Supplementary Information

New insight into the Role of the Calvin cycle: Reutilization of CO_2 Emitted through Sugar Degradation

Rie Shimizu [1], Yudai Dempo[2], Yasumune Nakayama[2], Satoshi Nakamura[1],

Takeshi Bamba[2], Eiichiro Fukusaki[2], and Toshiaki Fukui[1*]

[1]*Department of Bioengineering, Graduate School of Bioscience and Biotechnology, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama 226-8501, Japan*

[2]*Department of Biotechnology, Graduate School of Engineering, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka 565-0871, Japan*

*Corresponding author

Mailing address: tfukui@bio.titech.ac.jp

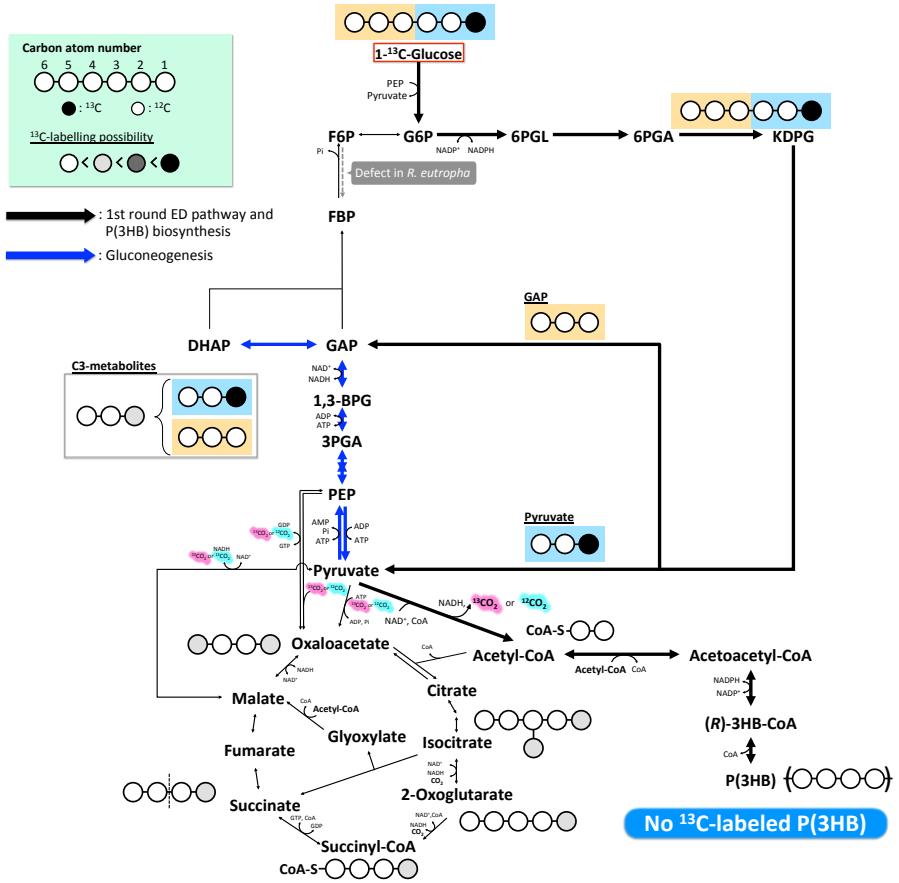

Fig. S1. Distribution of ^{13}C derived from 1-$^{13}C_1$-glucose *via* ED pathway, anaplerosis, and TCA cycles in *R. eutropha*

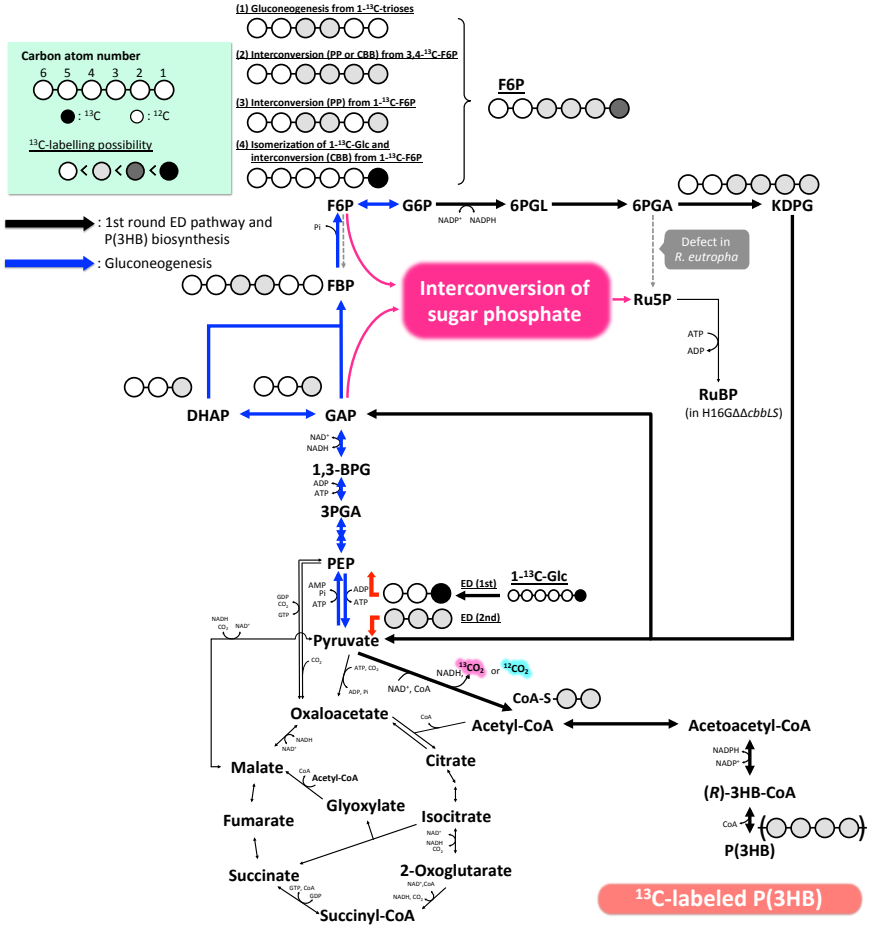

Fig. S2. Distribution of ^{13}C derived from [1-$^{13}C_1$]-glucose *via* ED pathway in combination with gluconeogenesis and interconversion of sugar phosphates in PP and CBB cycles in *R. eutropha* H16GΔ*cbbR* and H16GΔΔ*cbbLS*

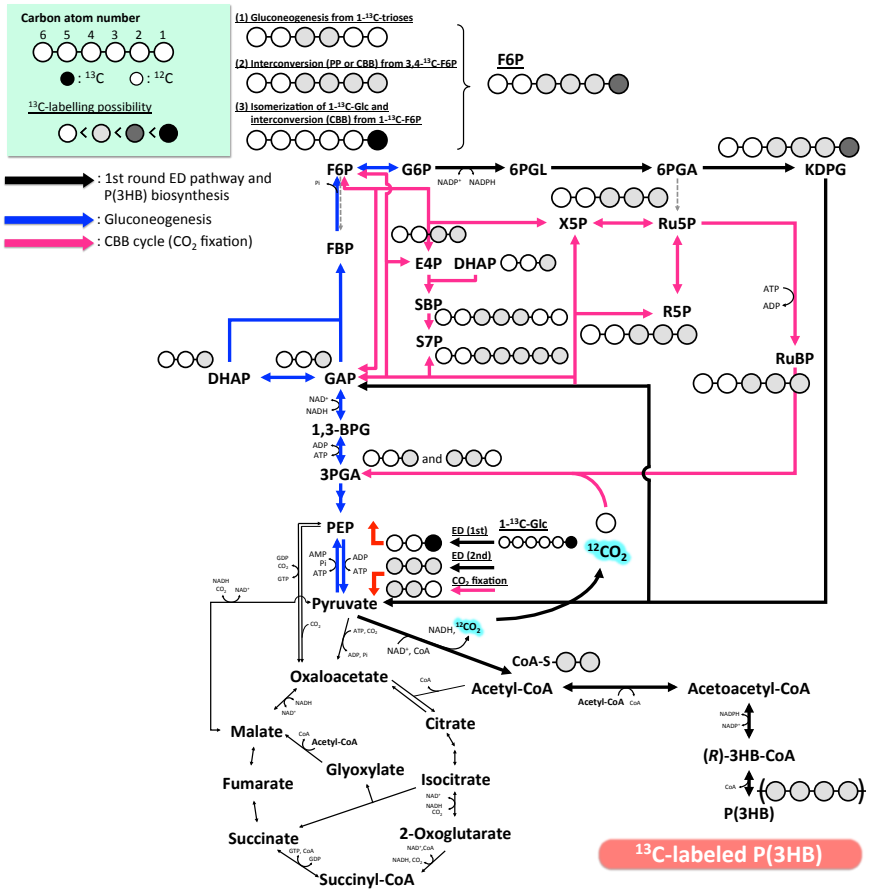

Fig. S3. Distribution of ^{13}C derived from [1-$^{13}C_1$]-glucose *via* ED pathway in combination with gluconeogenesis, interconversion of sugar phosphates in CBB cycle and $^{12}CO_2$ fixation in *R. eutropha* H16G

