

# SUPPLEMENTARY MATERIAL

## Oleacein and oleocanthal: key metabolites in the stability of extra virgin olive oil

Alexandra Olmo-Cunillera <sup>1,2</sup>, Maria Pérez <sup>1,2</sup>, Anallely López-Yerena <sup>1</sup>, Mohamed M. Abuhabib <sup>1</sup>, Antònia Ninot <sup>3</sup>, Agustí Romero-Aroca <sup>3</sup>, Anna Vallverdú-Queralt <sup>1,2</sup>, and Rosa Maria Lamuela-Raventós <sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup> Polyphenol Research Group, Department of Nutrition, Food Science and Gastronomy, Catalonia Food Innovation Network (XIA), Faculty of Pharmacy and Food Sciences, Institute of Nutrition and Food Safety (INSA-UB), University of Barcelona, 08028 Barcelona, Spain; alexandra.olmo@ub.edu; mariaperez@ub.edu; nayelopezye@ub.edu; mabuhaab8@alumnes.ub.edu; avallverdu@ub.edu

<sup>2</sup> CIBER Physiopathology of Obesity and Nutrition (CIBEROBN), Instituto de Salud Carlos III, 28029 Madrid, Spain.

<sup>3</sup> Institute of Agrifood Research and Technology (IRTA), Fruit Science Program, Olive Growing and Oil Technology Research Team, 43120 Constantí, Spain; antonia.ninot@irta.cat; agusti.romero@irta.cat

\* Correspondence: lamuela@ub.edu

**Table S1.** Concentration of fatty acids (mg/g). Results are expressed as mean  $\pm$  standard deviation, n = 9. Different letters mean significant differences ( $p < 0.05$ ) between samples with increasing letters indicating increasing values. Letters are used for the malaxation study, and Greek letters for the olive storage study.

