

Supplementary Information

Human Fetal Exposure to Triclocarban and Triclosan in an Urban Population from Brooklyn, NY

Benny F.G. Pycke, Laura A. Geer², Mudar Dalloul³, Ovadia Abulafia³, Alizee Jenck¹, and Rolf U. Halden^{1,*}

¹ Center for Environmental Security, The Biodesign Institute, Arizona State University, 781 E. Terrace Rd., Tempe, AZ 85287 USA, USA

² Department of Environmental and Occupational Health Sciences, State University of New York, Downstate School of Public Health, BOX 43, 450 Clarkson Ave., Brooklyn, NY, USA

³ Department of Obstetrics and Gynecology, State University of New York Downstate Medical Center, 445 Lenox Road, Brooklyn, NY, USA

Journal: *Environmental Science & Technology*

Pages: 9

Tables: 4

* Correspondence: Email : halden@asu.edu

Tel : (480) 727-0893

Mail : 781 E Terrace Rd; Tempe, AZ 85287

Table S1. Descriptive statistics of the study population ($n = 190$). Adapted from Geer et al., 2012.⁴⁹

Maternal characteristics	N (Percentage)
Country of birth	
U.S.	92 (48.4)
Outside of U.S.	98 (51.6)
Race/ethnic origin	
African American	81 (42.6)
Caribbean or West Indian	78 (41.1)
African, from the African continent	12 (6.3)
Latino/Hispanic	15 (7.9)
Other	4 (2.1)
Age (years)	
24	69 (36.3)
25-29	50 (26.3)
30-34	44 (23.2)
35	27 (14.2)
Years education	
Some high school or less	48 (25.3)
High school degree	59 (31.0)
Technical school, some college or more	83 (43.7)

Table S2. Overview of the values for compound-specific LC and MS/MS parameters.

Analyte	Transition (Confirmation Ion)	DP (V)	CE (V)	CXP (V)	RT (min)	Dwell Time (ms)
Triclosan	289>35 (¹³ C ₁₂ TCS)	-60	-34	-3	8.07	50
¹³ C ₁₂ Triclosan	301>35 (NA)	-60	-34	-3	8.07	50
Triclocarban	313>160 (¹³ C ₁₃ TCC)	-80	-18	-9	7.86	50
¹³ C ₁₃ Triclocarban	326>166 (NA)	-80	-18	-9	7.86	50
2'-OH-Triclocarban^a	329>168 (142)	-50 (-50)	-22 (-30)	-6 (-6)	7.75	50
3'-OH-Triclocarban^a	329>168 (142)	-55 (-55)	-15 (-30)	-5 (-3)	7.15	50
3'-Cl-Triclocarban	349>160 (162)	-60 (-60)	-30 (-25)	-5 (-5)	8.28	50
4-Methylumbelliferone	175>133 (¹³ C ₄ MUF)	-75	-32	-5	4.92	50
¹³ C ₄ - 4-Methylumbelliferone	179>135 (NA)	-80	-30	-5	4.92	50

CE: Collision energy; CXP: Collision cell exit potential; DP: Declustering potential; NA: Not applicable; RT: Retention time

^a Presumed sites of fragmentation are identified in reference.⁵⁰

Table S3. Method performance characteristics for analytes quantified by LC-MS/MS. Results of the spike-recovery experiments are presented as absolute recoveries for urine and plasma.