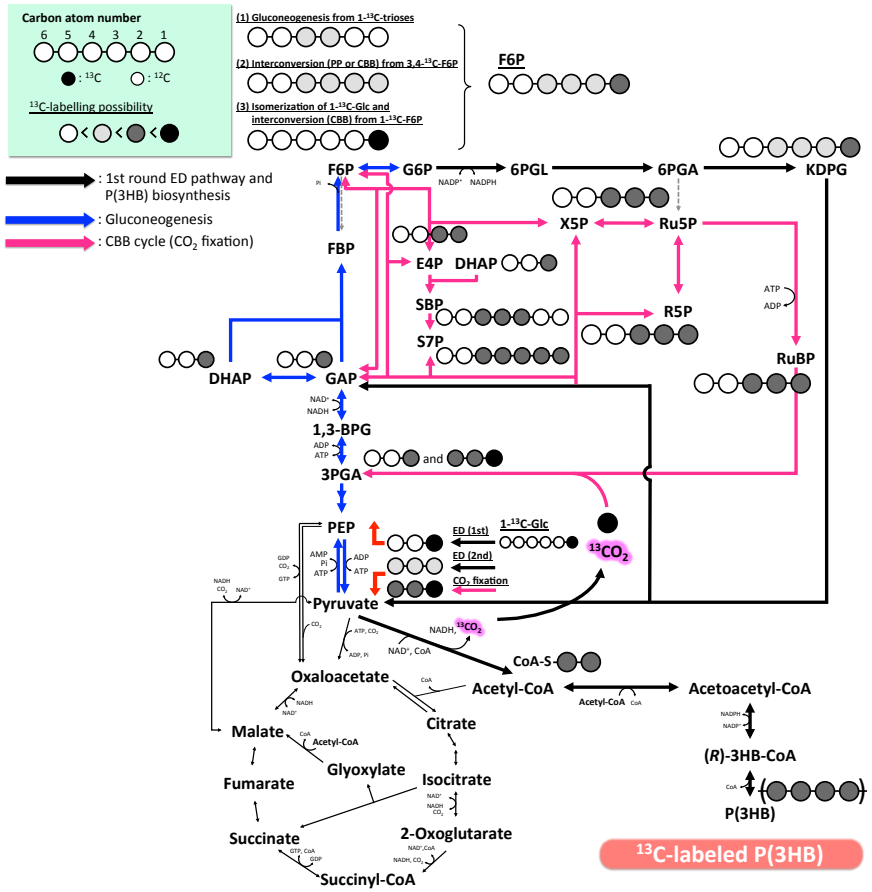

Fig. S4. Distribution of ^{13}C derived from [1-$^{13}C_1$]-glucose *via* ED pathway in combination with gluconeogenesis, interconversion of sugar phosphates in CBB cycle and $^{13}CO_2$ fixation in *R. eutropha* H16G

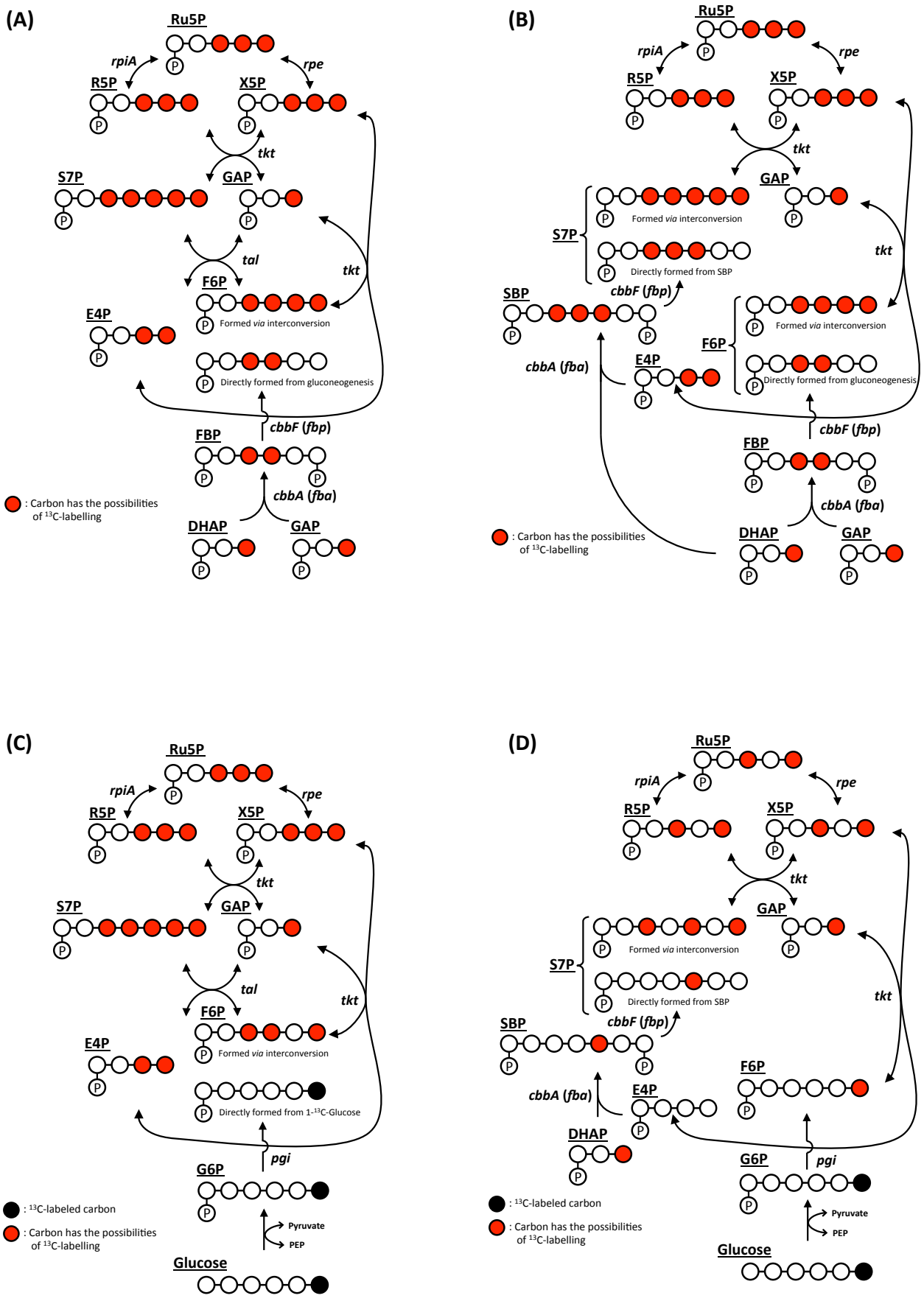

Fig. S5. Details of possible distribution of ^{13}C derived from [1-$^{13}C_1$]-triose phosphates *via* gluconeogenesis and interconversion of sugar phosphate in PP pathway (A) and CBB cycle (B), and that of ^{13}C derived from [1-$^{13}C_1$]-glucose *via* interconversion of sugar phosphates in PP pathway (C) and CBB cycle (D).

Table S1. Abbreviation of metabolites in this study.