Sample ID	O1	O2	O3	O4	O5	O6
Production date	13/10/2021	13/10/2021	13/10/2021	14/10/2021	14/10/2021	14/10/2021
Malaxation temperature (°C)	18	18	18	18	23	23
Malaxation time (min)	30	40	50	30	30	40
<i>FAs (mg/g)</i>						
C14:0	0.16 $\pm$ 0.02 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	0.17 $\pm$ 0.02 <sup>a</sup>	0.17 $\pm$ 0.03 <sup>a</sup>	0.16 $\pm$ 0.02 <sup><math>\alpha</math></sup>	0.17 $\pm$ 0.02 <sup>a</sup>	0.18 $\pm$ 0.02 <sup>a</sup>
C15:0	0.07 $\pm$ 0.01 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	0.08 $\pm$ 0.01 <sup>a</sup>	0.09 $\pm$ 0.02 <sup>bc</sup>	0.09 $\pm$ 0.01 <sup><math>\beta</math></sup>	0.08 $\pm$ 0.01 <sup>ab</sup>	0.10 $\pm$ 0.02 <sup>c</sup>
C15:1	0.08 $\pm$ 0.01 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	0.10 $\pm$ 0.01 <sup>b</sup>	0.11 $\pm$ 0.01 <sup>b</sup>	0.10 $\pm$ 0.01 <sup><math>\beta</math></sup>	0.10 $\pm$ 0.01 <sup>a</sup>	0.11 $\pm$ 0.02 <sup>b</sup>
C16:0	97.72 $\pm$ 5.20 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	96.49 $\pm$ 2.62 <sup>a</sup>	96.97 $\pm$ 7.22 <sup>a</sup>	95.61 $\pm$ 5.36 <sup><math>\alpha</math></sup>	99.52 $\pm$ 4.55 <sup>a</sup>	102.77 $\pm$ 6.61 <sup>a</sup>
C16:1 n-9	0.45 $\pm$ 0.02 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	0.44 $\pm$ 0.02 <sup>a</sup>	0.42 $\pm$ 0.03 <sup>a</sup>	0.46 $\pm$ 0.02 <sup><math>\alpha</math></sup>	0.51 $\pm$ 0.02 <sup>b</sup>	0.49 $\pm$ 0.03 <sup>b</sup>
C16:1 n-7	4.92 $\pm$ 0.29 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	5.10 $\pm$ 0.17 <sup>abc</sup>	5.25 $\pm$ 0.35 <sup>abc</sup>	4.95 $\pm$ 0.28 <sup><math>\alpha</math></sup>	5.03 $\pm$ 0.26 <sup>ab</sup>	5.53 $\pm$ 0.42 <sup>c</sup>
C17:0	0.28 $\pm$ 0.02 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	0.28 $\pm$ 0.01 <sup>a</sup>	0.28 $\pm$ 0.02 <sup>a</sup>	0.28 $\pm$ 0.02 <sup><math>\alpha</math></sup>	0.31 $\pm$ 0.03 <sup>a</sup>	0.30 $\pm$ 0.03 <sup>a</sup>
C17:1	0.50 $\pm$ 0.03 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	0.50 $\pm$ 0.02 <sup>a</sup>	0.50 $\pm$ 0.04 <sup>a</sup>	0.51 $\pm$ 0.03 <sup><math>\alpha</math></sup>	0.56 $\pm$ 0.04 <sup>b</sup>	0.56 $\pm$ 0.03 <sup>b</sup>
C18:0	15.67 $\pm$ 0.84 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	15.54 $\pm$ 0.50 <sup>a</sup>	15.58 $\pm$ 1.06 <sup>a</sup>	15.12 $\pm$ 0.86 <sup><math>\alpha</math></sup>	15.18 $\pm$ 0.69 <sup>a</sup>	15.40 $\pm$ 0.97 <sup>a</sup>
C18:1 n-9	660.19 $\pm$ 35.30 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	649.98 $\pm$ 21.45 <sup>a</sup>	643.28 $\pm$ 47.38 <sup>a</sup>	639.69 $\pm$ 35.78 <sup><math>\alpha</math></sup>	662.01 $\pm$ 28.07 <sup>a</sup>	676.46 $\pm$ 42.20 <sup>a</sup>
C18:2 n-6	45.55 $\pm$ 2.77 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	46.67 $\pm$ 1.58 <sup>a</sup>	48.08 $\pm$ 3.41 <sup>a</sup>	50.51 $\pm$ 2.84 <sup><math>\beta</math></sup>	56.97 $\pm$ 2.56 <sup>b</sup>	53.29 $\pm$ 3.43 <sup>b</sup>
C18:3 n-3	4.39 $\pm$ 0.26 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	4.35 $\pm$ 0.14 <sup>a</sup>	4.32 $\pm$ 0.30 <sup>a</sup>	4.47 $\pm$ 0.25 <sup><math>\alpha</math></sup>	4.82 $\pm$ 0.21 <sup>b</sup>	4.80 $\pm$ 0.30 <sup>b</sup>
C20:0	2.46 $\pm$ 0.13 <sup>a,<math>\alpha</math></sup>	2.42 $\pm$ 0.07 <sup>a</sup>	2.37 $\pm$ 0.17 <sup>a</sup>	2.34 $\pm$ 0.13 <sup><math>\alpha</math></sup>	2.41 $\pm$ 0.11 <sup>a</sup>	2.45 $\pm$ 0.16 <sup>a</sup>
C20:1 n-9	1.73 $\pm$ 0.09 <sup>ab,<math>\alpha</math></sup>	1.71 $\pm$ 0.06 <sup>ab</sup>	1.67 $\pm$ 0.12 <sup>a</sup>	1.71 $\pm$ 0.10 <sup><math>\alpha</math></sup>	1.84 $\pm$ 0.09 <sup>b</sup>	1.82 $\pm$ 0.12 <sup>b</sup>
C20:2 n-6	0.35 $\pm$ 0.04 <sup>c,<math>\beta</math></sup>	0.26 $\pm$ 0.03 <sup>a</sup>	0.31 $\pm$ 0.05 <sup>bc</sup>	0.27 $\pm$ 0.03 <sup><math>\alpha</math></sup>	0.29 $\pm$ 0.03 <sup>ab</sup>	0.27 $\pm$ 0.03 <sup>ab</sup>
C21:0	0.07 $\pm$ 0.02 <sup>b,<math>\alpha</math></sup>	0.06 $\pm$ 0.00 <sup>ab</sup>	0.05 $\pm$ 0.00 <sup>a</sup>	0.06 $\pm$ 0.01 <sup><math>\alpha</math></sup>	0.06 $\pm$ 0.01 <sup>ab</sup>	0.06 $\pm$ 0.00 <sup>ab</sup>
C22:0	0.82 $\pm$ 0.05 <sup>b,<math>\beta</math></sup>	0.73 $\pm$ 0.03 <sup>a</sup>	0.70 $\pm$ 0.05 <sup>a</sup>	0.70 $\pm$ 0.04 <sup><math>\alpha</math></sup>	0.74 $\pm$ 0.03 <sup>a</sup>	0.73 $\pm$ 0.05 <sup>a</sup>

