

	Mainly	Quantified	RI <sup>b)</sup>	RI <sup>c)</sup>	Compound	SJ <sup>d)</sup>	Chemical class	CAS No	Chemical	Relative values of	Average	S.E.M.	Average	S.E.M.	p-value <sup>e)</sup>
1	58,59,42	58		n.d.	Trimethylamine <sup>†</sup>	97	Tertiary aliphatic	75-50-3	C3H9N	0.5400	6612.2	1002.4	12245	1773.5	0.0037**
2	45,47,48	47		n.d.	Methanethiol <sup>†</sup>	96	Thiol	74-93-1	CH4S	0.6162	47.184	4.8305	76.577	6.0528	0.0028**
3	43,57,72	43	900	n.d.	2-Butanone <sup>†</sup>	98	Ketone	78-93-3	C4H8O	1.3098	876.52	44.931	669.19	56.750	0.0127*
4	41,43,86	43	996	n.d.	2-Pentanone <sup>†</sup>	98	Ketone	107-87-9	C5H10O	1.9853	3090.9	364.01	1556.9	282.28	0.0028**
5	45,79,94	94	1083	n.d.	Disulfide, dimethyl <sup>†</sup>	96	Disulfide	624-92-0	C2H6S2	0.5395	35.440	5.1244	65.693	5.1300	0.0008***
6	69,84,71	69	1130	n.d.	3-Penten, 2-one <sup>†</sup>	94	Ketone	3102-33-8	C5H8O	0.7630	261.33	38.193	342.51	33.607	0.0986
7	126,57,55	57	1148		RI1148 <sup>0)</sup>	85				1.0063	644.72	74.860	640.71	71.755	0.9725
8	30,46,61	30	1149	n.d.	Methane, nitro- <sup>#</sup>	94	Nitro	75-52-5	CH3NO2	0.6607	509.60	81.819	771.34	68.185	0.0079**
9	43,58,71	43	1179	n.d.	2-Heptanone <sup>†</sup>	95	Ketone	110-43-0	C7H14O	0.5543	155.84	21.563	281.17	26.046	0.0021**
10	55,69,98	69	1213		RI1213 <sup>0)</sup>	94	Ketone	6672-30-6	C6H10O	0.7969	59.424	8.7333	74.573	9.1587	0.2512
11	43,41,94	43	1235		RI1227 <sup>0)</sup>	90			C7H12O	0.3093	115.94	41.742	374.78	45.253	0.0008***
12	43,41,94	43	1242		RI1237 <sup>0)</sup>	90			C7H12O	0.6465	941.21	212.59	1455.8	227.24	0.1321
13	57,69,97	57	1291		RI1291 <sup>0)</sup>	89				1.1710	212.27	23.647	181.27	21.291	0.3494
14	41,43,71	43	1310		RI1310 <sup>0)</sup>					0.8617	315.30	32.427	365.89	30.966	0.2230
15	43,41,42	43	1334	n.d.	2-Acetyl-1-pyrroline <sup>#</sup>	91	Ketone/Pyrroline	85213-22-5	C6H9NO	0.6290	4526.3	503.67	7196.0	510.72	0.0048**
16	126,79,45	126	1392	n.d.	Dimethyl trisulfide <sup>†</sup>	91	Trisulfide	3658-80-8	C2H6S3	0.5121	6.6292	1.5737	12.945	1.9504	0.0159*
17	39,53,84	39	1400	n.d.	1-Nitro-2-methyl propene <sup>†</sup>	89	Nitro	1606-30-0	C4H7NO2	1.2223	16.529	1.3814	13.523	0.8371	0.0845
18	43,111,95	43	1406	1024	3,4-dehydro-exo-brevicomine <sup>##</sup>	88	Bridged bicyclo	62255-25-8	C9H14O2	1.3886	8958.9	530.40	6451.5	863.97	0.0357*
19	41,42,55	55	1449		RI1449 <sup>0)</sup>					0.6380	255.22	32.120	400.02	31.662	0.0079**
20	41,43,60	60	1642	n.d.	Butanoic acid, 3-methyl- <sup>†</sup>	96	Fatty acid	503-74-2	C5H10O2	1.5452	175.01	32.423	113.26	26.693	0.1321
21	105,77,120	105	1662	n.d.	Acetophenone <sup>†</sup>	96	Ketone	98-86-2	C8H8O	0.5489	119.65	15.353	218.01	25.385	0.0062**
22	45,61,140	61	1680	n.d.	2,3,5-Trithiahexane <sup>#</sup>	96	Disulfide	42474-44-2	C3H8S3	0.2300	7.8006	4.3366	33.917	5.2601	0.0006***

23	66,94,109	94	1964	n.d.	2-acetylpyrrole <sup>†</sup>	94	Pyrrole	1072-83-9	C6H7NO	0.6947	52.332	3.9980	75.329	4.8240	0.0028**
24	93,66,121	93	2184	1164	Formamide, N-phenyl- <sup>##</sup>	92	Amide	103-70-8	C7H7NO	0.5554	77.190	10.133	138.98	30.951	0.1145
										Relative value	Average	S.E.M.	Average	S.E.M.	p-value <sup>§)</sup>
Creatinine (mg/dL) <sup>§)</sup>										1.1995	72.88	3.932	60.76	4.912	0.0687

表1 尿中揮発性有機化合物の検出と、てんかん vs コントロールマウス間で差のある VOCs の同定

GC-MS（島津QP-2010ウルトラ，TQ-8040）を用いて解析したところ，両群のマウス尿中から135個の代謝物が特定された。代謝物の化学的構造としては，アルデヒド，ケトン，窒素化合物，テルペン，カルボン酸，アルコール，ベンゼン化合物，フラン，硫黄化合物などの多種類のものが含まれていた。表1に示すように，XCMSを用いた解析によって，両群のサンプルから得られた相異なるVOCのフラグメント・イオン  $m/z$  値から24個のVOCが特定された。次に，これら24個のVOCの各フラグメンテーションパターン内の最大の面積を持つVOCフラグメントイオン  $m/z$  値を2群間における面積の絶対値の比較のために選択し（表1の第3カラム），15個の潜在的なバイオマーカーを得た（ $p < 0.05$ ：表1の第16カラム，Mann Whitney  $U$ -test）。得られた化合物のうち，文献値及び既知化合物データベース中に該当するものが見あたらない未知化合物については，リテンション・インデックス（RI）番号を用いて表示した。