

Table S1. MRM transitions and collision energies of nucleotide sugars and their isotopically labeled or synthetic analogs.

Compound	Chemical formula	HMDB ID	Retention time (min)	dMRM time window	monoisotopic mass (amu)	Q1 mass (amu)	Q3 mass (amu)	Collision energy (eV)
UDP-xylose	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂	HMDB0001018	9,6	1	536,04	535,03	79,10	30
UDP-xylose	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂	HMDB0001018	9,6	1	536,04	535,03	323,20	20
13C5-UDP-xylose	13C ₅ -C ₉ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂		9,6	1	541,04	540,03	79,10	30
13C5-UDP-xylose	13C ₅ -C ₉ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂		9,6	1	541,04	540,03	323,20	20
CDP-ribitol	C ₁₄ H ₂₅ N ₃ O ₁₅ P ₂	n.a.	4,8	1	537,08	536,07	78,80	50
CDP-ribitol	C ₁₄ H ₂₅ N ₃ O ₁₅ P ₂	n.a.	4,8	1	537,08	536,07	322,00	20
13C5-CDP-ribitol	13C ₅ -C ₉ H ₂₅ N ₃ O ₁₅ P ₂		4,8	1	542,08	541,07	78,80	50
13C5-CDP-ribitol	13C ₅ -C ₉ H ₂₅ N ₃ O ₁₅ P ₂		4,8	1	542,08	541,07	322,00	20
UDP-galactose	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂	HMDB0012305	7,4	1	566,06	565,05	79,00	30
UDP-galactose	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂	HMDB0012305	7,4	1	566,06	565,05	323,10	24
13C6-UDP-galactose	13C ₆ -C ₉ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂		7,4	1	572,06	571,05	79,00	30
13C6-UDP-galactose	13C ₆ -C ₉ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂		7,4	1	572,06	571,05	323,10	24
UDP-glucose	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂	HMDB0000286	8,3	1	566,06	565,05	79,00	44
UDP-glucose	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂	HMDB0000286	8,3	1	566,06	565,05	323,20	20
13C6-UDP-glucose	13C ₆ -C ₉ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂		8,3	1	572,06	571,05	79,00	44
13C6-UDP-glucose	13C ₆ -C ₉ H ₂₄ N ₂ O ₁₇ P ₂		8,3	1	572,06	571,05	323,20	20
UDP-GalNAc	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂	HMDB0060522	10,5	1	607,08	606,07	78,90	50
UDP-GalNAc	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂	HMDB0060522	10,5	1	607,08	606,07	273,00	36
13C6-UDP-GalNAc	13C ₆ -C ₁₁ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂		10,5	1	613,08	612,07	78,90	50
13C6-UDP-GalNAc	13C ₆ -C ₁₁ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂		10,5	1	613,08	612,07	273,00	36
UDP-GlcNAc	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂	HMDB0000290	10,7	1	607,08	606,07	282,10	30
UDP-GlcNAc	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂	HMDB0000290	10,7	1	607,08	606,07	385,10	28
13C6-UDP-GlcNAc	13C ₆ -C ₁₁ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂		10,7	1	613,08	612,07	282,10	30
13C6-UDP-GlcNAc	13C ₆ -C ₁₁ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂		10,7	1	613,08	612,07	385,10	28
UDP-HexNPoc	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O ₁₈ P ₂	n.a.	18,0	1	647,08	646,07	282,10	30
UDP-HexNPoc	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O ₁₈ P ₂	n.a.	18,0	1	647,08	646,07	282,10	30
CMP-NeuNAc	C ₂₀ H ₃₁ N ₄ O ₁₆ P	HMDB0001176	6,3	1	614,15	613,14	78,90	54
CMP-NeuNAc	C ₂₀ H ₃₁ N ₄ O ₁₆ P	HMDB0001176	6,3	1	614,15	613,14	321,90	20
13C6-CMP-NeuNAc	13C ₆ -C ₁₄ H ₃₁ N ₄ O ₁₆ P		6,3	1	620,15	619,14	78,90	54
13C6-CMP-NeuNAc	13C ₆ -C ₁₄ H ₃₁ N ₄ O ₁₆ P		6,3	1	620,15	619,14	321,90	20
CMP-3Fax-NeuNAc	C ₂₀ H ₃₀ FN ₄ O ₁₆ P	n.a.	5,8	1	632,13	631,13	78,90	54
CMP-3Fax-NeuNAc	C ₂₀ H ₃₀ FN ₄ O ₁₆ P	n.a.	5,8	1	632,13	631,13	321,90	20
CMP-NeuNPoc	C ₂₂ H ₃₁ N ₄ O ₁₇ P	n.a.	16,2	1	654,13	653,13	78,90	54
CMP-NeuNPoc	C ₂₂ H ₃₁ N ₄ O ₁₇ P	n.a.	16,2	1	654,13	653,13	321,90	20
CMP-NeuNGc	C ₂₀ H ₃₁ N ₄ O ₁₇ P	HMDB0012206	16,2	1	630,14	629,13	78,90	54
CMP-NeuNGc	C ₂₀ H ₃₁ N ₄ O ₁₇ P	HMDB0012206	16,2	1	630,14	629,13	321,90	20
13C6-CMP-NeuNGc	13C ₆ -C ₁₄ H ₃₁ N ₄ O ₁₇ P		16,2	1	636,14	635,13	78,90	54
13C6-CMP-NeuNGc	13C ₆ -C ₁₄ H ₃₁ N ₄ O ₁₇ P		16,2	1	636,14	635,13	321,90	20
