂	Aromatic Hydrocarbon
4	16.74	R-(+)-Methyl-2-isopropyl-5-oxohexanoate	186.25	2.78	53	C ₁₀ H ₁₈ O	Ester
5	17.20	4-Isopropyl-1,3-cyclohexanedione	154.21	2.19	60	C ₉ H ₁₄ O ₂	Ketone
6	17.28	Heptadecane	240.46	1.03	59	C ₁₇ H ₃₆	Alkane

7	21.25	Hexadecane, 7-methyl-	240.46	1.00	72	C ₁₇ H ₃₆	Alkane
8	22.69	Decane, 2,3,6-trimethyl-	184.36	1.80	64	C ₁₃ H ₂₈	Alkane
9	31.75	n-Hexadecanoic acid	256.42	4.67	97	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	Fatty acid
10	35.43	Octadecanoic acid	284.47	2.47	93	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	Fatty acid
11	46.72	Tetrapentacontane, 1,54-dibromo-	917.2	1.41	76	C ₅₄ H ₁₀₈ Br ₂	Halogenated hydrocarbon

Table 2. Phytochemical compounds identified by GC-MS from MetOH extract with PTFE filter. RT: Retention time. *Percentage of similarity to the reference spectrum of the NIST library.

Peak No.	RT (min)	Name of the compound	Molecular Weight (g/mol)	Peak area (%)	*Similarity (%)	Molecular formula	Compound nature
1	8.33	Decane, 4-methyl-	156.30	1.44	64	C ₁₁ H ₂₄	Alkane
2	15.35	Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-	190.32	3.53	95	C ₁₄ H ₂₂	Aromatic Hydrocarbon
3	17.20	4-Isopropyl-1,3-cyclohexanedione	154.21	1.84	53	C ₉ H ₁₄ O ₂	Ketone
4	21.61	Heptacosane	380.73	0.98	83	C ₂₇ H ₅₆	Alkane
5	22.05	Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)	206.32	2.13	97	C ₁₄ H ₂₂ O	Aromatic Hydrocarbon
6	22.69	Pentacosane	352.68	1.66	64	C ₂₅ H ₅₂	Alkane
7	26.55	Heneicosane	296.57	0.98	90	C ₂₁ H ₄₄	Alkane
8	46.73	Nonacosane	408.8	2.28	95	C ₂₉ H ₆₀	Alkane
9	48.04	Triacontane	422.81	1.4	96	C ₃₀ H ₆₂	Alkane
10	49.33	Hentriacontane	436.83	1.63	93	C ₃₁ H ₆₄	Alkane
11	50.57	Octacosane	394.76	1.28	95	C ₂₈ H ₅₈	Alkane
12	52.22	gamma-Sitosterol	414.70	1.76	90	C ₂₉ H ₅₀ O	Lipids

Table 3. Phytochemical compounds identified by GC-MS from CHCL₃ extract with PVDF filter. RT:

Retention time. *Percentage of similarity to the reference spectrum of the NIST library.

Peak No.	RT (min)	Name of the compound	Molecular Weight (g/mol)	Peak area (%)	*Similarity (%)	Molecular formula	Compound nature
1	10.45	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	134.21	2.27	93	C ₁₀ H ₁₄	Aromatic Hydrocarbon
2	11.34	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	134.21	0.51	81	C ₁₀ H ₁₄	Aromatic Hydrocarbon
3	11.47	1,3-Cyclopentadiene, 1,2,3,4-tetramethyl-5-methylene-	134.21	0.82	95	C ₁₀ H ₁₄	Alkene
4	14.53	Benzothiazole	135.18	5.33	95	C ₇ H ₅ NS	Aromatic Hydrocarbon
5	18.59	Phytol	296.53	0.45	42	C ₂₀ H ₄₀ O	Alcohol
6	22.70	2H-Pyran-2-one, 6-hexyltetrahydro-	184.27	0.58	59	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	Ketone
7	30.09	5-Octadecene, (E)-	252.47	0.67	78	C ₁₈ H ₃₄	Alkene
8	30.95	7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	276.37	1.61	50	C ₁₇ H ₂₄ O ₃	Ketone
9	31.01	Hexadecanoic acid, methyl ester	270.45	1.1	93	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	Fatty acid
10	33.98	9-Octadecene, (E)-	252.5	1.65	89	C ₁₈ H ₃₆	Alkene
11	34.20	9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)-, methyl ester	294.47	0.65	96	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	Fatty acid
12	34.31	2-Methyl-Z,Z-3,13-octadecadienol	280.5	0.45	53	C ₁₉ H ₃₆ O	Alcohol
13	34.78	Octadecanoic acid, methyl ester	298.50	0.97	93	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	Fatty acid
14	34.88	Tridecanedial	212.33	0.58	62	C ₁₃ H ₂₄ O ₂	Aldehyde
15	34.97	Aspidospermidin-17-ol, 1-acetyl-epoxy-15,16-dimethoxy	414.5	0.84	52	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O ₅	Ketone
16	35.84	Hexadecanoic acid, butyl ester	312.53	4.83	87	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	Fatty acid
17	36.24	Phosphonic acid, dioctadecyl ester	585.9	0.55	53	C ₃₆ H ₇₄ O ₃ P ⁺	Fatty acid
18	39.21	Octadecanoic acid, 2-methylpropyl ester	340.58	3.10	87	C ₂₂ H ₄₄ O ₂	Fatty acid
19	39.39	Tetratriacontane	478.91	0.92	90	C ₃₄ H ₇₀	Alkane
20	40.96	Tetrapentacontane	759.45	0.93	80	C ₅₄ H ₁₁₀	Alkane
21	42.48	Eicosane	282	1.34	68	C ₂₀ H ₄₂	Alkane
22	45.81	2,6,10,14,18-Pentamethyl-,18-eicosapentaene	350.6	4.80	74	C ₂₅ H ₅₀	Alkene
23	52.21	Stigmastan-3,5-diene	396.7	13.80	60	C ₂₉ H ₄₈	Alkene