Name	Abbreviation
(*R*)-3-Hydroxybutyryl-CoA	(*R*)-3HB-CoA
1,3-Bisphosphoglycerate	1,3-BPG
2-Keto-3-deoxygluconate-6-phosphate	KDPG
2-Oxoglutarate	2-OG
2-Phosphoglycerate	2PGA
3-Phosphoglycerate	3PGA
6-Phospho-1,5-gluconolactone	6PGL
6-Phosphogluconate	6PGA
α-Glycerophosphate	α-GP
Aspartate	Asp
Coenzyme A	CoA
Dihydroxyacetonephosphate	DHAP
Erythrose-4-phosphate	E4P
Fructose-1,6-bisphosphate	FBP
Fructose-6-phosphate	F6P
Glucose-6-phodphate	G6P
Glutamate	Glu
Glyeraldehyde-3-phosphate	GAP
Isoleucine	Ile
Leucine	Leu
Methionine	Met
Phenylalanine	Phe
Phosphoenol pyruvate	PEP
Phosphoribosyl pyrophosphate	PRPP
Poly((*R*)-3-hydroxybutyrate)	P(3HB)
Ribose-5-phosphate	R5P
Ribulose-1,5-bisphosphate	RuBP
Ribulose-5-phosphate	Ru5P
Sedoheptulose-1,7-bisphosphate	SBP
Sedoheptulose-7-phosphate	S7P
Serine	Ser
Threonine	Thr
Tyrosine	Tyr

Table S2. Abundances of isotopomers in each metabolites in *R. eutropha* H16G and the CBB cycle-inactivated strains incubated on [1-$^{13}C_1$]-glucose.

		H16G		H16GΔ*cbbR*		H16GΔΔ*cbbLS*	
Metabolite	Nomber of ^{13}C (*i*)	2 h	12 h	2 h	12 h	2 h	12 h
2-OG	0	$7.91\times10^{-1} \pm 1.80\times10^{-2}$	$6.40\times10^{-1} \pm 3.07\times10^{-2}$	$8.65\times10^{-1} \pm 1.22\times10^{-2}$	$8.22\times10^{-1} \pm 3.90\times10^{-2}$	$9.12\times10^{-1} \pm 5.64\times10^{-2}$	$8.69\times10^{-1} \pm 1.71\times10^{-2}$
2-OG	1	$1.87\times10^{-1} \pm 2.08\times10^{-2}$	$2.90\times10^{-1} \pm 1.82\times10^{-2}$	$1.29\times10^{-1} \pm 1.51\times10^{-2}$	$1.66\times10^{-1} \pm 3.14\times10^{-2}$	$8.79\times10^{-2} \pm 5.64\times10^{-2}$	$1.31\times10^{-1} \pm 1.71\times10^{-2}$
2-OG	2	$2.23\times10^{-2} \pm 8.85\times10^{-3}$	$6.99\times10^{-2} \pm 1.91\times10^{-2}$	$5.94\times10^{-3} \pm 7.20\times10^{-3}$	$1.21\times10^{-2} \pm 1.05\times10^{-2}$	0 ± 0	0 ± 0
2-OG	>3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
3PGA	0	$8.91\times10^{-1} \pm 6.59\times10^{-3}$	$8.88\times10^{-1} \pm 7.13\times10^{-3}$	$9.23\times10^{-1} \pm 4.83\times10^{-3}$	$9.23\times10^{-1} \pm 2.83\times10^{-3}$	$9.36\times10^{-1} \pm 1.72\times10^{-3}$	$9.43\times10^{-1} \pm 1.06\times10^{-3}$
3PGA	1	$8.20\times10^{-2} \pm 9.73\times10^{-3}$	$9.01\times10^{-2} \pm 6.57\times10^{-3}$	$6.18\times10^{-2} \pm 7.09\times10^{-3}$	$5.92\times10^{-2} \pm 1.27\times10^{-3}$	$4.79\times10^{-2} \pm 2.65\times10^{-4}$	$4.60\times10^{-2} \pm 2.03\times10^{-4}$
3PGA	2	$2.50\times10^{-2} \pm 4.12\times10^{-3}$	$2.05\times10^{-2} \pm 3.35\times10^{-4}$	$1.45\times10^{-2} \pm 2.20\times10^{-3}$	$1.66\times10^{-2} \pm 1.28\times10^{-3}$	$1.53\times10^{-2} \pm 1.90\times10^{-3}$	$1.02\times10^{-2} \pm 9.52\times10^{-4}$
3PGA	3	$2.01\times10^{-3} \pm 1.62\times10^{-3}$	$1.22\times10^{-3} \pm 4.92\times10^{-4}$	$9.14\times10^{-4} \pm 3.95\times10^{-4}$	$7.30\times10^{-4} \pm 7.91\times10^{-4}$	$1.00\times10^{-3} \pm 1.83\times10^{-4}$	$4.33\times10^{-4} \pm 7.34\times10^{-5}$
α-GP	0	$8.95\times10^{-1} \pm 1.04\times10^{-2}$	$8.87\times10^{-1} \pm 1.80\times10^{-2}$	$9.32\times10^{-1} \pm 2.13\times10^{-3}$	$9.29\times10^{-1} \pm 1.50\times10^{-2}$	$9.45\times10^{-1} \pm 3.86\times10^{-3}$	$9.46\times10^{-1} \pm 7.92\times10^{-3}$
α-GP	1	$1.05\times10^{-1} \pm 1.04\times10^{-2}$	$1.13\times10^{-1} \pm 1.80\times10^{-2}$	$6.83\times10^{-2} \pm 2.13\times10^{-3}$	$7.09\times10^{-2} \pm 1.50\times10^{-2}$	$5.54\times10^{-2} \pm 3.86\times10^{-3}$	$5.44\times10^{-2} \pm 7.92\times10^{-3}$
α-GP	>2	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Asp	0	$7.64\times10^{-1} \pm 4.13\times10^{-2}$	$7.01\times10^{-1} \pm 5.62\times10^{-2}$	$7.79\times10^{-1} \pm 5.11\times10^{-2}$	$6.66\times10^{-1} \pm 3.13\times10^{-2}$	$9.17\times10^{-1} \pm 1.02\times10^{-2}$	$8.38\times10^{-1} \pm 2.83\times10^{-2}$
