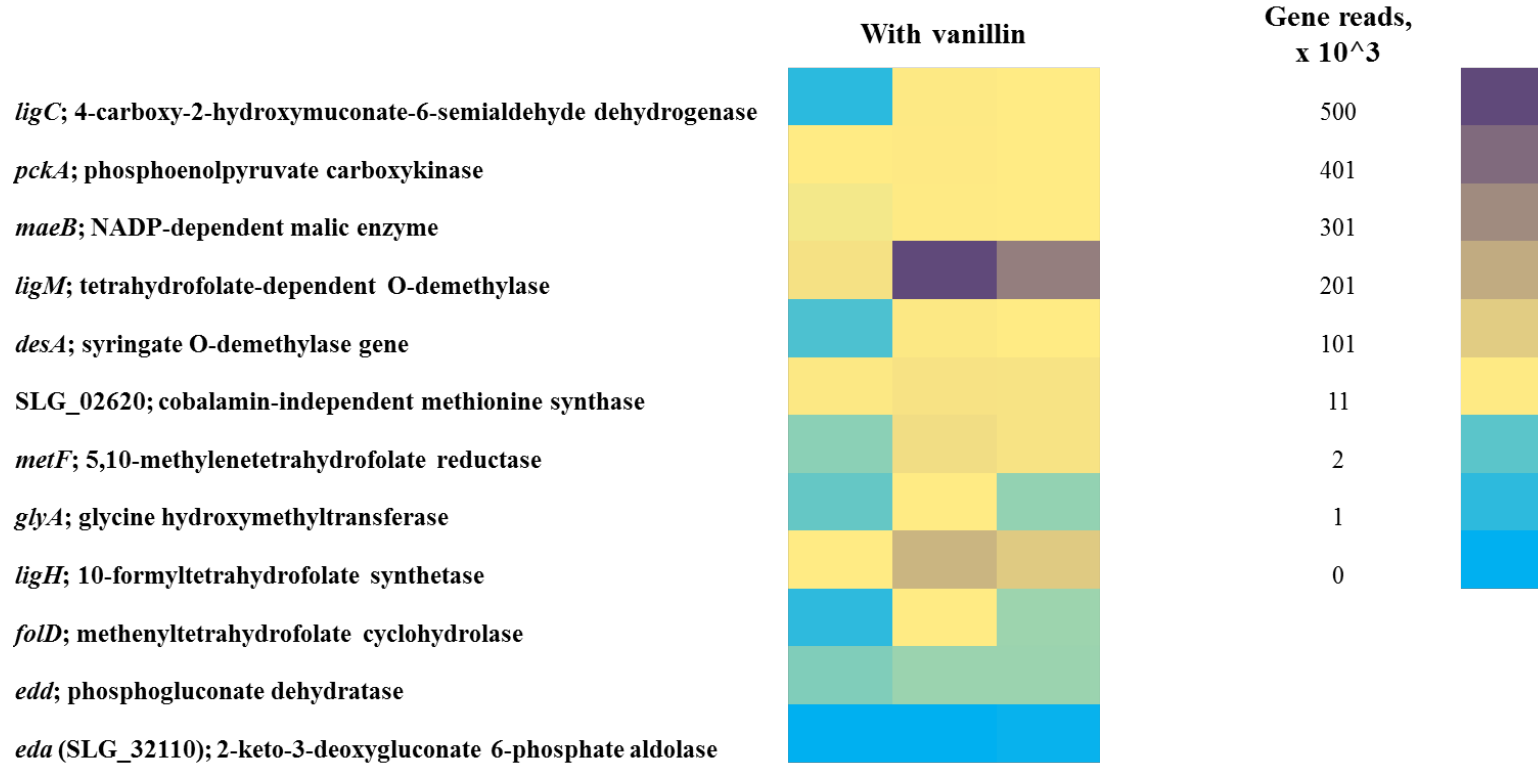
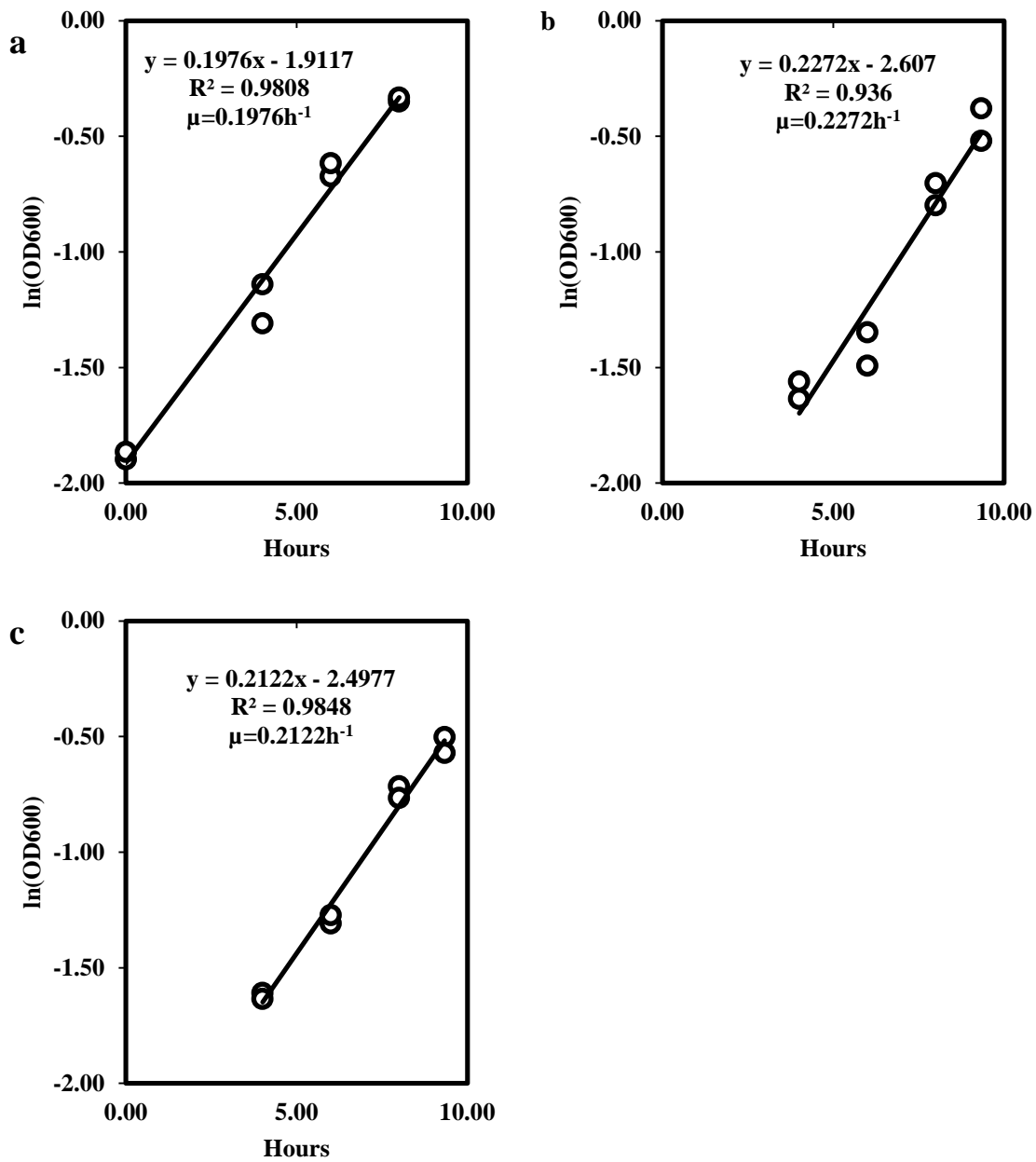