Table 4. Phytochemical compounds identified by GC-MS from CHCl₃ extract with PTFE filter RT: Retention time. *Percentage of similarity to the reference spectrum of the NIST library.

Peak No.	RT (min)	Name of the compound	Molecular Weight (g/mol)	Peak area (%)	*Similarity (%)	Molecular formula	Compound nature
1	10.25	Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	134.21	2.51	64	C ₁₀ H ₁₄	Aromatic Hydrocarbon
2	10.45	Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	134.21	4.24	80	C ₁₀ H ₁₄	Aromatic Hydrocarbon
3	11.48	Benzene, 2-ethyl-1,3-dimethyl-	134.21	0.83	74	C ₁₀ H ₁₄	Aromatic Hydrocarbon
4	22.07	Phenol, bis(1,1-dimethylethyl)-	206.32	5.28	83	C ₁₄ H ₂₂ O	Aromatic Hydrocarbon
5	36.26	Cyclohexane, 1-(1,5-dimethylhexyl)-4-(4-methylpentyl)-	280.53	1.20	53	C ₂₀ H ₄₀	Alkane
6	39.22	Octadecanoic acid, 2-methylpropyl ester	340.58	10.83	90	C ₂₂ H ₄₄ O ₂	Fatty acid
7	41.77	1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono (2-ethylhexyl) ester	278.34	7.55	53	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	Ester

Table 5. Number and type of phytochemical compounds in *Opuntia megarrhiza* by extract and filter. Alkanes (A), aromatic hydrocarbons (AH), esters (E), ketones (K), halogenated hydrocarbons (HH), alcohols (Al), aldehydes (Ad), alkenes (Ak), lipids (L), fatty acids (FA).

Extract/ Filter	A	AH	E	K	HH	Al	Ad	Ak	L	FA	Total
MetOH ₃ /PVDF	5	1	1	1	1	0	0	0	0	2	11
MetOH ₃ /PTFE	8	2	0	1	0	0	0	0	1	0	12
CHCl ₃ / PVDF	3	3	0	3	0	2	1	5	0	6	23
CHCl ₃ / PTFE	1	4	1	0	0	0	0	0	0	1	7
Total	17	10	2	5	1	2	1	5	1	9	53

Table 6. Phytochemical compounds with biological activity identified by GC-MS in MeOTH extract. m/z: mass-to-charge ratio. *Percentage of similarity to the reference spectrum of the NIST library.