Analyte	Standard Curve ($\mu\text{g/L}$)	LOD ($\mu\text{g/L}$)	LOQ ($\mu\text{g/L}$)	MDL Urine ($\mu\text{g/L}$)	MDL Plasma ($\mu\text{g/L}$)	Accuracy \pm Precision Urine (%) 0.5 $\mu\text{g/L}$ Spike	Accuracy \pm Precision Plasma (%) 0.5 $\mu\text{g/L}$ Spike	Spike-Rec. Urine (%)		Spike-Rec. Plasma (%)	
								0.1 $\mu\text{g/L}$	0.5 $\mu\text{g/L}$	0.5 $\mu\text{g/L}$	5 $\mu\text{g/L}$
								*Triclosan	0.025-5.00	0.025	0.085
*Triclocarban	0.005-5.00	0.006	0.020	0.021	0.173	87 \pm 5	109 \pm 5	90 \pm 9	95 \pm 8	96 \pm 12	116 \pm 4
2'-OH-Triclocarban	0.025-25	0.004	0.014	0.012	0.108	63 \pm 5	103 \pm 8	103 \pm 5	100 \pm 8	69 \pm 7	73 \pm 8
3'-OH-Triclocarban	0.005-25	0.009	0.030	0.007	0.121	71 \pm 5	107 \pm 6	107 \pm 5	114 \pm 8	66 \pm 7	70 \pm 6
3'-Cl-Triclocarban	0.005-25	0.009	0.030	0.007	0.127	81 \pm 7	118 \pm 8	115 \pm 9	119 \pm 10	67 \pm 7	73 \pm 7
*4-Methylumbelliferone	0.05-25	0.003	0.010	0.052	0.352	95 \pm 3	130 \pm 5	68 \pm 16	54 \pm 3	60 \pm 25	132 \pm 4

*Isotope-dilution mass spectrometry available. LOD = Instrument Detection Limit, LOQ = Instrumental Quantification Limit, MDL: Method

Detection Limit, Rec.: Recovery.

Table S4. The total (Σ -) concentrations of TCS, TCC, 2'-OH-TCC, 3'-OH-TCC, 3'-Cl-TCC measured in maternal urine and cord blood plasma from 181 mother-child pairs in an urban population.

Subject	Total (Σ -) Concentrations ($\mu\text{g/L}$)										
	Maternal Urine						Cord Blood Plasma				
	Creatinine (g/L)	TCS	TCC	2'-OH-TCC	3'-OH-TCC	3'-Cl-TCC	TCS	TCC	2'-OH-TCC	3'-OH-TCC	3'-Cl-TCC
00001	1.12	44.93	0.14	0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00002	0.86	6.00	0.06	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00003	1.07	8.09	0.18	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00004	1.88	11.94	0.98	0.04	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00005	1.25	44.13	0.69	0.05	0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00006	0.94	180.62	0.13	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00007	1.57	491.54	0.08	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00008	1.54	1.57	2.72	0.35	0.09	0.01	2.15	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00009	0.84	13.69	0.04	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00010	2.19	48.98	0.90	0.08	0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00011	0.85	0.90	0.39	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	0.28	<0.11	<0.12	<0.13
00012	0.14	76.06	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00013	-	1.86	0.03	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00014	2.66	11,909.30	0.35	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00015	0.33	0.63	0.03	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00016	0.91	0.88	43.16	1.01	0.18	0.08	-	-	-	-	-
00017	1.82	1.11	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00018	0.75	255.65	0.48	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00019	2.96	64.84	0.18	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00020	0.73	4.67	0.48	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00021	0.75	2.02	0.15	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00022	1.23	1.10	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00023	0.29	13.91	0.12	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00024	2.96	1.39	0.28	0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00025	1.67	22.31	0.38	0.02	<0.01	0.01	1.74	1.17	<0.11	<0.12	<0.13
00026	1.27	18.60	77.41	3.36	0.49	0.32	-	-	-	-	-
00027	0.47	3.74	0.04	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00028	2.93	1,107.92	0.05	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00029	0.36	34.07	0.60	<0.01	<0.01	<0.01	13.75	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00030	-	37.24	0.16	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00031	0.63	304.57	0.06	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00032	1.20	1.21	0.06	<0.01	<0.01	<0.01	13.62	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13