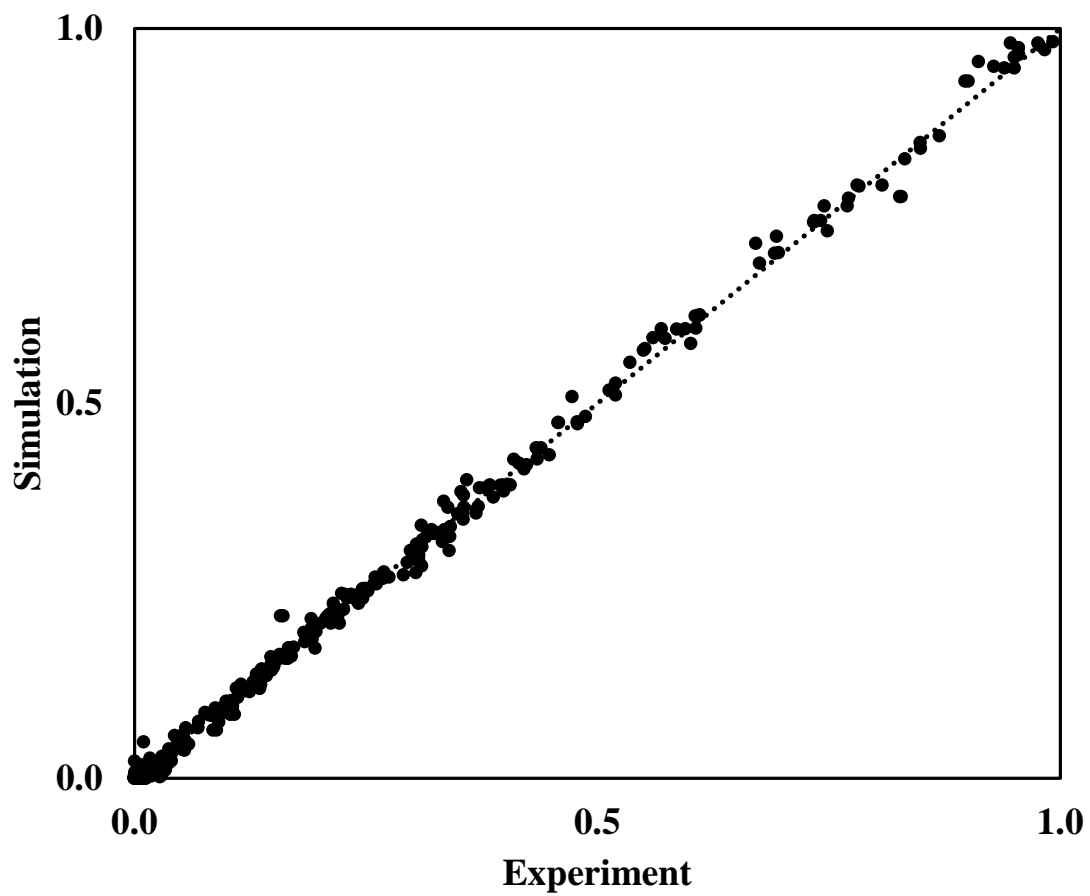
**Figure S1:** Pathway for the synthesis of Adenosine Monophosphate (AMP) from Ribose – 5-Phosphate (R5P). The labeled carbon derived from formyl-THF (from C1 metabolism) for the synthesis of AMP is highlighted in blue. GAR: Glycinamide ribotide; FGAR: Formylglycinamide ribotide; AICAR: Aminoimidazole-4-carboxamide ribotide; IMP: Inosine monophosphate.



