

SUPPLEMENTARY MATERIAL

Supplement TABLE 1: Device and sampling parameters

Carrier gas Ionisation	63Ni (95 MBq)
Column Ion separation Drift tube	330 V/cm, 0.12 m
Column temperature	40 °C
Detection mode	Positive
Drift flow	99,9 mL/min
MCC Flow	150 mL/min
Multi Capillary Column (MCC)	OV-5
Sample Flow	99,9 mL/min
Sampling duration	20 s
Synthetic air	20.5 ± 0.5% O2 in N2, purity ≥ 99,999 mol%)

Supplement TABLE 2: Characterization of relevant peaks originating from the differentiation between empty diapers (ED) and urine (U) **(A)**, empty diapers (ED) and stool (S) **(B)** and stool (S) and urine (U) **(C)**, respectively. Sensitivity, specificity, positive predictive values and negative predictive values and significance levels (after Mann-Whitney-U-test and after Bonferroni *post-hoc* analysis correction) are indicated. **(A)** The left table indicates the peaks assigned to urine as they are characterized by a higher signal intensity in urine than in empty diapers, the right side vice versa. **(B)** Peaks with a higher signal intensity in stool are shown on the left side, peaks with a higher signal intensity in empty diapers on the right side. **(C)** On the left, peaks assigned to stool are characterized, on the right side the peaks assigned to urine.

A Empty diapers – Urine

Signal U > ED	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P8	85	99,9	99,9	75	< 0.01	
P9	95	99,9	99,9	90	< 0.001	< 0.01
P10	70	99,9	99,9	60	< 0.05	
P11	99,9	78	90	99,9	< 0.001	
P12	75	99,9	99,9	64	< 0,05	
P14	90	89	95	80	< 0.001	< 0.05
P17	90	78	90	78	< 0.001	
P20	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P21	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P22	85	78	89	70	< 0.01	
P25	90	99,9	99,9	82	< 0.001	< 0.05
P28	90	99,9	99,9	82	< 0.001	
P30	85	56	81	63	< 0.05	
P33	80	78	89	64	< 0.05	
P37	99,9	33	77	99,9	< 0.01	
P38	99,9	67	87	99,9	< 0.001	
P42	85	78	89	70	< 0.01	
P43	95	89	95	89	< 0.001	< 0.05
P44	95	89	95	89	< 0.001	< 0.05

Signal ED > U	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P0	99,9	67	87	99,9	< 0.001	
P1	99,9	67	87	99,9	< 0.01	
P2	95	67	86	86	< 0.05	
P3	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P15	95	99,9	99,9	90	< 0.001	< 0.01
P16	80	89	94	67	< 0.01	
P19	90	99,9	99,9	82	< 0.001	< 0.05
P26	75	99,9	99,9	64	< 0.01	
P35	80	78	89	64	< 0.05	
P53	90	67	86	75	< 0.001	
P59	99,9	67	87	99,9	< 0.05	
P61	85	78	90	70	< 0.01	
P62	99,9	89	95	99,9	< 0.001	< 0.01
P74	85	78	90	70	< 0.001	
P85	85	56	81	63	< 0.05	
P86	95	67	86	86	< 0.001	
P88	95	67	86	86	< 0.01	
P89	95	99,9	99,9	90	< 0.001	< 0.05
P90	90	99,9	99,9	82	< 0.001	< 0.05