C22:1 n-9	0.14 ± 0.05 <sup>b,β</sup>	0.06 ± 0.01 <sup>a</sup>	0.04 ± 0.00 <sup>a</sup>	0.05 ± 0.01 <sup>α</sup>	0.05 ± 0.01 <sup>a</sup>	0.04 ± 0.01 <sup>a</sup>
C22:2 n-6	0.27 ± 0.06 <sup>b,β</sup>	0.17 ± 0.02 <sup>a</sup>	0.14 ± 0.01 <sup>a</sup>	0.15 ± 0.02 <sup>α</sup>	0.16 ± 0.01 <sup>a</sup>	0.16 ± 0.02 <sup>a</sup>
C23:0	0.25 ± 0.11 <sup>b,β</sup>	0.14 ± 0.03 <sup>a</sup>	0.11 ± 0.03 <sup>a</sup>	0.13 ± 0.03 <sup>α</sup>	0.11 ± 0.02 <sup>a</sup>	0.13 ± 0.02 <sup>a</sup>
C24:0	0.81 ± 0.14 <sup>b,β</sup>	0.55 ± 0.04 <sup>a</sup>	0.49 ± 0.03 <sup>a</sup>	0.50 ± 0.03 <sup>α</sup>	0.52 ± 0.02 <sup>a</sup>	0.52 ± 0.04 <sup>a</sup>
Sum of FAs	836.88 ± 44.66 <sup>a,α</sup>	825.82 ± 26.68 <sup>a</sup>	820.96 ± 60.15 <sup>a</sup>	817.80 ± 45.78 <sup>α</sup>	851.49 ± 36.53 <sup>a</sup>	866.36 ± 54.46 <sup>a</sup>
SFA	118.30 ± 6.04 <sup>a,α</sup>	116.48 ± 3.29 <sup>a</sup>	116.82 ± 8.56 <sup>a</sup>	114.98 ± 6.43 <sup>α</sup>	119.13 ± 5.39 <sup>a</sup>	122.63 ± 7.85 <sup>a</sup>
MUFA	668.01 ± 35.70 <sup>a,α</sup>	657.89 ± 21.70 <sup>a</sup>	651.28 ± 47.92 <sup>a</sup>	647.47 ± 36.20 <sup>α</sup>	670.11 ± 28.39 <sup>a</sup>	685.20 ± 42.86 <sup>a</sup>
PUFA	50.57 ± 2.98 <sup>a,α</sup>	51.45 ± 1.75 <sup>a</sup>	52.86 ± 3.70 <sup>a</sup>	55.35 ± 3.16 <sup>β</sup>	62.24 ± 2.78 <sup>b</sup>	58.53 ± 3.76 <sup>b</sup>
MUFA/PUFA	13.21 ± 0.17 <sup>e,β</sup>	12.79 ± 0.05 <sup>d</sup>	12.32 ± 0.08 <sup>c</sup>	11.70 ± 0.04 <sup>α</sup>	10.77 ± 0.04 <sup>a</sup>	11.71 ± 0.03 <sup>b</sup>
oleic/linoleic	14.50 ± 0.20 <sup>e,β</sup>	13.93 ± 0.05 <sup>d</sup>	13.38 ± 0.08 <sup>c</sup>	12.66 ± 0.03 <sup>α</sup>	11.62 ± 0.04 <sup>a</sup>	12.69 ± 0.03 <sup>b</sup>