**Figure S2:** Heat map showing the gene reads obtained through RNA-seq analysis for genes involved in the C1-THF pathway and the cataplerotic pathway of SYK-6 grown in the presence of vanillin. In comparison to *ligC*, a critical gene of the vanillin catabolic pathway these genes are observed to be relatively well expressed. The results are presented in triplicates.



**Figure S3:** Specific growth rates of *Spingobium* SYK-6 growing on  $^{13}\text{C}$ -ring vanillin (a),  $^{13}\text{C}$ -aldehyde vanillin (b), and 50%  $^{13}\text{C}$ -ring vanillin and 50%  $^{13}\text{C}$ -aldehyde vanillin (c). The specific growth rates are determined by linear regression of time and  $\ln(\text{OD}_{600})$ .



**Figure S4:** Comparison of computationally simulated and experimentally determined MIDs.

**Table S1: Mass isotopomer distribution (MID). The standard deviation based on the technical error of the instrument is 0.02.**

<sup>13</sup>C Vanillin\_Phenyl

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.11	0.01	0.14	0.74						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.11	0.04	0.85							
	f(302) <sup>+</sup>	0.41	0.03	0.56							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.17	0.23	0.60							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.18	0.82								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.24	0.02	0.00	0.01	0.12	0.61				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.24	0.01	0.01	0.05	0.69					
	f(302) <sup>+</sup>	0.28	0.11	0.61							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.22	0.01	0.04	0.00	0.04	0.09	0.60			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.21	0.06	0.01	0.01	0.05	0.66				
	f(302) <sup>+</sup>	0.64	0.04	0.32							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.31	0.00	0.08	0.00	0.06	0.39	0.16			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.31	0.02	0.07	0.01	0.13	0.46				
	f(302) <sup>+</sup>	0.55	0.19	0.26							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.23	0.02	0.02	0.55	0.17	0.01				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.25	0.03	0.13	0.59	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.31	0.48	0.21							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.38	0.27	0.00	0.02	0.08	0.25				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.27	0.01	0.02	0.04	0.66					
	f(302) <sup>+</sup>	0.01	0.03	0.96							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.13	0.12	0.44	0.31						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.13	0.45	0.42							
	f(302) <sup>+</sup>	0.14	0.21	0.65							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.20	0.00	0.03	0.51	0.26					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.20	0.00	0.18	0.62						
	f(302) <sup>+</sup>	0.13	0.30	0.57							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.32	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.08	0.26	0.28
	[M-159] <sup>+</sup>	0.31	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	0.23	0.36	
	f(302) <sup>+</sup>	0.34	0.17	0.49							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.05	0.00	0.04	0.59	0.32					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.06	0.01	0.20	0.73						
	f(302) <sup>+</sup>	0.07	0.43	0.50							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.05	0.01	0.02	0.03	0.21	0.68				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.05	0.01	0.03	0.06	0.85					
	f(302) <sup>+</sup>	0.11	0.17	0.72							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.33	0.00	0.00	0.02	0.03	0.29	0.30			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.33	0.02	0.01	0.01	0.12	0.51				
	f(302) <sup>+</sup>	0.33	0.14	0.53							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.34	0.00	0.06	0.04	0.13	0.43	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.38	0.02	0.02	0.17	0.37	0.04				
	f(302) <sup>+</sup>	0.35	0.15	0.50							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.24	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	0.10	0.29	0.30
	[M-159] <sup>+</sup>	0.23	0.02	0.01	0.00	0.01	0.02	0.08	0.27	0.36	
	f(302) <sup>+</sup>	0.27	0.19	0.54							

<sup>13</sup>C Vanillin\_Methoxy

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.03	0.03							
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.91	0.05	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.93	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.12	0.84	0.04	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.14	0.84	0.02	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.62	0.33	0.05							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.47	0.52	0.01	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.49	0.51	0.00							
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.04	0.02	0.00	0.00					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.98	0.00	0.02	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.41	0.58	0.01							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.90	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.93	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00	0.00					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.99	0.00	0.00	0.01						
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.95	0.04	0.01							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.42	0.55	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.43	0.52	0.03	0.01	0.01	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							

<sup>13</sup>C Vanillin\_Aldehyde

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.87	0.14	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.03	0.03							
	f(302) <sup>+</sup>	0.86	0.14	0.00							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.80	0.20	0.00							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.86	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.04	0.00	0.01	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.90	0.09	0.01							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.92	0.05	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.59	0.40	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.84	0.15	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.63	0.37	0.00							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.51	0.48	0.01	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.83	0.17	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.36	0.48	0.16							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.74	0.04	0.04	0.07	0.05	0.06				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.84	0.05	0.05	0.03	0.03					
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.00	0.03							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.79	0.21	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
	f(302) <sup>+</sup>	0.81	0.18	0.01							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.46	0.53	0.00	0.01	0.00					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.83	0.15	0.02	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.34	0.43	0.23							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.63	0.27	0.09	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.72	0.24	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.85	0.15	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.45	0.55	0.00	0.00	0.00					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.84	0.16	0.00	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.60	0.40	0.00							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.82	0.18	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.79	0.19	0.02							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.68	0.29	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.87	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.90	0.10	0.00							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.78	0.21	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.81	0.14	0.03	0.02	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.60	0.31	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.65	0.30	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.83	0.17	0.00							