Asp	1	$2.08\times10^{-1} \pm 3.73\times10^{-2}$	$2.40\times10^{-1} \pm 3.42\times10^{-2}$	$2.03\times10^{-1} \pm 4.37\times10^{-2}$	$2.82\times10^{-1} \pm 3.77\times10^{-2}$	$7.34\times10^{-2} \pm 1.05\times10^{-2}$	$1.41\times10^{-1} \pm 2.00\times10^{-2}$
Asp	2	$2.76\times10^{-2} \pm 1.01\times10^{-2}$	$5.95\times10^{-2} \pm 2.20\times10^{-2}$	$1.80\times10^{-2} \pm 1.43\times10^{-2}$	$5.22\times10^{-2} \pm 1.75\times10^{-2}$	$9.59\times10^{-3} \pm 3.45\times10^{-3}$	$2.08\times10^{-2} \pm 9.28\times10^{-3}$
Asp	>3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
1,3-BPG	0	$8.65\times10^{-1} \pm 1.85\times10^{-2}$	$8.33\times10^{-1} \pm 2.57\times10^{-2}$	$9.04\times10^{-1} \pm 2.46\times10^{-2}$	$9.23\times10^{-1} \pm 4.96\times10^{-3}$	$9.42\times10^{-1} \pm 1.95\times10^{-3}$	$9.49\times10^{-1} \pm 3.71\times10^{-3}$
1,3-BPG	1	$1.05\times10^{-1} \pm 8.82\times10^{-3}$	$1.27\times10^{-1} \pm 1.45\times10^{-2}$	$6.91\times10^{-2} \pm 1.55\times10^{-2}$	$5.76\times10^{-2} \pm 5.09\times10^{-3}$	$4.44\times10^{-2} \pm 3.43\times10^{-3}$	$4.01\times10^{-2} \pm 2.65\times10^{-3}$
1,3-BPG	2	$2.77\times10^{-2} \pm 7.30\times10^{-3}$	$3.72\times10^{-2} \pm 1.04\times10^{-2}$	$2.36\times10^{-2} \pm 9.31\times10^{-3}$	$1.87\times10^{-2} \pm 1.07\times10^{-3}$	$1.36\times10^{-2} \pm 1.49\times10^{-3}$	$1.14\times10^{-2} \pm 1.06\times10^{-3}$
1,3-BPG	3	$2.43\times10^{-3} \pm 2.97\times10^{-3}$	$2.69\times10^{-3} \pm 8.69\times10^{-4}$	$3.48\times10^{-3} \pm 2.36\times10^{-3}$	$9.24\times10^{-4} \pm 6.60\times10^{-4}$	0 ± 0	0 ± 0
CoA	0	$6.60\times10^{-1} \pm 4.58\times10^{-2}$	$4.83\times10^{-1} \pm 2.55\times10^{-2}$	$6.83\times10^{-1} \pm 1.65\times10^{-3}$	$5.83\times10^{-1} \pm 8.41\times10^{-3}$	$6.77\times10^{-1} \pm 1.00\times10^{-2}$	$5.99\times10^{-1} \pm 6.59\times10^{-3}$
CoA	1	$2.33\times10^{-1} \pm 3.61\times10^{-2}$	$2.94\times10^{-1} \pm 7.82\times10^{-3}$	$2.08\times10^{-1} \pm 2.11\times10^{-3}$	$2.77\times10^{-1} \pm 1.14\times10^{-2}$	$2.18\times10^{-1} \pm 8.64\times10^{-3}$	$2.59\times10^{-1} \pm 7.09\times10^{-3}$
CoA	2	$8.19\times10^{-2} \pm 8.13\times10^{-3}$	$1.37\times10^{-1} \pm 2.33\times10^{-2}$	$8.66\times10^{-2} \pm 5.56\times10^{-3}$	$1.08\times10^{-1} \pm 2.06\times10^{-3}$	$8.19\times10^{-2} \pm 2.38\times10^{-3}$	$1.07\times10^{-1} \pm 9.88\times10^{-3}$
CoA	3	$1.92\times10^{-2} \pm 1.55\times10^{-3}$	$6.99\times10^{-2} \pm 1.91\times10^{-2}$	$1.95\times10^{-2} \pm 2.56\times10^{-3}$	$2.35\times10^{-2} \pm 6.77\times10^{-3}$	$1.95\times10^{-2} \pm 1.54\times10^{-3}$	$2.81\times10^{-2} \pm 2.03\times10^{-3}$
CoA	4	$5.42\times10^{-3} \pm 1.09\times10^{-3}$	$1.66\times10^{-2} \pm 4.92\times10^{-3}$	$3.32\times10^{-3} \pm 4.08\times10^{-4}$	$8.28\times10^{-3} \pm 7.17\times10^{-3}$	$3.17\times10^{-3} \pm 7.35\times10^{-4}$	$5.53\times10^{-3} \pm 3.52\times10^{-3}$
CoA	5	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	$5.71\times10^{-5} \pm 9.89\times10^{-5}$	$1.64\times10^{-3} \pm 3.86\times10^{-4}$
DHAP	0	$9.00\times10^{-1} \pm 3.12\times10^{-3}$	$9.04\times10^{-1} \pm 7.97\times10^{-4}$	$9.20\times10^{-1} \pm 1.07\times10^{-2}$	$9.27\times10^{-1} \pm 4.71\times10^{-3}$	$9.47\times10^{-1} \pm 1.79\times10^{-3}$	$9.49\times10^{-1} \pm 9.13\times10^{-4}$
DHAP	1	$8.45\times10^{-2} \pm 2.97\times10^{-3}$	$7.90\times10^{-2} \pm 9.38\times10^{-4}$	$6.78\times10^{-2} \pm 9.51\times10^{-3}$	$6.06\times10^{-2} \pm 3.31\times10^{-3}$	$4.49\times10^{-2} \pm 1.81\times10^{-3}$	$4.22\times10^{-2} \pm 1.78\times10^{-4}$
DHAP	2	$1.50\times10^{-2} \pm 6.70\times10^{-4}$	$1.66\times10^{-2} \pm 6.89\times10^{-4}$	$1.15\times10^{-2} \pm 1.28\times10^{-3}$	$1.20\times10^{-2} \pm 1.44\times10^{-3}$	$7.97\times10^{-3} \pm 2.44\times10^{-4}$	$8.63\times10^{-3} \pm 8.40\times10^{-4}$
DHAP	3	$3.66\times10^{-4} \pm 1.88\times10^{-4}$	$6.01\times10^{-4} \pm 1.29\times10^{-4}$	$2.66\times10^{-4} \pm 5.44\times10^{-5}$	$1.60\times10^{-4} \pm 1.17\times10^{-5}$	0 ± 0	0 ± 0