Peak No.	RT (min)	Name of the compound	Molecular Weight (g/mol)	Peak area (%)	Molecular formula	Ions (m/z)	*Similarity (%)	Compound Nature	Biological activity
PVDF filter									
1	17.28	Heptadecane	240.46	1.03	C ₁₇ H ₃₆	57, 71, 85	59	Alkane	Anti-inflammatory and antioxidative ⁵³ , Antimicrobial ⁵⁴ , Antifungal ⁵⁵
2	31.75	n-Hexadecanoic acid	256.42	4.67	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	57, 73, 129	97	Fatty acid	Antiallopathic, anti-androgenic, antifibrinolytic, antioxidant, antipsychotic, hemolytic, hypocholesterolemic, nematicide, pesticide and 5-Alpha reductase inhibitor ⁵⁶
3	35.43	Octadecanoic acid	284.47	2.14	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	73, 55, 129	93	Fatty acid	Anti-inflammatory ⁵⁷ Antibacterial, antifungal and antitumoral ^{58,59}
PTFE filter									
1	21.61	Heptacosane	380.73	0.98	C ₂₇ H ₅₆	57, 71, 85	83	Alkane	Antioxidant ⁶⁰
2	22.05	Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)	206.32	2.13	C ₁₄ H ₂₂ O	191, 57, 206	97	Aromatic hydrocarbon	Anti-inflammatory, antimicrobial and Antioxidant ⁵⁶
3	22.69	Pentacosane	352.68	1.66	C ₂₅ H ₅₂	57, 71, 85	64	Alkane	Antimicrobial and antioxidant ⁶⁰
4	26.55	Heneicosane	296.57	0.96	C ₂₁ H ₄₄	85,71,57	90	Alkane	Antiasthmatics, urine acidifiers and antimicrobial ⁶¹
5	48.04	Triacotane	422.81	1.4	C ₃₀ H ₆₂	57, 85, 113	96	Alkane	Antidiabetic, antitumor and antibacterial ⁶² Antimicrobial and cytotoxic ⁵⁸
6	49.33	Hentriacontane	436.83	1.63	C ₃₁ H ₆₄	57, 85, 113	93	Alkane	Antibacterial activity ⁶³ Anti-inflammatory ⁶⁴
7	50.57	Octacosane	394.76	1.28	C ₂₈ H ₅₈	57, 141, 239	95	Alkane	Antimicrobial and antioxidant ⁶⁵

Table 7. Phytochemical compounds with biological activity identified by GC-MS in CH₃CN extract. m/z: mass-to-charge ratio. *Percentage of similarity to the reference spectrum of the NIST library.

Peak No.	RT (min)	Name of the compound	Molecular Weight (g/mol)	Peak area (%)	Molecular formula	Ions (m/z)	*Similarity (%)	Compound Nature	Biological activity
PVDF filter									
1	14.53	Benzothiazole	135.18	5.33	C ₇ H ₅ NS	135, 108, 69	95	Aromatic	Anticonvulsant, anti-inflammatory, antileishmanial, antimicrobial and antitumor ⁶⁶
2	18.59	Phytol	296.53	0.45	C ₂₀ H ₄₀ O	55, 71, 81	42	Hydrocarbon Alcohol	Antibacterial, antifungal, antimalaria, analgesic and stimulant ⁶⁷ Antimicrobial ⁶⁸ Anticarcinogen ^{56, 67, 69} Anticonvulsant ⁷⁰ Anti-inflammatory, antinociceptive ^{68, 71, 72} Antioxidant ^{68, 73} Antitubercular ⁷⁴ Antispasmodic ⁷⁵ Anxiolytic, cell autophagy and apoptosis inducer metabolism-modulating, cytotoxic and immune-modulating ⁶⁸ Antioxidant ⁵⁶
3	30.95	7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	276.37	1.61	C ₁₇ H ₂₄ O ₃	57, 175, 217	50	Ketone	
4	31.01	Hexadecanoic acid, methyl ester	270.45	1.1	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	74, 143, 227 74, 87, 43, 55, 143	93	Fatty Acid	Antibacterial ⁷⁶ Antifungal, anti-inflammatory and blood cholesterol decrease ⁶⁷ Antioxidant ^{67, 76}
5	34.78	Octadecanoic acid, methyl ester	298.50	0.97	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	143, 74, 55	93	Fatty Acid	Antimicrobial ⁷⁷
6	35.84	Hexadecanoic acid, butyl ester	312.53	4.83	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	257, 129, 56	87	Fatty Acid	Antimicrobial ⁷⁸ Antioxidant ⁷⁹
7	42.48	Eicosane	282	1.34	C ₂₀ H ₄₂	113, 85, 57	68	Alkane	Antibacterial ^{58, 80} Antifungal, antitumor and cytotoxic ⁵⁸
PTFE filter									
1	41.77	1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono (2-ethylhexyl) ester	278.34	7.55	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	149, 167, 112	53	Ester	Cytotoxic ⁸¹

CONCLUSIÓN

En la presente investigación se identificaron compuestos fitoquímicos volátiles presentes en *Opuntia megarrhiza*, a partir de extractos de cladodios, mediante un análisis de GC-MS. Se demostró la presencia de 53 compuestos fitoquímicos, de los cuales 18 cuentan con reportes de actividad biológica en otras especies vegetales, por ejemplo el Ácido n-hexadecanoico, Fenol, el 2,4-bis(1,1-dimetiletilo), Hentriacontano, Benzotiazol y Ácido hexadecanoico, butil éster, que son de utilidad en áreas como la industria agrícola y farmacéutica. La presencia de algunos de los compuestos bioactivos detectados en *O. megarrhiza* justifica el uso de la planta por parte de la medicina tradicional para el tratamiento de fracturas, en especial los que tienen actividad anti-inflamatoria. Los resultados de esta investigación alientan a estudios posteriores para el aislamiento de componentes fitoquímicos individuales y la evaluación de su actividad biológica en modelos *in vivo* e *in vitro*.