Signal U > ED	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P45	90	44	78	67	< 0.05	
P47	90	33	75	60	< 0.05	
P49	90	99,9	99,9	82	< 0.001	< 0.05
P50	95	67	86	86	< 0.001	< 0.05
P54	80	89	84	67	< 0.05	
P56	99,9	78	91	99,9	< 0.001	
P58	90	99,9	99,9	82	< 0.001	< 0.05
P60	85	78	89	70	< 0.01	
P65	65	99,9	99,9	56	< 0.05	
P68	90	89	95	80	< 0.001	
P80	75	89	94	62	< 0.05	
P82	85	67	85	67	< 0.01	
P83	90	89	95	80	< 0.001	
P87	99,9	33	77	99,9	< 0.05	
P92	95	99,9	99,9	90	< 0.001	< 0.01
P94	99,9	22	74	99,9	< 0.05	
P101	95	99,9	99,9	90	< 0.001	< 0.05
P103	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P107	85	89	94	73	< 0.01	
P109	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P121	70	99,9	99,9	60	< 0,05	
P128	95	56	83	83	< 0.01	
P137	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P139	90	89	95	80	< 0.001	< 0.05
P142	90	67	86	75	< 0.01	
P145	85	89	94	73	< 0.01	
P146	85	89	94	73	< 0.01	
P152	90	67	86	75	< 0.001	
P155	99,9	78	91	99,9	< 0.001	

Signal ED > U	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P98	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P102	80	67	85	60	< 0.05	
P104	90	67	86	75	< 0.05	
P108	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P113	95	99,9	99,9	90	< 0.001	< 0.01
P114	95	78	91	88	< 0.01	
P115	85	78	90	70	< 0.01	
P118	90	67	86	75	< 0.05	
P124	99,9	89	95	99,9	< 0.001	< 0.05
P125	99,9	89	95	99,9	< 0.001	< 0.05
P126	99,9	67	87	99,9	< 0.01	
P129	85	78	90	70	< 0.01	
P135	80	99,9	99,9	69	< 0.001	
P136	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01
P138	90	78	90	78	< 0.01	
P148	95	33	76	75	< 0.05	
P149	99,9	67	87	99,9	< 0.001	< 0.05
P151	95	89	95	89	< 0.001	< 0.05
P150	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.01

B Empty diapers – Stool

Signal S > ED	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P6	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P7	90	99,9	99,9	90	< 0.001	
P8	99,9	89	91	99,9	< 0.001	
P9	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P10	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P11	99,9	78	83	99,9	< 0.001	
P12	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P13	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P14	99,9	78	83	99,9	< 0.001	
P17	90	89	90	89	< 0.001	
P20	99,9	89	91	99,9	< 0.001	
P21	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P22	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P23	99,9	89	91	99,9	< 0.001	
P24	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P25	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P28	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P30	90	99,9	99,9	90	< 0.001	
P32	70	99,9	99,9	75	< 0.05	
P33	90	78	82	88	< 0.01	
P34	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P36	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P37	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P38	99,9	78	83	99,9	< 0.001	
P39	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P40	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P41	80	99,9	99,9	82	< 0.05	

Signal ED > S	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P0	90	89	90	89	< 0.01	
P3	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P15	90	99,9	99,9	90	< 0.001	
P18	90	67	75	86	< 0.05	
P19	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P26	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P62	70	89	88	73	< 0.05	
P86	60	99,9	99,9	69	< 0.05	
P88	70	99,9	99,9	75	< 0.01	
P89	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P90	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P95	90	67	75	86	< 0.05	
P98	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P100	70	99,9	99,9	75	< 0.01	
P108	90	99,9	99,9	90	< 0.001	
P113	60	99,9	99,9	69	< 0.05	
P115	90	78	82	88	< 0.01	
P124	80	99,9	99,9	82	< 0.001	
P136	70	99,9	99,9	75	< 0.01	
P149	90	89	90	89	< 0.001	
P150	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P151	99,9	89	91	99,9	< 0.001	

Signal S > ED	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P42	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P43	90	67	75	86	< 0.05	
P44	90	67	75	86	< 0.05	
P45	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P46	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P47	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P48	80	89	89	80	< 0.05	
P49	90	99,9	99,9	90	< 0.001	
P50	90	99,9	99,9	90	< 0.001	
P51	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P55	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P56	99,9	78	83	99,9	< 0.001	
P58	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P60	99,9	78	83	99,9	< 0.001	
P63	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P64	90	78	82	88	< 0.01	
P65	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P68	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P69	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P70	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P71	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P80	99,9	89	91	99,9	< 0.001	
P81	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P82	99,9	89	91	99,9	< 0.001	
P83	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P91	90	89	90	89	< 0.01	
P92	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P97	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P99	90	67	75	86	< 0.01	
P101	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P103	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P106	80	89	89	80	< 0.05	

