**Supplementary tables**

Supplementary Table 1. List of amino acids with their formula, the possible isotopologues, their m/z after protonation ([M + H]+), and the approximate retention time.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Metabolite** | **Formula** | **Isotopologue** | **[M+H]+** | **Retention time (min)** |
| Alanine | C3H7NO2 | M0 | 90.0548 | 2.46 |
| M1 | 91.0582 |
| M2 | 92.0615 |
| M3 | 93.0649 |
| Arginine | C6H14N4O2 | M0 | 175.1187 | 3.69 |
| M1 | 176.1221 |
| M2 | 177.1254 |
| M3 | 178.1288 |
| M4 | 179.1322 |
| M5 | 180.1355 |
| M6 | 181.1389 |
| Aspartate/ Asparagine | C4H7NO4 | M0 | 134.0446 | 2.15 |
| M1 | 135.0480 |
| M2 | 136.0513 |
| M3 | 137.0547 |
| M4 | 138.0580 |
| Glutamate/ Glutamine | C5H9NO4 | M0 | 148.0603 | 2.42 |
| M1 | 149.0637 |
| M2 | 150.0670 |
| M3 | 151.0704 |
| M4 | 152.0737 |
| M5 | 153.0771 |
| Glycine | C2H5NO2 | M0 | 76.0393 | 2.23 |
| M1 | 77.0426 |
| M2 | 78.0460 |
| Histidine | C6H9N3O2 | M0 | 156.0766 | 3.25 |
| M1 | 157.0799 |
| M2 | 158.0833 |
| M3 | 159.0866 |
| M4 | 160.0900 |
|  | M5 | 161.0933 |
|  | M6 | 162.0967 |
| Isoleucine | C6H13NO2 | M0 | 132.1018 | 9.40 |
| M1 | 133.1051 |
| M2 | 134.1085 |
| M3 | 135.1118 |
| M4 | 136.1152 |
| M5 | 137.1185 |
| M6 | 138.1219 |
| Leucine | C6H13NO2 | M0 | 132.1018 | 10.70 |
| M1 | 133.1051 |
| M2 | 134.1085 |
| M3 | 135.1118 |
| M4 | 136.1152 |
| M5 | 137.1185 |
| M6 | 138.1219 |
| Lysine | C6H14N2O2 | M0 | 147.1127 | 3.23 |
| M1 | 148.1161 |
| M2 | 149.1194 |
| M3 | 150.1228 |
| M4 | 151.1261 |
| M5 | 152.1295 |
| M6 | 153.1328 |
| Phenylalanine | C9H11NO2 | M0 | 166.0859 | 15.90 |
| M1 | 167.0893 |
| M2 | 168.0926 |
| M3 | 169.0960 |
| M4 | 170.0993 |
| M5 | 171.1027 |
| M6 | 172.1061 |
| M7 | 173.1094 |
| M8 | 174.1128 |
| M9 | 175.1161 |
| Proline | C5H9NO2 | M0 | 116.0703 | 2.45 |
| M1 | 117.0737 |
| M2 | 118.0770 |
|  | M3 | 119.0804 |
|  | M4 | 120.0837 |
|  | M5 | 121.0871 |
| Serine | [C](https://fr.wikipedia.org/wiki/Carbone)3[H](https://fr.wikipedia.org/wiki/Hydrog%C3%A8ne)7[N](https://fr.wikipedia.org/wiki/Azote)[O](https://fr.wikipedia.org/wiki/Oxyg%C3%A8ne)3 | M0 | 106.0498 | 2.17 |
| M1 | 107.0532 |
| M2 | 108.0565 |
| M3 | 109.0599 |
| Threonine |  | M0 | 120.0654 | 2.32 |
|  | M1 | 121.0688 |
| [C](https://fr.wikipedia.org/wiki/Carbone)4[H](https://fr.wikipedia.org/wiki/Hydrog%C3%A8ne)9[N](https://fr.wikipedia.org/wiki/Azote)[O](https://fr.wikipedia.org/wiki/Oxyg%C3%A8ne)3 | M2 | 122.0721 |
|  | M3 | 123.0755 |
|  | M4 | 124.0788 |
| Tyrosine | [C](https://fr.wikipedia.org/wiki/Carbone)9[H](https://fr.wikipedia.org/wiki/Hydrog%C3%A8ne)11[N](https://fr.wikipedia.org/wiki/Azote)[O](https://fr.wikipedia.org/wiki/Oxyg%C3%A8ne)3 | M0 | 182.0810 | 10.10 |
| M1 | 183.0844 |
| M2 | 184.0877 |
| M3 | 185.0911 |
| M4 | 186.0944 |
| M5 | 187.0978 |
| M6 | 188.1011 |
| M7 | 189.1045 |
| M8 | 190.1079 |
| M9 | 191.1112 |
| Valine | [C](https://fr.wikipedia.org/wiki/Carbone)5[H](https://fr.wikipedia.org/wiki/Hydrog%C3%A8ne)11[N](https://fr.wikipedia.org/wiki/Azote)[O](https://fr.wikipedia.org/wiki/Oxyg%C3%A8ne)2 | M0 | 118.0862 | 4.45 |
| M1 | 119.0896 |
| M2 | 120.0929 |
| M3 | 121.0963 |
| M4 | 122.0996 |
| M5 | 123.1030 |