00033	1.54	32.05	0.28	0.05	0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00034	2.27	14.28	0.03	<0.01	<0.01	0.01	-	-	-	-	-
00035	1.23	29.08	0.32	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00036	0.25	0.16	0.16	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00037	1.59	9.99	1.53	0.12	0.02	0.01	-	-	-	-	-
00038	1.23	17.63	7.59	1.68	0.15	0.06	-	-	-	-	-
00039	1.13	7.56	1.20	0.12	0.04	0.01	-	-	-	-	-
00040	1.67	277.75	17.74	0.31	0.07	0.06	-	-	-	-	-
00041	1.46	56.75	<0.02	0.02	<0.01	0.04	-	-	-	-	-
00042	2.40	9.16	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00043	0.82	27.20	16.52	0.56	0.07	0.03	-	-	-	-	-
00044	2.42	76.82	0.37	0.04	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00045	1.57	3.67	<0.02	0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00046	0.82	598.44	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00047	3.73	2,277.10	16.83	2.31	0.24	0.08	-	-	-	-	-
00048	1.60	71.09	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00049	1.45	12.27	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00050	1.89	3.77	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00051	2.17	2.71	1.72	0.09	0.02	0.02	-	-	-	-	-
00052	-	1.82	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00053	1.32	19.53	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00054	1.18	12.25	0.21	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00055	1.89	5.71	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00056	1.05	59.83	1.05	0.09	0.03	0.01	-	-	-	-	-
00057	1.78	2.02	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00058	2.09	138.09	<0.02	0.11	0.02	<0.01	-	-	-	-	-
00059	1.94	756.90	1.10	0.08	0.02	0.01	3.81	0.25	<0.11	<0.12	<0.13
00060	-	72.44	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00061	1.09	0.55	0.99	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00062	0.82	2.03	1.56	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00063	2.05	50.68	28.15	3.83	0.46	0.15	-	-	-	-	-
00064	0.92	9.40	0.40	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00065	1.43	2.57	9.65	0.37	0.05	<0.01	-	-	-	-	-
00066	1.68	3.61	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00067	0.99	0.22	0.08	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00068	2.08	10.59	6.83	0.37	0.04	<0.01	-	-	-	-	-
00069	2.30	17.15	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	13.88	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00070	1.31	287.47	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	47.55	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00071	-	70.10	0.33	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00072	2.18	11.85	0.15	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-

00073	2.54	6.36	4.71	0.02	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00074	1.33	1.43	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00075	1.58	10.89	0.70	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00076	1.65	12.70	0.31	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00077	0.36	2.15	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00078	1.78	5.32	0.29	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00079	0.38	83.13	0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00080	2.71	1.97	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00081	1.79	8.76	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00082	2.35	18.69	34.65	35.01	4.88	0.93	-	-	-	-	-
00083	0.66	5.84	17.24	0.54	0.09	0.05	-	-	-	-	-
00084	1.58	13.56	5.66	0.82	0.02	<0.01	-	-	-	-	-
00085	1.62	13.54	0.12	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00086a	2.75	9.88	0.10	<0.01	<0.01	<0.01	0.54	0.45	<0.11	<0.12	<0.13
00086b	-	-	-	-	-	-	<0.53	0.93	<0.11	<0.12	<0.13
00087	1.40	2.81	0.16	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00088	2.23	14.14	0.99	0.03	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00089	-	7.37	0.48	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00090	1.94	1.73	3.65	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00091	1.50	45.50	101.70	19.31	2.61	1.53	-	-	-	-	-
00092	2.71	4.32	0.15	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00093	0.43	0.59	3.33	0.19	0.04	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00094	-	1.17	5.47	0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00095	1.09	38.88	2.72	0.13	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00096	1.81	2.75	30.40	1.73	0.26	0.10	-	-	-	-	-
00097	0.86	6.21	0.21	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00098	2.79	5.39	47.68	0.82	<0.01	0.01	-	-	-	-	-
00099	2.19	321.90	0.04	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00100	1.85	691.72	0.34	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00101	-	9.06	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00102	2.14	3.99	0.36	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00103	3.13	4.15	1.19	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	0.16	<0.11	<0.12	<0.13
00104	1.74	626.42	0.13	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00105	1.73	5.24	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00106	0.82	146.88	0.11	<0.01	<0.01	<0.01	127.60	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00107	1.38	7.95	16.00	0.45	0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00108	0.95	36.71	0.04	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00109	2.19	610.21	0.72	<0.01	<0.01	<0.01	22.61	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00110	0.43	2.01	0.06	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00111	1.33	26.19	0.39	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-