GDP-glucose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂	HMDB0003351	14,9	2	605,08	604,07	362,00	24
GDP-glucose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂	HMDB0003351	14,9	2	605,08	604,07	78,90	44
13C6-GDP-glucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂		14,9	2	611,08	610,07	362,00	24
13C6-GDP-glucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂		14,9	2	611,08	610,07	78,90	44
GDP-mannose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂	HMDB0001163	13,6	2	605,08	604,07	424,00	32
GDP-mannose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂	HMDB0001163	13,6	2	605,08	604,07	78,80	68
13C6-GDP-mannose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂		13,6	2	611,08	610,07	78,80	68
13C6-GDP-mannose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₆ P ₂		13,6	2	611,08	610,07	424,00	32
GDP-fucose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂	HMDB0252660	17,1	2	589,08	588,07	442,00	20
GDP-fucose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂	HMDB0252660	17,1	2	589,08	588,07	424,00	28
GDP-fucose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂	HMDB0252660	17,1	2	589,08	588,07	78,90	50
13C6-GDP-fucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂		17,1	2	595,08	594,07	442,00	20
13C6-GDP-fucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂		17,1	2	595,08	594,07	424,00	28
13C6-GDP-fucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂		17,1	2	595,08	594,07	78,90	50
ADP-glucose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂	HMDB0006557	19,9	2	589,08	588,07	346,20	24
ADP-glucose	C ₁₆ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂	HMDB0006557	19,9	2	589,08	588,07	241,10	28
13C6-ADP-glucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂		19,9	2	595,08	594,07	346,20	24
13C6-ADP-glucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₅ N ₅ O ₁₅ P ₂		19,9	2	595,08	594,07	241,10	28
UDP-GlcA	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₁₈ P ₂	HMDB0000935	15,4	2	580,03	579,02	403,00	20
UDP-GlcA	C ₁₅ H ₂₂ N ₂ O ₁₈ P ₂	HMDB0000935	15,4	2	580,03	579,02	158,90	42
13C6-UDP-GlcA	13C ₆ -C ₉ H ₂₂ N ₂ O ₁₈ P ₂		15,4	2	586,03	585,02	403,00	20
13C6-UDP-GlcA	13C ₆ -C ₉ H ₂₂ N ₂ O ₁₈ P ₂		15,4	2	586,03	585,02	158,90	42
ADP-ribose	C ₁₅ H ₂₃ N ₅ O ₁₄ P ₂	HMDB0248024	20,0	2	559,07	558,06	346,20	24
ADP-ribose	C ₁₅ H ₂₃ N ₅ O ₁₄ P ₂	HMDB0248024	20,0	2	559,07	558,06	78,80	64
13C5-ADP-ribose	13C ₅ -C ₁₀ H ₂₃ N ₅ O ₁₄ P ₂		20,0	2	564,07	563,06	346,20	24
13C5-ADP-ribose	13C ₅ -C ₁₀ H ₂₃ N ₅ O ₁₄ P ₂		20,0	2	564,07	563,06	78,80	64
dTDP-glucose	C ₁₆ H ₂₆ N ₂ O ₁₆ P ₂	HMDB0001328	18,8	2	564,08	563,07	321,00	20
dTDP-glucose	C ₁₆ H ₂₆ N ₂ O ₁₆ P ₂	HMDB0001328	18,8	2	564,08	563,07	79,10	48
13C6-dTDP-glucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₆ N ₂ O ₁₆ P ₂		18,8	2	570,08	569,07	321,00	20
13C6-dTDP-glucose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₆ N ₂ O ₁₆ P ₂		18,8	2	570,08	569,07	79,10	48
dTDP-rhamnose	C ₁₆ H ₂₆ N ₂ O ₁₅ P ₂	HMDB0006354	19,3	2	548,08	547,07	321,00	20
dTDP-rhamnose	C ₁₆ H ₂₆ N ₂ O ₁₅ P ₂	HMDB0006354	19,3	2	548,08	547,07	79,10	48
13C6-dTDP-rhamnose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₆ N ₂ O ₁₅ P ₂		19,3	2	554,08	553,07	321,00	20
13C6-dTDP-rhamnose	13C ₆ -C ₁₀ H ₂₆ N ₂ O ₁₅ P ₂		19,3	2	554,08	553,07	79,10	48
UDP-Arabinose	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂	HMDB0012303	7,1	1	536,04	535,03	322,90	20
UDP-Arabinose	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂	HMDB0012303	7,1	1	536,04	535,03	78,90	30
13C5-UDP-Arabinose	13C ₅ -C ₉ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂		7,1	1	541,04	540,03	322,90	20
13C5-UDP-Arabinose	13C ₅ -C ₉ H ₂₂ N ₂ O ₁₆ P ₂		7,1	1	541,04	540,03	78,90	30
UDP-ManNAc	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂	HMDB0013112	18,1	1	607,08	606,07	78,90	50
UDP-ManNAc	C ₁₇ H ₂₇ N ₃ O ₁₇ P ₂	HMDB0013112	18,1	1	607,08	606,07	273,00	36