<sup>13</sup>C Acetate 1

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.87	0.13	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.03	0.03							
	f(302) <sup>+</sup>	0.85	0.14	0.01							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.85	0.15	0.00							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.65	0.19	0.06	0.10	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.80	0.20	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.75	0.19	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.95	0.04	0.01							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.74	0.26	0.00							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.79	0.13	0.06	0.01	0.01	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.81	0.19	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.83	0.17	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
	f(302) <sup>+</sup>	0.85	0.15	0.00							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.64	0.29	0.06	0.01	0.00					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.78	0.19	0.02	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.34	0.54	0.12							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.92	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.51	0.47	0.02	0.00	0.00					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.74	0.25	0.01	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.75	0.25	0.00							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.42	0.36	0.22	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.44	0.55	0.01	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.75	0.25	0.00							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.90	0.06	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.93	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.00	0.01	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.06	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							

<sup>13</sup>C Acetate 1,2

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.73	0.06	0.05	0.16						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.73	0.08	0.19							
	f(302) <sup>+</sup>	0.86	0.09	0.05							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.70	0.06	0.24							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.78	0.22								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.93	0.04	0.01	0.00	0.00	0.02				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.03	0.01	0.01	0.01					
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.03	0.01							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.65	0.08	0.20	0.07	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.74	0.23	0.01	0.00	0.01	0.01				
	f(302) <sup>+</sup>	0.79	0.03	0.18							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.87	0.07	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.86	0.05	0.02	0.01	0.03	0.03				
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.00	0.04							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.43	0.44	0.13							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.79	0.03	0.01	0.03	0.04	0.10				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.80	0.03	0.01	0.02	0.14					
	f(302) <sup>+</sup>	0.60	0.00	0.40							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.67	0.04	0.06	0.23						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.64	0.13	0.23							
	f(302) <sup>+</sup>	0.68	0.08	0.24							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.57	0.03	0.06	0.11	0.24					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.68	0.07	0.00	0.25						
	f(302) <sup>+</sup>	0.33	0.57	0.10							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.91	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.01	0.02							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.44	0.07	0.11	0.13	0.25					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.43	0.10	0.17	0.30						
	f(302) <sup>+</sup>	0.52	0.10	0.38							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.34	0.03	0.11	0.08	0.12	0.32				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.35	0.06	0.12	0.12	0.35					
	f(302) <sup>+</sup>	0.45	0.21	0.34							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.06	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.83	0.09	0.00	0.00	0.03	0.05				
	f(302) <sup>+</sup>	0.76	0.15	0.09							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.97	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.93	0.00	0.07							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.87	0.06	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03
	[M-159] <sup>+</sup>	0.89	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	
	f(302) <sup>+</sup>	0.94	0.02	0.04							

<sup>13</sup>C Glucose\_1,2

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.03	0.00	0.01						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.03	0.03							
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.01	0.01							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.01	0.01							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.04	0.00	0.01	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.85	0.09	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.93	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.49	0.51	0.00							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.72	0.11	0.17							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.98	0.01	0.01							
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00	0.00					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.40	0.60	0.00							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.90	0.09	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.89	0.09	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00	0.00					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.98	0.01	0.00	0.01						
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.02	0.01							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.93	0.04	0.00	0.02	0.01	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.90	0.09	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.87	0.12	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							

<sup>13</sup>C Xylose\_1,2

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.02	0.03							
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.00	0.02							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.03	0.00	0.01	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.88	0.07	0.00	0.04	0.00	0.01	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.80	0.18	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.00	0.01							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.97	0.02	0.01	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.50	0.50	0.00							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	1.00	0.00	0.00							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.43	0.54	0.03							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.93	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.92	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00	0.00					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.98	0.01	0.00	0.01						
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.94	0.03	0.03							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.92	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							