00112	1.75	5.14	14.36	0.10	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00113	1.69	0.96	0.40	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00114	1.58	34.60	0.70	0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00115	1.68	0.94	0.99	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	<0.11	<0.12	<0.13
00116	0.79	170.37	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00117	0.84	22.06	0.15	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00118	0.65	0.82	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00119	1.44	28.02	0.13	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00120	0.90	39.08	0.06	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00121	3.79	6.03	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00122	1.83	850.04	0.41	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00123	1.68	226.60	9.10	0.24	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00124	0.86	16.86	0.30	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00125	1.14	10.66	0.45	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00126	1.57	0.49	42.38	6.88	1.12	0.36	<0.53	1.08	<0.11	<0.12	<0.13
00127	-	1.21	0.16	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00128	0.69	250.82	0.11	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00129	-	7.67	0.16	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00130	0.74	171.18	0.08	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00131	1.70	1,156.00	0.32	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00132	1.39	1.66	4.16	0.12	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00133	2.54	10.26	3.89	0.09	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00134	2.93	2,271.11	0.61	0.31	0.06	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00135	3.08	3.48	0.27	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00136	2.85	7.24	0.65	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00137	1.66	1.77	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00138	2.73	174.98	0.05	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00139	2.34	2.80	0.47	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00140	1.03	0.75	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00141	1.98	50.62	0.03	<0.01	4.00	<0.01	-	-	-	-	-
00142	1.97	2.35	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00143	0.63	1.07	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00144	2.98	53.20	0.53	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00145	2.77	36.82	0.07	<0.01	<0.01	<0.01	1.89	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00146	1.08	9.32	0.04	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00147	-	2.34	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00148	0.22	2.15	0.03	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00149	0.88	11.66	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00150	1.39	2.00	2.26	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00151	1.93	7.39	0.58	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-

00152	3.28	41.66	0.19	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00153	1.77	1.57	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00154	0.89	2.90	0.64	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00155	3.38	1.71	0.35	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00156a	2.32	26.90	107.00	4.73	0.80	0.90	<0.53	0.43	<0.11	<0.12	<0.13
00156b	-	-	-	-	-	-	4.35	0.26	<0.11	<0.12	<0.13
00157	0.65	455.27	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00158	2.21	3.27	1.29	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00159	2.05	14.30	0.18	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00160	0.37	3.59	0.15	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00161	0.84	3.16	0.47	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00162	2.58	29.43	0.09	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00163	0.82	116.28	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00164	0.80	4.66	0.05	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00165	0.20	3.06	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	0.34	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00166	0.74	24.36	2.34	0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00167	2.51	31.60	0.28	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00168	3.51	509.28	0.51	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00169	1.38	3.69	0.05	<0.01	<0.01	<0.01	1.89	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00170	2.67	5.08	0.44	<0.01	<0.01	<0.01	12.54	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00171	1.88	5.84	1.48	0.03	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00172	0.64	1.17	0.05	<0.01	<0.01	<0.01	0.79	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00173	2.55	7.90	0.58	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00174	-	1.48	0.31	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00175	-	2.16	1.87	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00176	-	2.25	0.21	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00177	1.24	3.57	<0.02	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00178	1.40	6.09	0.02	<0.01	<0.01	<0.01	<0.53	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13
00179	1.13	1.48	0.48	<0.01	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00180	1.15	4.55	2.47	0.08	<0.01	<0.01	-	-	-	-	-
00181	1.01	3.88	0.02	<0.01	<0.01	<0.01	6.63	<0.17	<0.11	<0.12	<0.13

- : Not determined.