Signal ED > S	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
------------------	-------------	-------------	------------	------------	-----------------------	------------

Signal S > ED	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P107	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P109	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P110	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P111	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P112	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P116	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P120	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P121	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P127	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P128	80	99,9	99,9	82	< 0.01	
P131	80	89	89	80	< 0.05	
P133	80	99,9	99,9	82	< 0.05	
P134	90	89	90	89	< 0.01	
P137	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P139	99,9	78	83	99,9	< 0.001	
P141	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P142	90	99,9	99,9	90	< 0.001	
P144	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P145	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P146	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P147	80	89	89	80	< 0.05	
P152	90	99,9	99,9	90	< 0.01	
P153	99,9	99,9	99,9	99,9	< 0.001	< 0.05
P155	99,9	78	83	99,9	< 0.001	
P156	70	99,9	99,9	75	< 0.05	
P157	70	99,9	99,9	75	< 0.05	

Signal ED > S	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
------------------	-------------	-------------	------------	------------	-----------------------	------------

C Stool – Urine

Signal S > U	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P1	60	95	86	83	< 0.05	
P3	50	95	83	79	< 0.05	
P7	40	99,9	99,9	77	< 0.05	
P8	50	95	83	79	< 0.05	
P9	70	85	70	85	< 0.05	
P13	20	99,9	99,9	71	< 0.05	
P16	90	80	69	94	< 0.01	
P25	50	90	71	78	< 0.05	
P31	60	90	75	82	< 0.05	
P35	60	95	86	83	< 0.05	
P36	70	85	70	85	< 0.05	
P41	70	85	70	85	< 0.05	
P42	80	75	62	88	< 0.05	
P46	50	95	83	79	< 0.05	
P49	80	95	89	90	< 0.01	
P50	40	99,9	99,9	77	< 0.05	
P51	40	99,9	99,9	77	< 0.05	
P52	50	99,9	99,9	80	< 0.05	
P53	99,9	60	56	99,9	< 0.05	
P55	50	99,9	99,9	80	< 0.05	
P61	70	80	64	84	< 0.05	
P64	60	95	86	83	< 0.01	
P65	50	99,9	99,9	80	< 0.05	
P68	50	99,9	99,9	80	< 0.01	
P71	60	90	75	82	< 0.05	
P74	40	90	67	75	< 0.05	
P77	70	80	64	84	< 0.05	

Signal U > S	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P18	60	95	86	83	< 0.01	
P95	60	95	86	83	< 0.01	

Signal S > U	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
P78	70	80	64	84	< 0.05	
P79	50	95	83	79	< 0.05	
P80	50	95	83	79	< 0.05	
P81	60	90	75	82	< 0.05	
P83	60	99,9	99,9	83	< 0.05	
P91	20	99,9	99,9	71	< 0.05	
P96	40	95	80	76	< 0.05	
P99	90	80	69	94	< 0.001	
P104	50	95	83	79	< 0.05	
P107	40	99,9	99,9	77	< 0.05	
P111	50	95	83	79	< 0.05	
P118	40	99,9	99,9	77	< 0.01	
P120	60	90	75	82	< 0.05	
P122	60	95	86	83	< 0.05	
P123	30	99,9	99,9	74	< 0.05	
P125	30	99,9	99,9	74	< 0.05	
P126	50	95	83	79	< 0.05	
P130	60	95	86	83	< 0.05	
P131	50	95	83	79	< 0.05	
P133	80	80	67	89	< 0.01	
P135	70	80	64	84	< 0.05	
P138	40	95	80	76	< 0.05	
P148	50	85	63	77	< 0.05	
P150	60	85	67	81	< 0.05	
P152	70	85	70	85	< 0.01	
P156	70	75	58	83	< 0.05	