<sup>13</sup>C Pyruvate+Malate

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.52	0.04	0.03	0.41						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.52	0.05	0.43							
	f(302) <sup>+</sup>	0.82	0.09	0.09							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.78	0.04	0.19							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.79	0.21								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.91	0.05	0.00	0.00	0.00	0.04				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.04	0.01	0.01	0.03					
	f(302) <sup>+</sup>	0.92	0.04	0.04							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.47	0.03	0.18	0.27	0.03	0.02	0.01			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.74	0.20	0.02	0.01	0.01	0.02				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.82	0.06	0.06	0.02	0.02	0.00	0.02			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.82	0.06	0.08	0.01	0.02	0.02				
	f(302) <sup>+</sup>	0.92	0.02	0.06							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.04	0.01	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.51	0.49	0.00							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.74	0.04	0.04	0.07	0.05	0.06				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.84	0.05	0.05	0.03	0.03					
	f(302) <sup>+</sup>	0.49	0.26	0.25							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.65	0.09	0.08	0.18						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.67	0.14	0.19							
	f(302) <sup>+</sup>	0.71	0.06	0.23							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.78	0.05	0.05	0.07	0.05					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.78	0.10	0.06	0.06						
	f(302) <sup>+</sup>	0.38	0.54	0.08							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.90	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.51	0.10	0.17	0.14	0.08					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.53	0.15	0.20	0.12						
	f(302) <sup>+</sup>	0.64	0.12	0.24							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.35	0.08	0.21	0.12	0.14	0.10				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.36	0.10	0.23	0.18	0.13					
	f(302) <sup>+</sup>	0.53	0.23	0.24							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.88	0.05	0.03	0.00	0.02	0.02	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.90	0.06	0.00	0.01	0.02	0.01				
	f(302) <sup>+</sup>	0.85	0.10	0.05							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.04	0.00	0.02	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	1.00	0.00	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.90	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
	[M-159] <sup>+</sup>	0.90	0.07	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.02	0.01							

<sup>13</sup>C Pyruvate + Glyoxylate

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.59	0.06	0.12	0.23						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.65	0.08	0.27							
	f(302) <sup>+</sup>	0.75	0.04	0.21							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.82	0.06	0.12							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.87	0.13								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.88	0.06	0.00	0.01	0.01	0.04				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.89	0.04	0.01	0.03	0.03					
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.00	0.02							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.53	0.04	0.13	0.25	0.00	0.02	0.03			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.74	0.19	0.01	0.01	0.02	0.03				
	f(302) <sup>+</sup>	0.78	0.05	0.17							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.85	0.12	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.83	0.05	0.05	0.02	0.03	0.02				
	f(302) <sup>+</sup>	0.92	0.03	0.05							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.06	0.00	0.01	0.01	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.42	0.49	0.09							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.15	0.01	0.00	0.03	0.04	0.77				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.86	0.06	0.02	0.04	0.02					
	f(302) <sup>+</sup>	1.00	0.00	0.00							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.69	0.13	0.09	0.09						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.72	0.16	0.12							
	f(302) <sup>+</sup>	0.78	0.07	0.15							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.74	0.10	0.08	0.07	0.01					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.69	0.15	0.09	0.07						
	f(302) <sup>+</sup>	0.37	0.53	0.10							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.01	0.01							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.47	0.12	0.23	0.13	0.05					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.49	0.19	0.24	0.08						
	f(302) <sup>+</sup>	0.64	0.15	0.21							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.37	0.08	0.17	0.16	0.17	0.05				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.38	0.11	0.19	0.24	0.08					
	f(302) <sup>+</sup>	0.47	0.25	0.28							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.88	0.09	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.86	0.09	0.02	0.01	0.02	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.76	0.17	0.07							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.05	0.01	0.03	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	1.00	0.00	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.89	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
	[M-159] <sup>+</sup>	0.89	0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.02	0.02							

<sup>13</sup>C Pyruvate +OAA

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.68	0.04	0.04	0.24						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.70	0.04	0.26							
	f(302) <sup>+</sup>	0.90	0.02	0.08							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.79	0.04	0.17							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.82	0.18								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.87	0.06	0.02	0.02	0.01	0.02				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.88	0.04	0.04	0.02	0.02					
	f(302) <sup>+</sup>	0.94	0.03	0.03							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.61	0.06	0.15	0.13	0.03	0.01	0.01			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.77	0.06	0.13	0.01	0.02	0.01				
	f(302) <sup>+</sup>	0.83	0.03	0.14							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.77	0.09	0.08	0.02	0.01	0.03	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.79	0.06	0.09	0.03	0.02	0.01				
	f(302) <sup>+</sup>	0.89	0.05	0.06							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.51	0.45	0.04							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.71	0.06	0.02	0.07	0.07	0.07				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.86	0.06	0.04	0.02	0.02					
	f(302) <sup>+</sup>	0.71	0.21	0.08							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.65	0.12	0.08	0.15						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.67	0.17	0.16							
	f(302) <sup>+</sup>	0.74	0.06	0.20							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.75	0.08	0.07	0.07	0.03					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.75	0.13	0.09	0.03						
	f(302) <sup>+</sup>	0.36	0.55	0.09							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.49	0.14	0.17	0.14	0.06					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.52	0.19	0.19	0.10						
	f(302) <sup>+</sup>	0.64	0.14	0.22							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.39	0.11	0.22	0.14	0.10	0.04				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.41	0.15	0.22	0.14	0.08					
	f(302) <sup>+</sup>	0.55	0.28	0.17							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.88	0.09	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.90	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01				
	f(302) <sup>+</sup>	0.84	0.11	0.05							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.04	0.01	0.02	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.88	0.09	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.88	0.07	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.02	0.02							

**Pyruvate + <sup>13</sup>C Formate**

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.93	0.04	0.03							
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
	[M-85] <sup>+</sup>	1.00	0.00								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.04	0.00	0.01	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.77	0.08	0.03	0.11	0.01	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.88	0.10	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.03	0.02	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.45	0.43	0.12							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.80	0.06	0.00	0.13	0.01	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.48	0.51	0.01	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.50	0.50	0.00							
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.02	0.01							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.08	0.00	0.00	0.00					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.41	0.57	0.02							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.92	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.89	0.11	0.00	0.00	0.00					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.90	0.09	0.00	0.01						
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.86	0.13	0.01	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.86	0.13	0.01							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.88	0.06	0.00	0.06	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.92	0.07	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	[M-159] <sup>+</sup>	0.92	0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							