Table S2. Continued.

		H16G		H16GΔ*cbbR*		H16GΔΔ*cbbLS*	
Metabolite	Nomber of ^{13}C (*i*)	2 h	12 h	2 h	12 h	2 h	12 h
FBP	0	$5.91\times10^{-1} \pm 2.07\times10^{-2}$	$5.07\times10^{-1} \pm 1.65\times10^{-2}$	$6.58\times10^{-1} \pm 4.12\times10^{-2}$	$6.56\times10^{-1} \pm 3.12\times10^{-2}$	$8.24\times10^{-1} \pm 1.29\times10^{-2}$	$8.06\times10^{-1} \pm 8.63\times10^{-3}$
FBP	1	$2.05\times10^{-1} \pm 1.96\times10^{-2}$	$2.48\times10^{-1} \pm 1.68\times10^{-2}$	$1.96\times10^{-1} \pm 1.75\times10^{-2}$	$1.90\times10^{-1} \pm 4.96\times10^{-3}$	$1.13\times10^{-1} \pm 5.93\times10^{-3}$	$1.17\times10^{-1} \pm 1.16\times10^{-2}$
FBP	2	$1.41\times10^{-1} \pm 3.10\times10^{-2}$	$1.35\times10^{-1} \pm 2.10\times10^{-2}$	$9.82\times10^{-2} \pm 2.09\times10^{-2}$	$9.91\times10^{-2} \pm 2.32\times10^{-2}$	$4.15\times10^{-2} \pm 1.96\times10^{-3}$	$5.11\times10^{-2} \pm 4.99\times10^{-3}$
FBP	3	$6.37\times10^{-2} \pm 1.98\times10^{-2}$	$1.10\times10^{-1} \pm 1.35\times10^{-2}$	$4.82\times10^{-2} \pm 8.96\times10^{-3}$	$5.52\times10^{-2} \pm 1.18\times10^{-2}$	$2.08\times10^{-2} \pm 1.12\times10^{-2}$	$2.60\times10^{-2} \pm 5.91\times10^{-3}$
FBP	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Fumarate	0	$7.37\times10^{-1} \pm 2.41\times10^{-2}$	$6.15\times10^{-1} \pm 3.95\times10^{-3}$	$7.86\times10^{-1} \pm 5.97\times10^{-2}$	$7.21\times10^{-1} \pm 4.58\times10^{-2}$	$8.29\times10^{-1} \pm 1.41\times10^{-2}$	$7.81\times10^{-1} \pm 4.85\times10^{-3}$
Fumarate	1	$1.88\times10^{-1} \pm 2.59\times10^{-2}$	$3.14\times10^{-1} \pm 1.10\times10^{-2}$	$1.68\times10^{-1} \pm 4.01\times10^{-2}$	$2.27\times10^{-1} \pm 3.04\times10^{-2}$	$1.48\times10^{-1} \pm 9.21\times10^{-3}$	$1.95\times10^{-1} \pm 7.34\times10^{-3}$
Fumarate	2	$7.53\times10^{-2} \pm 2.64\times10^{-2}$	$7.07\times10^{-2} \pm 7.02\times10^{-3}$	$4.59\times10^{-2} \pm 2.25\times10^{-2}$	$5.20\times10^{-2} \pm 1.56\times10^{-2}$	$2.28\times10^{-2} \pm 9.65\times10^{-3}$	$2.41\times10^{-2} \pm 3.44\times10^{-3}$
Fumarate	>3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Glu	0	$8.62\times10^{-1} \pm 1.47\times10^{-2}$	$6.60\times10^{-1} \pm 2.09\times10^{-2}$	$8.99\times10^{-1} \pm 2.59\times10^{-2}$	$8.08\times10^{-1} \pm 1.73\times10^{-3}$	$8.89\times10^{-1} \pm 1.15\times10^{-2}$	$8.71\times10^{-1} \pm 2.63\times10^{-2}$
Glu	1	$1.19\times10^{-1} \pm 2.02\times10^{-2}$	$2.64\times10^{-1} \pm 1.94\times10^{-2}$	$9.08\times10^{-2} \pm 2.35\times10^{-2}$	$1.69\times10^{-1} \pm 2.73\times10^{-3}$	$9.68\times10^{-2} \pm 3.64\times10^{-3}$	$1.21\times10^{-1} \pm 2.45\times10^{-2}$
Glu	2	$1.83\times10^{-2} \pm 7.00\times10^{-3}$	$7.61\times10^{-2} \pm 1.06\times10^{-2}$	$1.05\times10^{-2} \pm 3.36\times10^{-3}$	$2.28\times10^{-2} \pm 4.39\times10^{-3}$	$1.46\times10^{-2} \pm 1.16\times10^{-2}$	$7.99\times10^{-3} \pm 7.12\times10^{-3}$
Glu	>3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Isocitrate	0	$7.69\times10^{-1} \pm 1.82\times10^{-2}$	$6.45\times10^{-1} \pm 4.37\times10^{-2}$	$8.07\times10^{-1} \pm 2.69\times10^{-2}$	$7.85\times10^{-1} \pm 4.70\times10^{-2}$	$7.81\times10^{-1} \pm 1.33\times10^{-2}$	$7.33\times10^{-1} \pm 3.56\times10^{-2}$
Isocitrate	1	$1.88\times10^{-1} \pm 1.49\times10^{-2}$	$2.66\times10^{-1} \pm 2.95\times10^{-2}$	$1.66\times10^{-1} \pm 2.22\times10^{-2}$	$1.78\times10^{-1} \pm 3.41\times10^{-2}$	$1.93\times10^{-1} \pm 1.05\times10^{-2}$	$2.32\times10^{-1} \pm 3.09\times10^{-2}$
Isocitrate	2	$3.99\times10^{-2} \pm 3.11\times10^{-3}$	$7.57\times10^{-2} \pm 1.32\times10^{-2}$	$2.59\times10^{-2} \pm 4.74\times10^{-3}$	$3.49\times10^{-2} \pm 1.19\times10^{-2}$	$2.62\times10^{-2} \pm 7.03\times10^{-3}$	$3.46\times10^{-2} \pm 5.05\times10^{-3}$
Isocitrate	3	$3.40\times10^{-3} \pm 1.42\times10^{-3}$	$1.30\times10^{-2} \pm 1.12\times10^{-3}$	$8.38\times10^{-4} \pm 5.57\times10^{-4}$	$1.70\times10^{-3} \pm 1.23\times10^{-3}$	0 ± 0	0 ± 0
Isocitrate	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Ile	0	$8.39\times10^{-1} \pm 1.92\times10^{-2}$	$8.70\times10^{-1} \pm 3.92\times10^{-2}$	$8.87\times10^{-1} \pm 2.70\times10^{-2}$	$8.70\times10^{-1} \pm 4.03\times10^{-2}$	$9.17\times10^{-1} \pm 4.23\times10^{-3}$	$9.14\times10^{-1} \pm 1.81\times10^{-3}$
Ile	1	$1.61\times10^{-1} \pm 1.92\times10^{-2}$	$1.30\times10^{-1} \pm 3.92\times10^{-2}$	$1.13\times10^{-1} \pm 2.70\times10^{-2}$	$1.30\times10^{-1} \pm 4.03\times10^{-2}$	$7.25\times10^{-2} \pm 3.27\times10^{-3}$	$7.45\times10^{-2} \pm 4.81\times10^{-3}$
Ile	2	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	$1.08\times10^{-2} \pm 1.05\times10^{-3}$	$1.19\times10^{-2} \pm 3.00\times10^{-3}$
Ile	>3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Leu	0	$8.88\times10^{-1} \pm 1.82\times10^{-3}$	$8.35\times10^{-1} \pm 2.17\times10^{-2}$	$8.86\times10^{-1} \pm 2.90\times10^{-2}$	$8.84\times10^{-1} \pm 1.43\times10^{-3}$	$9.08\times10^{-1} \pm 1.99\times10^{-3}$	$8.96\times10^{-1} \pm 1.81\times10^{-2}$
Leu	1	$1.02\times10^{-1} \pm 2.51\times10^{-3}$	$1.22\times10^{-1} \pm 1.62\times10^{-2}$	$1.07\times10^{-1} \pm 2.77\times10^{-2}$	$1.02\times10^{-1} \pm 3.56\times10^{-3}$	$7.86\times10^{-2} \pm 3.86\times10^{-3}$	$9.07\times10^{-2} \pm 1.54\times10^{-2}$
Leu	2	$9.64\times10^{-3} \pm 1.66\times10^{-3}$	$2.11\times10^{-2} \pm 2.69\times10^{-3}$	$7.80\times10^{-3} \pm 1.48\times10^{-3}$	$1.42\times10^{-2} \pm 2.48\times10^{-3}$	$1.36\times10^{-2} \pm 2.45\times10^{-3}$	$1.34\times10^{-2} \pm 2.66\times10^{-3}$
Leu	3	0 ± 0	$2.21\times10^{-2} \pm 3.55\times10^{-3}$	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Leu	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Malate	0	$7.79\times10^{-1} \pm 1.09\times10^{-2}$	$6.66\times10^{-1} \pm 1.03\times10^{-1}$	$8.11\times10^{-1} \pm 1.74\times10^{-2}$	$7.24\times10^{-1} \pm 1.69\times10^{-2}$	$8.43\times10^{-1} \pm 7.41\times10^{-3}$	$8.29\times10^{-1} \pm 9.90\times10^{-3}$
Malate	1	$1.80\times10^{-1} \pm 9.36\times10^{-3}$	$2.68\times10^{-1} \pm 8.32\times10^{-2}$	$1.59\times10^{-1} \pm 1.57\times10^{-2}$	$2.22\times10^{-1} \pm 1.35\times10^{-2}$	$1.39\times10^{-1} \pm 6.38\times10^{-3}$	$1.53\times10^{-1} \pm 8.28\times10^{-3}$
Malate	2	$3.65\times10^{-2} \pm 8.14\times10^{-4}$	$5.93\times10^{-2} \pm 1.93\times10^{-2}$	$2.78\times10^{-2} \pm 2.10\times10^{-3}$	$5.04\times10^{-2} \pm 3.64\times10^{-3}$	$1.64\times10^{-2} \pm 9.60\times10^{-4}$	$1.63\times10^{-2} \pm 1.52\times10^{-3}$
Malate	3	$3.69\times10^{-3} \pm 8.35\times10^{-4}$	$6.39\times10^{-3} \pm 1.57\times10^{-3}$	$2.32\times10^{-3} \pm 2.46\times10^{-4}$	$3.70\times10^{-3} \pm 3.88\times10^{-4}$	$1.40\times10^{-3} \pm 4.88\times10^{-4}$	$1.79\times10^{-3} \pm 3.06\times10^{-4}$
Malate	4	$6.09\times10^{-4} \pm 1.54\times10^{-4}$	$6.43\times10^{-4} \pm 1.24\times10^{-4}$	$3.36\times10^{-4} \pm 1.10\times10^{-4}$	$3.31\times10^{-4} \pm 3.03\times10^{-4}$	$5.27\times10^{-5} \pm 3.39\times10^{-5}$	$2.76\times10^{-5} \pm 2.14\times10^{-5}$

Table S2. Continued.