---

**Table S2.** Fatty acid composition (%). Results are expressed as mean  $\pm$  standard deviation, n = 9.

FAs (%)	O1	O2	O3	O4	O5	O6
C14:0	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00
C15:0	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00
C15:1	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00
C16:0	11.68 $\pm$ 0.04	11.69 $\pm$ 0.08	11.81 $\pm$ 0.06	11.69 $\pm$ 0.04	11.69 $\pm$ 0.07	11.86 $\pm$ 0.03
C16:1 n-9	0.05 $\pm$ 0.00	0.05 $\pm$ 0.00	0.05 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00
C16:1 n-7	0.59 $\pm$ 0.01	0.62 $\pm$ 0.00	0.64 $\pm$ 0.01	0.61 $\pm$ 0.00	0.59 $\pm$ 0.02	0.64 $\pm$ 0.02
C17:0	0.03 $\pm$ 0.00	0.03 $\pm$ 0.00	0.03 $\pm$ 0.00	0.03 $\pm$ 0.00	0.04 $\pm$ 0.00	0.03 $\pm$ 0.00
C17:1	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.07 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00
C18:0	1.87 $\pm$ 0.02	1.88 $\pm$ 0.01	1.90 $\pm$ 0.02	1.85 $\pm$ 0.00	1.78 $\pm$ 0.01	1.78 $\pm$ 0.01
C18:1 n-9	78.89 $\pm$ 0.09	78.71 $\pm$ 0.09	78.35 $\pm$ 0.09	78.22 $\pm$ 0.04	77.75 $\pm$ 0.08	78.08 $\pm$ 0.1
C18:2 n-6	5.44 $\pm$ 0.07	5.65 $\pm$ 0.02	5.86 $\pm$ 0.03	6.18 $\pm$ 0.02	6.69 $\pm$ 0.02	6.15 $\pm$ 0.01
C18:3 n-3	0.52 $\pm$ 0.01	0.53 $\pm$ 0.00	0.53 $\pm$ 0.01	0.55 $\pm$ 0.00	0.57 $\pm$ 0.00	0.55 $\pm$ 0.00
C20:0	0.29 $\pm$ 0.00	0.29 $\pm$ 0.00	0.29 $\pm$ 0.00	0.29 $\pm$ 0.00	0.28 $\pm$ 0.00	0.28 $\pm$ 0.00
C20:1 n-9	0.21 $\pm$ 0.00	0.21 $\pm$ 0.00	0.20 $\pm$ 0.00	0.21 $\pm$ 0.00	0.22 $\pm$ 0.01	0.21 $\pm$ 0.00
C20:2 n-6	0.04 $\pm$ 0.01	0.03 $\pm$ 0.00	0.04 $\pm$ 0.01	0.03 $\pm$ 0.00	0.03 $\pm$ 0.00	0.03 $\pm$ 0.00
C21:0	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00
C22:0	0.10 $\pm$ 0.01	0.09 $\pm$ 0.00	0.08 $\pm$ 0.00	0.09 $\pm$ 0.00	0.09 $\pm$ 0.00	0.08 $\pm$ 0.00
C22:1 n-9	0.02 $\pm$ 0.01	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.00 $\pm$ 0.00
C22:2 n-6	0.03 $\pm$ 0.01	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00
C23:0	0.03 $\pm$ 0.01	0.02 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.02 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00	0.01 $\pm$ 0.00
C24:0	0.10 $\pm$ 0.02	0.07 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00	0.06 $\pm$ 0.00