Signal U > S	Sens [%]	Spec [%]	PPV [%]	NPV [%]	Significance level	Bonferroni
-----------------	-------------	-------------	------------	------------	-----------------------	------------

Supplement TABLE 3: Peaks were characterized by their specific combination of position retention time (RT) per second and drift time (corresponding 1/K0-value)

Name	1/K0	RT	RT radius
P0	0,761	105,5	8,7
P1	0,761	134,5	10,1
P2	0,775	56,5	5,6
P3	0,758	57,0	5,6
P4	0,728	56,5	5,6
P5	0,686	17,0	3,0
P6	0,652	9,0	2,5
P7	0,628	13,5	2,8
P8	0,635	21,5	3,2
P9	0,620	25,0	3,4
P10	0,576	34,5	3,8
P11	0,549	46,5	4,8
P12	0,569	6,0	2,3
P13	0,538	6,0	2,5
P14	0,493	4,5	2,3
P15	0,450	3,0	2,0
P16	0,706	27,1	3,7
P17	0,567	16,6	3,1
P18	0,506	1,5	2,1
P19	0,534	1,5	2,1
P20	0,513	82,0	6,6
P21	0,529	53,0	5,1
P22	0,589	39,5	4,4
P23	0,584	12,5	2,6
P24	0,605	11,5	2,9
P25	0,480	0,5	2,0

P26	0,555	1,0	2,1
P27	0,579	24,5	3,3
P28	0,531	9,5	2,5
P29	0,695	33,0	4,0
P30	0,683	27,5	3,6
P31	0,720	27,5	3,6
P32	0,590	20,5	3,3
P33	0,589	16,0	2,9
P34	0,590	11,0	2,6
P35	0,723	21,5	3,2
P36	0,782	27,0	3,6
P37	0,577	70,5	6,2
P38	0,549	83,0	6,6
P39	0,591	7,0	2,4
P40	0,577	11,5	2,6
P41	0,771	45,0	4,7
P42	0,677	33,0	4,2
P43	0,513	12,5	2,9
P44	0,513	12,5	2,8
P45	0,598	41,5	4,8
P46	0,621	7,0	2,5
P47	0,603	45,5	4,8
P48	0,665	13,5	2,7
P49	0,627	27,5	3,6
P50	0,619	34,0	4,3
P51	0,618	59,7	5,6
P52	0,604	260,6	17,7
P53	0,748	225,7	15,6
P54	0,887	112,4	8,4
P55	0,618	126,7	9,7
P56	0,550	30,5	3,7

P57	0,509	7,0	2,5
P58	0,563	18,0	3,1
P59	0,733	57,0	5,4
P60	0,581	39,5	4,4
P61	0,885	32,0	3,7
P62	0,731	132,0	9,7
P63	0,652	27,5	3,7
P64	0,695	25,0	3,6
P65	0,614	19,5	3,0
P66	0,652	3,0	2,1
P67	0,686	4,0	2,2
P68	0,632	27,0	3,6
P69	0,753	32,5	3,9
P70	0,753	32,5	3,9
P71	0,625	57,0	5,3
P72	0,609	4,5	2,3
P73	0,584	4,0	2,2
P74	0,710	4,5	2,2
P75	0,629	3,5	2,1
P76	0,624	3,5	2,1
P77	0,642	53,0	5,1
P78	0,642	53,0	5,1
P79	0,739	20,5	3,1
P80	0,767	32,5	3,8
P81	0,757	26,5	3,4
P82	0,568	9,5	2,7
P83	0,551	6,5	2,4
P84	0,716	10,5	2,6
P85	0,854	43,5	4,5
P86	0,792	57,5	5,4
P87	0,724	57,5	5,3