**<sup>13</sup>C Vanillin + <sup>13</sup>C Formate**

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.04	0.02							
	f(302) <sup>+</sup>	0.96	0.03	0.01							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.04	0.00	0.01	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.02	0.01							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.93	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.94	0.05	0.01	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.93	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.52	0.41	0.07							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.04	0.00	0.01	0.01	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.96	0.04	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.78	0.22	0.0							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.73	0.26	0.01	0.00						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.74	0.26	0.00							
	f(302) <sup>+</sup>	0.97	0.03	0.00							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.87	0.09	0.04	0.00	0.00					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.99	0.01	0.00	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.42	0.56	0.02							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.90	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	[M-159] <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.94	0.06	0.00	0.00	0.00					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00						
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.93	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.91	0.08	0.01							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.95	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.93	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.57	0.40	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.50	0.45	0.02	0.02	0.01	0.00				
	f(302) <sup>+</sup>	0.93	0.07	0.00							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.91	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	[M-159] <sup>+</sup>	0.92	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	f(302) <sup>+</sup>	0.98	0.02	0.00							

Ring <sup>13</sup> C Vanillin + Methanol											
Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.07	0.01	0.12	0.80						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.07	0.04	0.89							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.10	0.35	0.55							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.11	0.89								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.16	0.01	0.00	0.01	0.12	0.70				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.17	0.01	0.01	0.04	0.77					
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.06	0.01	0.04	0.02	0.02	0.12	0.73			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.08	0.05	0.00	0.01	0.06	0.80				
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.17	0.03	0.07	0.01	0.05	0.42	0.25			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.18	0.01	0.06	0.02	0.15	0.58				
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.18	0.02	0.02	0.54	0.24	0.00				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.18	0.02	0.15	0.65	0.00					
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.08	0.18	0.46	0.28						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.09	0.44	0.47							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.11	0.01	0.03	0.56	0.29					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.13	0.01	0.17	0.70						
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.29	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	0.20	0.28	0.14
	[M-159] <sup>+</sup>	0.29	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.12	0.31	0.24	
	f(302) <sup>+</sup>	0.32	0.30	0.38							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.04	0.01	0.03	0.62	0.30					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.05	0.01	0.18	0.76						
	f(302) <sup>+</sup>	0.06	0.48	0.46							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.04	0.01	0.01	0.02	0.19	0.73				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.04	0.01	0.02	0.05	0.88					
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.25	0.02	0.01	0.01	0.03	0.33	0.35			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.27	0.02	0.01	0.01	0.14	0.55				
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.32	0.02	0.01	0.05	0.26	0.31	0.03			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.33	0.03	0.05	0.26	0.30	0.03				
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.16	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.06	0.22	0.35	0.18
	[M-159] <sup>+</sup>	0.16	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.13	0.37	0.30	

**Ring <sup>13</sup>C Vanillin + Glyoxylate**

Amino Acid	TBDMS Fragment	MID									
		M <sub>0</sub>	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>	M <sub>5</sub>	M <sub>6</sub>	M <sub>7</sub>	M <sub>8</sub>	M <sub>9</sub>
Ala	[M-57] <sup>+</sup>	0.11	0.02	0.14	0.73						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.11	0.06	0.83							
	f(302) <sup>+</sup>	0.31	0.11	0.58							
Gly	[M-57] <sup>+</sup>	0.29	0.24	0.47							
	[M-85] <sup>+</sup>	0.30	0.70								
Val	[M-57] <sup>+</sup>	0.23	0.01	0.00	0.02	0.14	0.60				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.22	0.01	0.01	0.08	0.68					
	f(302) <sup>+</sup>	0.27	0.10	0.63							
Leu	[M-15] <sup>+</sup>	0.19	0.03	0.04	0.01	0.03	0.14	0.56			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.20	0.06	0.00	0.02	0.09	0.63				
	f(302) <sup>+</sup>	0.63	0.04	0.33							
Ile	[M-15] <sup>+</sup>	0.25	0.04	0.09	0.00	0.08	0.35	0.19			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.30	0.02	0.06	0.03	0.17	0.42				
	f(302) <sup>+</sup>	0.58	0.19	0.23							
Meth	[M-57] <sup>+</sup>	0.23	0.02	0.05	0.50	0.19	0.01				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.24	0.04	0.18	0.54	0.00					
	f(302) <sup>+</sup>	0.19	0.36	0.45							
Pro	[M-57] <sup>+</sup>	0.26	0.02	0.01	0.03	0.20	0.48				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.26	0.01	0.02	0.08	0.63					
	f(302) <sup>+</sup>	0.09	0.19	0.72							
Ser	[M-57] <sup>+</sup>	0.16	0.15	0.42	0.27						
	[M-159] <sup>+</sup>	0.17	0.42	0.41							
	f(302) <sup>+</sup>	0.18	0.28	0.54							
Thr	[M-57] <sup>+</sup>	0.17	0.02	0.07	0.55	0.19					
	[M-85] <sup>+</sup>	0.17	0.03	0.21	0.59						
	f(302) <sup>+</sup>	0.13	0.30	0.57							
Phe	[M-57] <sup>+</sup>	0.31	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.17	0.26	0.17
	[M-159] <sup>+</sup>	0.31	0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	0.11	0.27	0.26	
	f(302) <sup>+</sup>	0.35	0.23	0.42							
Asp	[M-57] <sup>+</sup>	0.05	0.01	0.08	0.59	0.27					
	[M-159] <sup>+</sup>	0.05	0.04	0.24	0.67						
	f(302) <sup>+</sup>	0.08	0.44	0.48							
Glu	[M-57] <sup>+</sup>	0.05	0.01	0.02	0.05	0.24	0.63				
	[M-159] <sup>+</sup>	0.05	0.01	0.04	0.12	0.78					
	f(302) <sup>+</sup>	0.10	0.18	0.72							
Lys	[M-57] <sup>+</sup>	0.29	0.02	0.00	0.01	0.06	0.32	0.30			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.29	0.02	0.01	0.03	0.18	0.47				
	f(302) <sup>+</sup>	0.22	0.15	0.63							
His	[M-57] <sup>+</sup>	0.27	0.02	0.01	0.06	0.26	0.35	0.03			
	[M-159] <sup>+</sup>	0.26	0.03	0.07	0.25	0.35	0.04				
	f(302) <sup>+</sup>	0.31	0.17	0.52							
Tyr	[M-57] <sup>+</sup>	0.18	0.02	0.00	0.00	0.01	0.02	0.06	0.19	0.31	0.21
	[M-159] <sup>+</sup>	0.19	0.01	0.00	0.00	0.01	0.03	0.12	0.32	0.32	
	f(302) <sup>+</sup>	0.22	0.27	0.51							