		H16G		H16GΔ*cbbR*		H16GΔΔ*cbbLS*	
Metabolite	Nomber of ^{13}C (*i*)	2 h	12 h	2 h	12 h	2 h	12 h
Met	0	$8.40\times10^{-1} \pm 2.01\times10^{-2}$	$7.90\times10^{-1} \pm 5.88\times10^{-3}$	$8.69\times10^{-1} \pm 2.43\times10^{-2}$	$8.74\times10^{-1} \pm 2.38\times10^{-2}$	$9.02\times10^{-1} \pm 4.03\times10^{-3}$	$9.10\times10^{-1} \pm 2.67\times10^{-3}$
Met	1	$1.42\times10^{-1} \pm 1.67\times10^{-2}$	$1.67\times10^{-1} \pm 9.92\times10^{-3}$	$1.20\times10^{-1} \pm 1.90\times10^{-2}$	$1.10\times10^{-1} \pm 1.81\times10^{-2}$	$8.91\times10^{-2} \pm 9.80\times10^{-4}$	$8.12\times10^{-2} \pm 6.02\times10^{-3}$
Met	2	$1.78\times10^{-2} \pm 3.38\times10^{-3}$	$4.36\times10^{-2} \pm 7.15\times10^{-3}$	$1.17\times10^{-2} \pm 6.18\times10^{-3}$	$1.57\times10^{-2} \pm 7.88\times10^{-3}$	$8.57\times10^{-3} \pm 3.87\times10^{-3}$	$9.11\times10^{-3} \pm 3.40\times10^{-3}$
Met	>3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
PEP	0	$6.91\times10^{-1} \pm 9.41\times10^{-3}$	$6.47\times10^{-1} \pm 2.63\times10^{-2}$	$7.73\times10^{-1} \pm 5.55\times10^{-2}$	$6.95\times10^{-1} \pm 8.79\times10^{-2}$	$9.21\times10^{-1} \pm 3.29\times10^{-3}$	$9.28\times10^{-1} \pm 5.17\times10^{-3}$
PEP	1	$2.63\times10^{-1} \pm 7.28\times10^{-3}$	$2.87\times10^{-1} \pm 2.70\times10^{-2}$	$2.02\times10^{-1} \pm 6.13\times10^{-2}$	$2.77\times10^{-1} \pm 8.64\times10^{-2}$	$6.49\times10^{-2} \pm 3.65\times10^{-3}$	$5.65\times10^{-2} \pm 5.80\times10^{-3}$
PEP	2	$4.06\times10^{-2} \pm 3.82\times10^{-3}$	$6.05\times10^{-2} \pm 9.50\times10^{-3}$	$2.15\times10^{-2} \pm 4.52\times10^{-3}$	$2.59\times10^{-2} \pm 4.43\times10^{-3}$	$1.24\times10^{-2} \pm 1.33\times10^{-3}$	$1.52\times10^{-2} \pm 8.16\times10^{-4}$
PEP	3	$5.40\times10^{-3} \pm 6.78\times10^{-4}$	$5.85\times10^{-3} \pm 2.07\times10^{-3}$	$3.04\times10^{-3} \pm 2.27\times10^{-3}$	$2.15\times10^{-3} \pm 2.47\times10^{-3}$	$1.93\times10^{-3} \pm 6.24\times10^{-4}$	$6.76\times10^{-4} \pm 5.00\times10^{-4}$
Phe	0	$8.10\times10^{-1} \pm 2.09\times10^{-2}$	$8.28\times10^{-1} \pm 4.29\times10^{-2}$	$8.27\times10^{-1} \pm 1.21\times10^{-2}$	$8.26\times10^{-1} \pm 6.25\times10^{-3}$	$8.75\times10^{-1} \pm 2.51\times10^{-3}$	$8.56\times10^{-1} \pm 1.15\times10^{-2}$
Phe	1	$1.54\times10^{-1} \pm 1.29\times10^{-2}$	$1.36\times10^{-1} \pm 3.53\times10^{-2}$	$1.56\times10^{-1} \pm 8.99\times10^{-3}$	$1.57\times10^{-1} \pm 5.22\times10^{-3}$	$1.10\times10^{-1} \pm 7.59\times10^{-4}$	$1.27\times10^{-1} \pm 1.19\times10^{-2}$
Phe	2	$3.09\times10^{-2} \pm 5.52\times10^{-3}$	$2.67\times10^{-2} \pm 3.18\times10^{-3}$	$1.71\times10^{-2} \pm 3.91\times10^{-3}$	$1.63\times10^{-2} \pm 1.93\times10^{-3}$	$1.47\times10^{-2} \pm 2.01\times10^{-3}$	$1.62\times10^{-2} \pm 3.43\times10^{-3}$
Phe	3	$5.22\times10^{-3} \pm 2.79\times10^{-3}$	$9.95\times10^{-3} \pm 5.09\times10^{-3}$	0 ± 0	0 ± 0	$3.22\times10^{-4} \pm 2.84\times10^{-4}$	$6.83\times10^{-4} \pm 5.24\times10^{-4}$
Phe	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
PRPP	0	$4.69\times10^{-1} \pm 1.88\times10^{-2}$	$4.44\times10^{-1} \pm 2.30\times10^{-2}$	$4.74\times10^{-1} \pm 1.03\times10^{-2}$	$3.69\times10^{-1} \pm 2.42\times10^{-2}$	$5.44\times10^{-1} \pm 1.50\times10^{-2}$	$6.55\times10^{-1} \pm 1.80\times10^{-2}$
PRPP	1	$4.32\times10^{-1} \pm 1.41\times10^{-2}$	$4.01\times10^{-1} \pm 1.62\times10^{-2}$	$4.39\times10^{-1} \pm 3.49\times10^{-3}$	$5.23\times10^{-1} \pm 2.17\times10^{-2}$	$4.08\times10^{-1} \pm 1.55\times10^{-2}$	$3.01\times10^{-1} \pm 2.20\times10^{-2}$
PRPP	2	$8.28\times10^{-2} \pm 8.09\times10^{-3}$	$1.20\times10^{-1} \pm 8.50\times10^{-3}$	$7.14\times10^{-2} \pm 4.61\times10^{-3}$	$7.88\times10^{-2} \pm 2.64\times10^{-3}$	$4.08\times10^{-2} \pm 1.26\times10^{-2}$	$3.67\times10^{-2} \pm 7.14\times10^{-3}$
PRPP	3	$1.54\times10^{-2} \pm 2.27\times10^{-3}$	$3.15\times10^{-2} \pm 8.40\times10^{-3}$	$1.44\times10^{-2} \pm 3.43\times10^{-3}$	$2.79\times10^{-2} \pm 4.45\times10^{-3}$	$7.81\times10^{-3} \pm 1.98\times10^{-3}$	$7.28\times10^{-3} \pm 3.53\times10^{-3}$
PRPP	4	$9.53\times10^{-4} \pm 9.26\times10^{-4}$	$4.02\times10^{-3} \pm 1.27\times10^{-3}$	$1.47\times10^{-3} \pm 1.28\times10^{-3}$	$8.48\times10^{-4} \pm 9.32\times10^{-4}$	0 ± 0	0 ± 0
PRPP	5	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
R5P	0	$5.06\times10^{-1} \pm 7.81\times10^{-3}$	$5.02\times10^{-1} \pm 1.19\times10^{-2}$	$4.25\times10^{-1} \pm 1.52\times10^{-2}$	$4.73\times10^{-1} \pm 2.49\times10^{-2}$	$4.33\times10^{-1} \pm 4.29\times10^{-2}$	$5.57\times10^{-1} \pm 2.34\times10^{-2}$
R5P	1	$4.20\times10^{-1} \pm 1.89\times10^{-2}$	$4.21\times10^{-1} \pm 4.00\times10^{-3}$	$4.83\times10^{-1} \pm 7.61\times10^{-3}$	$4.70\times10^{-1} \pm 2.34\times10^{-2}$	$4.98\times10^{-1} \pm 3.62\times10^{-2}$	$3.31\times10^{-1} \pm 4.55\times10^{-2}$
R5P	2	$7.47\times10^{-2} \pm 1.16\times10^{-2}$	$7.71\times10^{-2} \pm 1.39\times10^{-2}$	$9.15\times10^{-2} \pm 1.19\times10^{-2}$	$5.69\times10^{-2} \pm 1.71\times10^{-3}$	$4.70\times10^{-2} \pm 2.03\times10^{-2}$	$8.22\times10^{-2} \pm 2.02\times10^{-2}$
R5P	3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	$2.26\times10^{-2} \pm 6.15\times10^{-3}$	$2.98\times10^{-2} \pm 4.05\times10^{-3}$
R5P	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Ru5P	0	$4.25\times10^{-1} \pm 1.18\times10^{-2}$	$4.31\times10^{-1} \pm 2.69\times10^{-2}$	$4.06\times10^{-1} \pm 2.04\times10^{-2}$	$4.10\times10^{-1} \pm 3.12\times10^{-2}$	$3.96\times10^{-1} \pm 2.40\times10^{-2}$	$5.67\times10^{-1} \pm 1.94\times10^{-2}$
Ru5P	1	$3.34\times10^{-1} \pm 1.57\times10^{-2}$	$4.00\times10^{-1} \pm 2.91\times10^{-2}$	$3.67\times10^{-1} \pm 3.42\times10^{-2}$	$3.78\times10^{-1} \pm 1.83\times10^{-2}$	$5.12\times10^{-1} \pm 3.21\times10^{-2}$	$3.64\times10^{-1} \pm 1.71\times10^{-2}$
Ru5P	2	$1.93\times10^{-1} \pm 1.98\times10^{-2}$	$1.30\times10^{-1} \pm 5.92\times10^{-3}$	$1.78\times10^{-1} \pm 1.39\times10^{-2}$	$1.63\times10^{-1} \pm 3.12\times10^{-2}$	$7.95\times10^{-2} \pm 6.06\times10^{-3}$	$5.74\times10^{-2} \pm 3.66\times10^{-3}$
Ru5P	3	$4.76\times10^{-2} \pm 6.15\times10^{-3}$	$3.91\times10^{-2} \pm 6.17\times10^{-3}$	$4.91\times10^{-2} \pm 1.29\times10^{-3}$	$4.88\times10^{-2} \pm 1.67\times10^{-2}$	$1.27\times10^{-2} \pm 4.72\times10^{-3}$	$1.16\times10^{-2} \pm 4.87\times10^{-4}$
Ru5P	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0

