Table S1. Cyanotoxins and other non-ribosomal peptides (NRPs) profile in Chroococcales cyanobacteria isolates.

Concentration	Class	Cyanometabolite	[M + H]	*Microcystis aeruginosa*						*Microcystis flos-aquae*			*Microcystis viridis*					*Microcystis wessenbergii*
				NRC_JIE/B6-07	NRC_JIE/B11-05	NRC_JIE/C6-07	NRC_JIE/D7-07	NRC_JIE/F9-06	NRC_SIR/D7-09	NRC_JIE/E11-05	NRC_SIR/D11-09	NRC_SIR/E10-09	NRC_JIE/C4-08	NRC_JIE/D8-06	NRC_JIE/F10-05	NRC_JIE/G4-08	NRC_JIE/G10-05	5 isolates JIE
Cyanotoxin, µg mg^{-1} freeze-dried biomass	MCs	Asp3 MC-LR																
		Asp3 MC-RR																
		dmMC-LR							0.014									
		dmMC-RR											0.063	0.088	0.092	0.121	0.066	
		MC-LR							0.230				0.766	0.617	0.427	0.497	0.311	
		MC-RR							0.060		6.7×10^{-5}	0.002	0.086	0.106	0.006	0.129	0.084	
		MC-YR							0.110				0.599	0.146	0.176	0.165	0.116	
		MC-WR																
	ATX-a																	
	STX																	
Peptides area g^{-1} freeze-dried weight	APs	Oscillamyde Y	589															
		AP 767	767															
		AP B	838															
		AP A	845															
		AP F	852															
	AERs	Aeruginosamide	562															
		AER 576	576															
		AER 582	582															
		AER 610	610															
		AER 622	622															
		AER 636	636															
		AER 649	649															
		AER 748	748															
		AER 763	763															
	CPs	CP 936	936															
		CP 944	944															
		CP 958	958															
		CP 975	975															
		CP 982	982															
		CP 993	993															
		CP 995	995															
		CP 997	997															
		CP 1011	1011															
		CP 1014	1014															
		CP 1022	1022															
		CP 1027	1027															
		CP 1062	1062															
	MRs	MR FR6	741															
		MR 785	785															
		MR 799	799															

IDA*

Absence
< 1 × 10^{7}
1–9 × 10^{7}
1–9 × 10^{8}
1–9 × 10^{9}
1–9 × 10^{10}
>1 × 10^{11}

*IDA – information-dependent acquisition method (qualitative data); JIE – isolates from Lake Jieznas; SIR – isolates from Lake Širvys.

Table S2. Cyanotoxins and other non-ribosomal peptides (NRPs) profile in Oscillatoriales cyanobacteria isolates.

Concentration	Class	Cyanometabolite	[M + H]	*Limnothrix planctonica*	*Planktolyngbya limnetica*		*Planktothrix agardhii*									
				7 isolates JIE	3 isolates JIE	6 isolates SIR	NRC_JIE/C9-07	NRC_JIE/E9-07	NRC_SIR/C11-09	NRC_SIR/C12-09	NRC_SIR/E8-07	NRC_SIR/F5-07	NRC_SIR/G5-05	NRC_SIR/G6-05	72 isolates SIR	4 isolates SIR
Cyanotoxin, μg mg^{-1} freeze-dried biomass	MCs	Asp3 MC-LR													+	-
		Asp3 MC-RR														
		dmMC-LR							0.146	0.396	0.169	0.193	0.071	0.210		
		dmMC-RR							0.892		1.013	1.105	1.357	1.154		
		MC-LR														
		MC-RR					7.4×10^{-5}				0.002	0.001	0.002	0.001		
		MC-YR									0.032	0.083	0.022	0.084		
		MC-WR														
	ATX-a														n.a.	n.a.
	STX														n.a.	n.a.
Peptides area g^{-1} freeze-dried weight	APs	AP 835	835				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		AP B	838				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		AP A	845				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		AP F	852				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		Oscillamide Y	859				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		AP 944	944				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
	AERs	AER 610	610				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		AER 705	705				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		AER 718	718				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		AER 738	738				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
	CPs	CP 964	964				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		CP 982	982				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
		CP 996	996				n.a.	n.a.							n.a.	n.a.
	MRs						n.a.	n.a.							n.a.	n.a.

IDA*

Absence
< 1 × 10^{7}
1–9 × 10^{7}
1–9 × 10^{8}
1–9 × 10^{9}
1–9 × 10^{10}
>1 × 10^{11}

*IDA – information-dependent acquisition method (qualitative data); JIE – isolates from Lake Jieznas; SIR – isolates from Lake Širvys.

Table S3. Cyanotoxins and other non-ribosomal peptides (NRPs) profile in Nostocales cyanobacteria isolates.

Concentration	Class	Cyanometabolite	[M + H]	*Anabaenopsis* cf. *elenkinii*	*Aphanizomenon gracile*						*Aphanizomenon flos-aquae*	*Cuspidothrix issatschenkoi*	*Dolichospermum crassum*		*Dolichospermum lemmermannii*	*Raphidiopsis mediterranea*	*Sphaerospermopsis aphanizomenoides*	
				2 isolates JIE	29 isolates JIE	NRC_SIR/D5-09	NRC_SIR/E9-08	NRC_SIR/G5-09	7 isolates SIR	27 isolates SIR	3 isolates SIR	5 isolates JIE	39 isolates SIR	2 isolates SIR	NRC_SIR/C5-05	2 isolates SIR	12 isolates JIE	
Toxin, μg mg^{-1} freeze-dried biomass	MCs												n.a.		n.a.			
	ATX-a																	
Peptides area g^{-1} freeze-dried weight	APs	AP 810	810		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP 815	815		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP 824	824		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP D	829		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP B	838		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP A	845		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP F	852		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		Oscillamide Y	859		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP 870	870		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		AP 999	999		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
	AERs				n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
	CPs	CP 843	843		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
		CP 988	988		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	
	MRs	MR 828	828		n.a.					n.a.	n.a.		n.a.		n.a.	n.a.	n.a.	

	Absence
	< 1 × 10^{7}
	1–9 × 10^{7}
	1–9 × 10^{8}
	1–9 × 10^{9}
	1–9 × 10^{10}
	>1 × 10^{11}

JIE – isolates from Lake Jieznas; SIR – isolates from Lake Širvys.