**Table S2: Flux values and 95% confidence intervals**

Metabolic Reactions	Gene locus / Gene name	Best fit	95LB	95UB
'Vanillin == OAA'	*	100.0	100.0	100.0
'Vanillin == PYR'	*	100.0	100.0	100.0
'Vanillin == Methyl_THF'	*	100.0	100.0	100.0
'G6P == F6P'	SLG_24770 <i>pgi</i>	-2.0	-2.0	-2.0
'F6P == DHAP + GAP'	SLG_20410; SLG_23320	-9.7	-9.8	-9.5
'DHAP == GAP'	SLG_25820 <i>tpiA</i>	-9.7	-9.8	-9.5
'GAP == 3PG'	SLG_23350; SLG_23340 <i>pgk</i>	-25.3	-25.7	-24.8
'3PG == PEP'	SLG_05370 <i>gpm</i> ; SLG_24020 <i>eno</i>	-40.3	-41.2	-39.2
'PEP == PYR'	SLG_05190 <i>pyk</i>	18.2	10.1	27.7
'PYR == AceCoA + CO <sub>2</sub> '	SLG_11810; SLG_18980	98.9	96.9	103.9
'AceCoA + OAA == CIT'	SLG_25260 <i>glfA</i>	70.2	68.3	73.1
'CIT == ICIT'	SLG_11220	70.2	68.3	73.1
'ICIT == AKG + CO <sub>2</sub> '	SLG_15400 <i>icd</i>	68.5	65.2	71.1
'AKG == SucCoA + CO <sub>2</sub> '	SLG_00740 <i>sucA</i> ; SLG_00730 <i>sucB</i>	58.0	54.7	60.8
'SucCoA == SUC'	SLG_00720 <i>sucD</i>	53.4	50.1	56.3
'SUC == FUM'	SLG_00660 <i>sdhB</i>	59.7	57.7	62.8
'FUM == MAL'	SLG_04850 <i>fumA/fumB</i>	63.3	61.3	66.3
'MAL == OAA'	SLG_00710 <i>mdh</i>	58.7	50.4	69.0
'MAL == PYR + CO <sub>2</sub> '	SLG_38170 <i>maeB</i>	6.3	0.0	14.4
'PEP + CO <sub>2</sub> == OAA'	SLG_14800 <i>pckA</i>	-66.1	-74.9	-57.9
'ICIT == GLX + SUC'	SLG_09310	1.7	0.0	5.5
'GLX + AceCoA == MAL'	SLG_02210 <i>glcB</i>	1.7	0.0	5.5
'Ru5P == X5P'	SLG_01700 <i>rpe</i>	-7.0	-7.1	-6.8
'Ru5P == R5P'	SLG_29730 <i>rpiB</i>	7.0	6.8	7.1
'X5P + R5P == GAP + S7P'	SLG_23360	-1.7	-1.8	-1.7