Table S2. Continued.

		H16G		H16GΔ*cbbR*		H16GΔΔ*cbbLS*	
Metabolite	Nomber of ^{13}C (*i*)	2 h	12 h	2 h	12 h	2 h	12 h
RuBP	0	$5.29\times10^{-1} \pm 4.26\times10^{-2}$	$4.79\times10^{-1} \pm 8.72\times10^{-3}$			$5.95\times10^{-1} \pm 1.87\times10^{-2}$	$6.91\times10^{-1} \pm 3.52\times10^{-3}$
RuBP	1	$3.43\times10^{-1} \pm 3.02\times10^{-2}$	$3.92\times10^{-1} \pm 1.59\times10^{-2}$			$3.52\times10^{-1} \pm 2.37\times10^{-2}$	$2.73\times10^{-1} \pm 3.90\times10^{-3}$
RuBP	2	$1.28\times10^{-1} \pm 1.55\times10^{-2}$	$1.29\times10^{-1} \pm 7.73\times10^{-3}$	Not detected	Not detected	$3.76\times10^{-2} \pm 2.27\times10^{-3}$	$2.81\times10^{-2} \pm 1.01\times10^{-3}$
RuBP	3	0 ± 0	0 ± 0			$1.51\times10^{-2} \pm 6.33\times10^{-3}$	$7.81\times10^{-3} \pm 9.30\times10^{-4}$
RuBP	>4	0 ± 0	0 ± 0			0 ± 0	0 ± 0
S7P	0	$4.09\times10^{-1} \pm 9.81\times10^{-3}$	$3.43\times10^{-1} \pm 4.92\times10^{-3}$	$2.74\times10^{-1} \pm 3.19\times10^{-2}$	$2.14\times10^{-1} \pm 1.41\times10^{-2}$	$2.60\times10^{-1} \pm 2.43\times10^{-2}$	$4.78\times10^{-1} \pm 1.15\times10^{-2}$
S7P	1	$3.90\times10^{-1} \pm 4.70\times10^{-3}$	$4.01\times10^{-1} \pm 2.41\times10^{-3}$	$4.83\times10^{-1} \pm 4.22\times10^{-2}$	$4.77\times10^{-1} \pm 8.56\times10^{-3}$	$5.46\times10^{-1} \pm 1.44\times10^{-2}$	$3.51\times10^{-1} \pm 4.81\times10^{-3}$
S7P	2	$1.65\times10^{-1} \pm 5.12\times10^{-3}$	$1.97\times10^{-1} \pm 3.38\times10^{-3}$	$1.89\times10^{-1} \pm 1.28\times10^{-2}$	$2.47\times10^{-1} \pm 1.11\times10^{-2}$	$1.77\times10^{-1} \pm 2.52\times10^{-2}$	$1.54\times10^{-1} \pm 5.70\times10^{-3}$
S7P	3	$3.64\times10^{-2} \pm 3.93\times10^{-3}$	$5.99\times10^{-2} \pm 1.46\times10^{-3}$	$5.39\times10^{-2} \pm 4.27\times10^{-3}$	$6.23\times10^{-2} \pm 4.05\times10^{-3}$	$1.70\times10^{-2} \pm 4.05\times10^{-3}$	$1.69\times10^{-2} \pm 4.38\times10^{-3}$
S7P	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Ser	0	$8.25\times10^{-1} \pm 1.16\times10^{-2}$	$8.17\times10^{-1} \pm 6.60\times10^{-2}$	$8.42\times10^{-1} \pm 2.25\times10^{-2}$	$8.11\times10^{-1} \pm 1.47\times10^{-2}$	$8.57\times10^{-1} \pm 4.32\times10^{-2}$	$8.53\times10^{-1} \pm 2.08\times10^{-2}$
Ser	1	$8.75\times10^{-2} \pm 5.79\times10^{-3}$	$9.17\times10^{-2} \pm 3.30\times10^{-2}$	$7.91\times10^{-2} \pm 1.13\times10^{-2}$	$9.45\times10^{-2} \pm 7.33\times10^{-3}$	$7.15\times10^{-2} \pm 2.16\times10^{-2}$	$7.34\times10^{-2} \pm 1.04\times10^{-2}$
Ser	2	$8.75\times10^{-2} \pm 5.79\times10^{-3}$	$9.17\times10^{-2} \pm 3.30\times10^{-2}$	$7.91\times10^{-2} \pm 1.13\times10^{-2}$	$9.45\times10^{-2} \pm 7.33\times10^{-3}$	$7.15\times10^{-2} \pm 2.16\times10^{-2}$	$7.34\times10^{-2} \pm 1.04\times10^{-2}$
Ser	3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Succinate	0	$7.86\times10^{-1} \pm 4.58\times10^{-3}$	$6.54\times10^{-1} \pm 2.05\times10^{-2}$	$8.78\times10^{-1} \pm 2.72\times10^{-3}$	$8.28\times10^{-1} \pm 1.26\times10^{-2}$	$8.43\times10^{-1} \pm 5.61\times10^{-3}$	$8.21\times10^{-1} \pm 1.67\times10^{-2}$
Succinate	1	$1.90\times10^{-1} \pm 6.33\times10^{-3}$	$2.97\times10^{-1} \pm 1.93\times10^{-2}$	$1.13\times10^{-1} \pm 2.98\times10^{-3}$	$1.56\times10^{-1} \pm 1.09\times10^{-2}$	$1.45\times10^{-1} \pm 5.39\times10^{-3}$	$1.67\times10^{-1} \pm 1.59\times10^{-2}$
Succinate	2	$2.22\times10^{-2} \pm 2.09\times10^{-3}$	$4.50\times10^{-2} \pm 2.55\times10^{-3}$	$8.34\times10^{-3} \pm 7.23\times10^{-4}$	$1.61\times10^{-2} \pm 3.05\times10^{-3}$	$1.19\times10^{-2} \pm 7.47\times10^{-4}$	$1.15\times10^{-2} \pm 1.00\times10^{-3}$
Succinate	3	$1.16\times10^{-3} \pm 2.03\times10^{-4}$	$3.55\times10^{-3} \pm 2.26\times10^{-4}$	$2.67\times10^{-4} \pm 3.74\times10^{-4}$	$1.61\times10^{-4} \pm 6.86\times10^{-5}$	$4.38\times10^{-4} \pm 2.27\times10^{-4}$	$5.95\times10^{-4} \pm 1.02\times10^{-4}$
Succinate	4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Thr	0	$8.62\times10^{-1} \pm 6.49\times10^{-3}$	$8.29\times10^{-1} \pm 3.12\times10^{-2}$	$8.78\times10^{-1} \pm 3.18\times10^{-3}$	$8.40\times10^{-1} \pm 1.95\times10^{-2}$	$9.07\times10^{-1} \pm 5.71\times10^{-3}$	$8.87\times10^{-1} \pm 9.10\times10^{-3}$
Thr	1	$1.19\times10^{-1} \pm 3.74\times10^{-3}$	$1.41\times10^{-1} \pm 2.24\times10^{-2}$	$1.07\times10^{-1} \pm 1.78\times10^{-3}$	$1.35\times10^{-1} \pm 1.61\times10^{-2}$	$8.45\times10^{-2} \pm 6.12\times10^{-3}$	$9.47\times10^{-2} \pm 1.90\times10^{-3}$
Thr	2	$1.82\times10^{-2} \pm 6.22\times10^{-3}$	$2.99\times10^{-2} \pm 1.01\times10^{-2}$	$1.55\times10^{-2} \pm 1.83\times10^{-3}$	$2.46\times10^{-2} \pm 5.80\times10^{-3}$	$8.90\times10^{-3} \pm 8.48\times10^{-4}$	$1.87\times10^{-2} \pm 7.24\times10^{-3}$
Thr	>3	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Tyr	0	$7.18\times10^{-1} \pm 1.25\times10^{-2}$	$7.07\times10^{-1} \pm 4.14\times10^{-2}$	$7.77\times10^{-1} \pm 1.35\times10^{-2}$	$7.44\times10^{-1} \pm 3.01\times10^{-2}$	$8.36\times10^{-1} \pm 1.43\times10^{-2}$	$8.13\times10^{-1} \pm 1.90\times10^{-2}$
Tyr	1	$2.29\times10^{-1} \pm 1.12\times10^{-2}$	$1.96\times10^{-1} \pm 1.22\times10^{-2}$	$1.87\times10^{-1} \pm 9.80\times10^{-3}$	$2.15\times10^{-1} \pm 3.14\times10^{-2}$	$1.51\times10^{-1} \pm 1.49\times10^{-2}$	$1.69\times10^{-1} \pm 2.08\times10^{-2}$
Tyr	2	$4.54\times10^{-2} \pm 5.24\times10^{-3}$	$7.07\times10^{-2} \pm 1.79\times10^{-2}$	$3.59\times10^{-2} \pm 4.36\times10^{-3}$	$4.09\times10^{-2} \pm 1.34\times10^{-3}$	$1.24\times10^{-2} \pm 3.04\times10^{-3}$	$1.83\times10^{-2} \pm 3.82\times10^{-3}$
Tyr	3	$7.60\times10^{-3} \pm 6.58\times10^{-3}$	$2.62\times10^{-2} \pm 1.23\times10^{-2}$	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0
Tyr	>4	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0