P88	1,089	32,8	4,0
P89	0,576	1,5	2,1
P90	0,601	1,5	2,1
P91	0,578	7,0	2,4
P92	0,620	27,7	3,7
P93	0,681	7,6	2,4
P94	0,720	50,1	5,0
P95	0,504	1,0	2,0
P96	0,762	11,6	2,7
P97	0,608	8,5	2,4
P98	0,741	57,6	5,3
P99	0,710	33,0	4,0
P99,9	0,515	4,5	2,3
P101	0,533	14,5	3,0
P102	0,904	45,3	4,7
P103	0,546	21,0	3,3
P104	0,788	49,0	4,9
P105	0,523	4,0	2,2
P106	0,601	18,5	3,0
P107	0,544	7,0	2,4
P108	0,450	20,5	3,5
P109	0,530	38,5	4,2
P110	0,646	13,5	2,8
P111	0,719	18,0	3,0
P112	0,652	6,5	2,4
P113	0,743	133,5	9,5
P114	0,785	158,5	11,4
P115	1,035	158,0	11,3
P116	0,798	13,5	2,6
P117	0,873	33,0	3,8
P118	0,698	131,0	9,8

P119	0,731	159,0	11,4
P120	0,610	37,5	4,3
P121	0,630	18,5	3,0
P122	0,901	30,5	3,8
P123	0,745	6,5	2,4
P124	0,448	11,0	2,8
P125	0,797	8,0	2,4
P126	0,903	7,5	2,3
P127	0,665	7,5	2,6
P128	0,573	46,0	4,8
P129	0,999	28,0	3,8
P130	0,716	157,8	11,4
P131	0,644	83,6	6,9
P132	0,687	34,0	3,9
P133	0,764	21,0	3,2
P134	0,664	34,0	3,9
P135	0,761	6,0	2,3
P136	0,760	2,0	2,1
P137	0,533	47,5	4,6
P138	0,827	24,1	3,5
P139	0,491	5,5	2,4
P140	0,727	57,0	5,4
P141	0,593	8,5	2,5
P142	0,566	13,0	2,7
P143	0,576	2,0	2,1
P144	0,653	10,5	2,6
P145	0,612	14,0	2,7
P146	0,550	11,0	2,5
P147	0,603	22,5	3,3
P148	0,710	8,0	2,5
P149	0,756	104,0	8,6

P150	0,747	56,5	5,5
P151	0,944	56,5	5,3
P152	0,637	29,5	3,7
P153	0,533	4,5	2,2
P154	0,575	23,0	3,2
P155	0,555	45,5	4,6
P156	0,579	4,5	2,3
P157	0,584	7,0	2,4

Supplement TABLE 4: Peaks P9, P17, P32, P43, P52, P91 and P156 were assigned to substances using BS-MCC/IMS-analyses database.

		Empty diaper - Stool	Empty diaper - Urine	Stool - Urine	Assigned substance
P9	Best direction	Stool > Empty diaper	Urine > Empty diaper	Stool > Urine	2-pentylfuran
	Significance level	p < 0.05 after Bonf. Corr.	p < 0.01 after Bonf. Corr.	p < 0.05	
P17	Best direction	Stool > Empty diaper	Urine > Empty diaper	-	butane-2,3-diol
	Significance level	p < 0.001	p < 0.001	-	
P32	Best direction	Stool > Empty diaper	-	-	benzonitrile
	Significance level	p < 0.05	-	-	
P43	Best direction	Stool > Empty diaper	Urine > Empty diaper	-	1,4-xylene
	Significance level	p < 0.05	p < 0.05 after Bonf. Corr.	-	
P52	Best direction	-	-	Stool > Urine	5-methyl-2,1-methylethylcyclohexanol
	Significance level	-	-	p < 0.05	
P91	Best direction	Stool > Empty diaper	-	Stool > Urine	2-hexanone
	Significance level	p < 0.01	-	p < 0.05	
P156	Best direction	Stool > Empty diaper	-	Stool > Urine	butanal
	Significance level	p < 0.05	-	p < 0.05	