'GAP + S7P == E4P + F6P'	SLG_37260 <i>tal</i>	-1.7	-1.8	-1.7
'X5P + E4P == GAP + F6P'	SLG_23360	-5.3	-5.3	-5.1
'PG6 == PYR + GAP'	SLG_32090 <i>edd</i> ; SLG_32110	0.0	0.0	0.0
'AceCoA == Ac'	SLG_00120 <i>acs</i>	-5.0	-5.1	-4.9
'AKG == GLU'	SLG_29280 <i>glhD</i>	63.0	61.6	63.9
'GLU == GLN'	SLG_12030 <i>glnA</i>	6.6	6.4	6.6
'GLU == PRO'	SLG_01040 <i>proB</i> ; SLG_06160 <i>proA</i> ; SLG_07390 <i>proC</i>	2.0	2.0	2.1
'GLU + GLN + CO <sub>2</sub> + ASP + AceCoA == ARG + AKG + FUM + Ac'	*	2.7	2.7	2.8
'OAA + GLU == ASP + AKG'	SLG_37020 <i>aspB</i>	19.1	18.5	19.7
'ASP == ASN'	SLG_19730	2.2	2.2	2.3
'PYR == ALA'	SLG_17620 <i>ald</i>	4.7	4.6	4.8
'G3P + GLU == SER + AKG'	SLG_01250 <i>serA</i> ; SLG_01240 <i>serC</i> ; SLG_20680 <i>serB</i>	9.0	8.3	9.6
'SER == GLY + Methylene_THF'	SLG_29740 <i>glyA</i>	4.2	3.6	4.8
'Methylene_THF == Methyl_THF'	SLG_12750 <i>metF</i>	-1.0	-1.7	-0.4
'Methylene_THF == Formyl_THF'	SLG_03300 <i>folD</i>	0.9	0.9	0.9
'ASP == THR'	*	6.5	5.9	7.1
'THR == GLY + AceCoA'	SLG_38980 <i>ltaA</i>	1.5	0.9	2.0
'SER + AceCoA == CYS + Ac'	SLG_08850 <i>cysE</i> ; SLG_05810 <i>cysK</i>	2.3	2.2	2.3
'ASP + PYR + GLU + SucCoA == LYS + CO <sub>2</sub> + AKG + SUC'	*	3.2	3.1	3.2
'ASP + Methyl_THF + AceCoA == MET + Ac'		1.4	1.4	1.4
'GLU + 2*PYR == VAL + AKG + CO <sub>2</sub> '	*	3.9	3.8	4.0
'AceCoA + 2*PYR + GLU == LEU + AKG + 2*CO <sub>2</sub> '	*	4.2	4.1	4.2
'THR + PYR + GLU == ILE + AKG + CO <sub>2</sub> '	*	2.7	2.6	2.7
'E4P + 2*PEP + GLU == PHE + AKG + CO <sub>2</sub> '	*	1.7	1.7	1.7
'E4P + 2*PEP + GLU == TYR + AKG + NADH + CO <sub>2</sub> '	*	1.3	1.2	1.3
'SER + R5P + 2*PEP + E4P + GLN == TRP + GAP + PYR + GLU + CO <sub>2</sub> '	*	0.5	0.5	0.5

'R5P + Formyl_THF + GLN + ASP == HIS + AKG + FUM '	**	0.9	0.9	0.9
'CO <sub>2</sub> == CO <sub>2</sub> _Ex'		414.2	409.2	422.5
'CO <sub>2</sub> _air + CO <sub>2</sub> == CO <sub>2</sub> + CO <sub>2</sub> _air'		1.1	0.0	18.0
'0.488*ALA+0.281*ARG+0.229*ASN+0.229*ASP+0.087*CYS+0.250*GLU+0.250*GLN+0.582*GLY+0.090*HIS+0.276*ILE+0.428*LEU+0.326*LYS+0.146*MET+0.176*PHE+0.210*PRO+0.205*SER+0.241*THR+0.054*TRP+0.131*TYR+0.402*VAL+0.205*G6P+0.071*F6P+0.754*R5P+0.129*GAP+0.619*G3P+0.051*PEP+0.083*PYR+2.510* AceCoA+0.087*AKG+0.340*OAA+0.443*Methylene_THF==39.68*Biomass'		9.7	9.5	9.8
'Methyl_THF == CO <sub>2</sub> '		97.5	96.9	98.2
Reversibility Coefficient of Reaction 4		0.45	0.33	0.68
Reversibility Coefficient of Reaction 5		1.00	0.87	1.00
Reversibility Coefficient of Reaction 6		1.00	0.92	1.00
Reversibility Coefficient of Reaction 7		1.00	1.00	1.00
Reversibility Coefficient of Reaction 8		1.00	1.00	1.00
Reversibility Coefficient of Reaction 9		0.41	0.38	0.43
Reversibility Coefficient of Reaction 12		0.13	0.14	0.72
Reversibility Coefficient of Reaction 13		0.00	0.00	0.67
Reversibility Coefficient of Reaction 15		0.04	0.00	0.99
Reversibility Coefficient of Reaction 16		0.17	0.00	0.98
Reversibility Coefficient of Reaction 17		1.00	0.77	1.00
Reversibility Coefficient of Reaction 18		0.75	0.74	0.99
Reversibility Coefficient of Reaction 20		0.22	0.14	0.26
Reversibility Coefficient of Reaction 25		1.00	1.00	1.00
Reversibility Coefficient of Reaction 26		1.00	1.00	1.00
Reversibility Coefficient of Reaction 27		0.16	0.14	0.24
Reversibility Coefficient of Reaction 28		0.72	0.30	0.99
Reversibility Coefficient of Reaction 29		0.18	0.15	0.22
Reversibility Coefficient of Reaction 40		0.11	0.10	0.12
Reversibility Coefficient of Reaction 41		0.00	0.00	0.00
Simulated ratio of 13C aldehyde		0.52	0.51	0.52

**Note:** The flux values are represented as the relative values to a vanillin uptake rate of 100.

Many genes have multiple loci and only one of the loci is presented in this table for representative purpose.

\* These conversions involve more than 3 reactions and their annotation has been verified in the KEGG database.

\*\* Histidine synthesis involves 10 reactions steps from R5P and all of it except one is annotated in the KEGG database.