The abbreviations are shown in Table S1.

m_i represents the abundance of each isotopomer of the metabolites in which i ^{13}C atoms are incorporated,

calculated by following equation:

$$m_i = \frac{M_i}{\sum_{j=0}^{n} M_j}$$

where M_i represents the peak intensity of each the isotopomer.

The results shown in grey (S7P, R5P, Isocitrate) were unreliable due to coelution of unknown contaminants.

Table S3. Primers used in qRT-PCR analysis.

Name	Sequence	Amplification size
bfr2-5'	CGCGATCAACCAGTATTTCC	228 bp
bfr2-3'	GTCTGCTCCAGCTTCAGGTC	
cbbL-F-RT-PCR	TCCACCGGCATCATCGT	218 bp
cbbL-R-RT-PCR	GCGTCCATCACGAACAGGAA	
cbbP-F-RT-PCR	GCGCACCGGCAATATGAA	218 bp
cbbP-R-RT-PCR	GGCCCTCGTAGAACAGCAGA	
cbbF-F-RT-PCR	ATGGAGGCGCCTTACCAGA	227 bp
cbbF-R-RT-PCR	ATGGTGGTGGGACCGTAGAG	

Table S4. MRM transition in this study.

Metabolite	RT[a]	MRM	CE[b]
Ser	1.14	104>74.1, 105>74.1, 105>75.1, 106>75.1, 106>76.1, 107>76.1	16
Thr	1.17	118>74.05, 119>74.05, 119>75.05, 120>74.05, 120>75.05, 120>76.05, 121>75.05, 121>76.05, 122>76.05	16
Met	1.79	148>47.05, 149>47.05, 149>48.05, 150>47.05, 150>48.05, 151>47.05, 151>48.05 152>47.05, 152>48.05, 153>48.05	14
Tyr	2.32	180>163.05, 181>164.05, 182>165.05, 183>166.05, 184>167.05 185>168.05, 186>169.05, 187>170.05, 188>171.05, 189>172.05	18
Ile	2.34	190.1>130.1, 191.1>131.1, 192.1>132.1, 193.1>133.1, 194.1>134.1, 195.1>135.1, 196.1>136.1	10
Leu	2.56	190.1>130.1, 191.1>131.1, 192.1>132.1, 193.1>133.1, 194.1>134.1, 195.1>135.1, 196.1>136.1	10
Phe	3.84	164>147, 165>148, 166>149, 167>150, 168>151, 169>152, 170>153, 171>154, 172>155, 173>156	18
Glu	3.89	146>128.05, 147>129.05, 148>130.05, 149>131.05, 150>132.05, 151>133.05	17
Asp	3.93	132>115.1, 133>116.1, 134>117.1, 135>118.1 136>119.1	16
R5P	5.16	229.05>79.05, 230.05>79.05, 231.05>79.05, 232.05>79.05, 233.05>79.05, 234.05>79.05	47
S7P	5.39	289>97, 290>97, 291>97, 292>97, 293>97, 294>97, 295>97, 296>97	23
α-GP	5.76	171.1>79.05, 172.1>79.05, 173.1>79.05, 174.1>79.05	18
Ru5P	6.49	229.05>79.05, 230.05>79.05, 231.05>79.05, 232.05>79.05, 233.05>79.05, 234.05>79.05	47
DHAP	7.20	169>97.05, 170>97.05, 171>97.05, 172>97.05	12
Succinate	8.80	117>73.1, 118>73.1, 118>74.1, 119>74.1, 119>75.1, 120>75.1, 120>76.1, 121>76.1	15
Malate	9.29	133>115.1, 134>116.1, 135>117.1, 136>118.1, 137>119.1	17
2-OG	9.59	145>101, 146>101, 146>102, 147>102, 147>103, 148>103, 148>104, 149>104, 149>105, 150>105	10
Fumarate	9.75	175>115, 176>116, 177>117, 178>118, 179>119	10
3PGA	9.78	185>79.05, 186>79.05, 187>79.05, 188>79.05	32
FBP	9.95	339>97.05, 340>97.05, 341>97.05, 342>97.05, 343>97.05, 344>97.05, 345>97.05	18
Citrate + Isocitrate*	10.04	191>111.1, 192>111.1, 192>112.1, 193>112.1, 193>113.1, 194>113.1, 194>114.1, 195>114.1, 195>115.1, 196>115.1, 196>116.1, 197>116.1	15
RuBP	10.09	309>97.05, 310>97.05, 311>97.05, 312>97.05, 313>97.05, 314>97.05	18
PEP	10.10	167>79.1, 168>79.1, 169>79.1, 170>79.1	13
PRPP	11.19	389>177.05, 390>177.05, 391>177.05, 392>177.05, 393>177.05, 394>177.05	21
1,3-BPG	11.20	265>167.05, 266>168.05, 267>169.05, 268>170.05	18
CoA	11.99	766>79, 767>79, 768>79, 769>79, 770>79, 771>79, 772>79, 773>79, 774>79, 775>79, 776>79, 777>79 778>79, 779>79, 780>79, 781>79, 782>79, 783>79, 784>79, 785>79, 786>79, 787>79	54
3HB-CoA	12.09	852.1>408.1, 853.1>408.1, 854.1>408.1, 855.1>408.1, 856.1>408.1	40
Acetyl-CoA	12.25	808.1>408.1, 809.1>408.1, 810.1>408.1	37
Succinyl-CoA	12.30	866.1>408.1, 867.1>408.1, 868.1>408.1, 869.1>408.1, 870.1>408.1	41
Crotonyl-CoA	13.24	834.1>408.1, 835.1>408.1, 836.1>408.1, 837.1>408.1, 838.1>408.1	36
Butyryl-CoA	13.34	836.1>408.1, 837.1>408.1, 838.1>408.1, 839.1>408.1, 840.1>408.1	37

[a]RT: retention time (min); [b]CE: collision energy (V).

*Could not be discriminated.