



**TURUN
YLIOPISTO**

Matemaattis-luonnontieteellinen
tiedekunta

Kosmetiikassa esiintyvien PFAS-yhdisteiden käyttötarkoitukset ja analyysi

Lilja Palomäki

Luonnonyhdistekemia

LuK-tutkielma

Laajuus: 6 op

28.05.2026

Turku

Turun yliopiston laatujärjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu

Turnitin OriginalityCheck -järjestelmällä.

LuK-tutkielma

Pääaine: Kemia

Tekijä(t): Lilja Palomäki

Otsikko: Kosmetiikassa esiintyvien PFAS-yhdisteiden käyttötarkoitukset ja analysointi

Ohjaaja(t): Maarit Karonen ja Juha-Pekka Salminen

Sivumäärä: 16

Päivämäärä: 28.05.2026

Per- ja polyfluoroalkyyliaineet (PFAS) ovat synteettisiä yhdisteitä, joiden kemialliset ominaisuudet perustuvat vahvaan hiili–fluori-sidokseen ja amfiifiliseen rakenteeseen. Näiden ominaisuuksien ansiosta ne ovat poikkeuksellisen stabiileja sekä vettä ja rasvaa hylkiviä, minkä vuoksi niitä käytetään kosmetiikassa parantamaan tuotteiden kestävyyttä, levittyvyyttä ja aistinvaraisia ominaisuuksia. Tämän tutkielman tavoitteena oli tarkastella PFAS-yhdisteiden rakennetta, käyttöä kosmetiikassa sekä niihin liittyviä altistumis- ja analytiikkakysymyksiä.

Tutkielma toteutettiin kirjallisuuskatsauksena, jossa analysoitiin ajankohtaista tutkimustietoa PFAS-yhdisteistä. Tarkastelussa korostettiin eroja polymeeristen ja pienimolekyylisten yhdisteiden välillä sekä niiden merkitystä kosmetiikan toiminnallisuudelle ja altistumiselle.

Tutkielmassa analysoinnin osalta tarkastellaan esikäsittelymenetelmiä, kuten kiinteän faasin mikrouuttoa (SPME) ja automatisoitua mikrokiinteäfaasiuttoa (μ SPE). Yhdisteiden tarkassa tunnistamisessa ja mittaamisessa keskitytään kirjallisuudessa esitettyyn LC-MS/MS-analytiikkaan ja kokonaisfluorin määrittämiseen.

Tulokset osoittavat, että PFAS-yhdisteet ovat keskeisiä erityisesti pitkäkestoisissa ja vedenkestävissä kosmetiikkatuotteissa. Altistumista tapahtuu useiden reittien kautta, ja yhdisteiden pysyvyys voi johtaa niiden kertymiseen elimistöön. Lisäksi havaittiin, että PFAS-yhdisteiden analysointi on haastavaa, koska yksittäisiin yhdisteisiin kohdistuvat menetelmät eivät kata koko fluorisisältöä.

Johtopäätöksenä PFAS-yhdisteet muodostavat kosmetiikassa merkittävän hyöty–riski-kokonaisuuden, jonka arviointi edellyttää sekä kemiallisen että analyttisen näkökulman huomioimista.

Avainsanat: kosmetiikka, kokonaisfluori, LC-MS/MS, perfluorodekaliini, PFAS-yhdisteet, PTFE

Sisällysluettelo:

Lyhenteet
1 Johdanto.....	1
2 PFAS-yhdisteiden kemiallinen rakenne	2
2.1 PFAS-yhdisteiden toiminnalliset ominaisuudet ja käyttö kosmetiikassa.....	4
2.2 PTFE ja perfluorodekaliini kosmetiikan ainesosina	5
3 PFAS-yhdisteisiin liittyvä altistuminen ja terveydellinen merkitys	7
4 PFAS-yhdisteiden analysointi kosmetiikkamatriisissa	9
4.1 Näytteenkäsittelymenetelmät: liuotinuutto, SPME ja μSPE	10
4.2 LC-MS/MS yksittäisten yhdisteiden määrittämisessä.....	11
4.3 Kokonaisfluorin analytiikka PFAS-indikaattorina	14
5 Johtopäätökset.....	15
6 Lähteet	17

Lyhenteet

AOF	Adsorboituva orgaaninen fluori (engl. Adsorbable organic fluorine)
CH₃OH	Metanoli
EDC	Hormonitoimintaa häiritsevä aine (engl. Endocrine-disrupting chemical)
ESI	Sähkösumutus-ionisaatio (engl. Electrospray ionization)
GC-MS	Kaasukromatografia–massaspektrometria
GenX	Heksafluoripropyleenioksidi dimeerihapon kaupallinen nimi
HFPO-DA	Heksafluoripropyleenioksidi dimeerihappo
HRMS	Korkean erotuskyvyn massaspektrometria (engl. High-resolution mass spectrometry)
LC-MS/MS	Nestekromatografia–tandemmassaspektrometria
m/z	Massa-varaussuhde
MRM	Monivaiheinen reaktio seuranta (engl. Multiple Reaction Monitoring)
NTA	Kohdentamaton analyysi (engl. Non-targeted analysis)
PAP	Polyfluoratut fosfaattiesterit (engl. Polyfluoroalkyl phosphate esters)
PFAS	Per- ja polyfluoratut alkyyliyhdisteet (engl. Per- and polyfluoroalkyl substances)
PFBA	Perfluoributaanihappo.
PFBS	Perfluoributaanisulfonaatti
PFHxA	Perfluoriheksaanihappo.
PFNA	Perfluorinonaanihappo.
PFOA	Perfluorioktaanihappo
PFOS	Perfluorioktaanisulfonaatti
PFOSA	Perfluori-oktaanisulfonamidi
PTFE	Polytetrafluorieteeni
SPME	Kiinteän faasin mikrouutto (engl. Solid-phase microextraction)

SRM	Valikoitu reaktio seuranta (engl. Selected Reaction Monitoring)
TF	Kokonaisfluori (engl. Total fluorine)
TOP	Kokonais hapetettavissa olevien esiasteiden määrittäminen (engl. Total oxidizable precursor assay).
μSPE	Automatisoitu mikrokiinteäfaasiuutto

1 Johdanto

Per- ja polyfluoratut alkyyliyhdisteet (PFAS) ovat synteettisiä orgaanisia yhdisteitä, joiden ominaisuudet perustuvat vahvaan hiili–fluori-sidokseen (C–F) (Namazkar ym., 2024). Tämä rakenne tekee yhdisteistä kemiallisesti erittäin stabiileja sekä vettä ja rasvaa hylkiviä, minkä vuoksi niitä kutsutaan usein ”ikuisuuskemikaaleiksi” (Zhao ym., 2026). Rakenteellisesti monet PFAS-yhdisteet ovat amfiifiilisiä, sisältäen fluorattuun hiiliketjuun yhdistyneen hydrofiilisen funktionaalisen ryhmän, mikä mahdollistaa niiden tehokkaan toiminnan erilaisissa rajapinnoissa (Jane L Espartero ym., 2022).

Kosmetiikassa PFAS-yhdisteitä hyödynnetään erityisesti tuotteiden teknisen suorituskyvyn parantamiseen. Ne parantavat levittyvyyttä, vedenkestävyyttä ja pitkäkestoisuutta sekä vaikuttavat tuotteiden rakenteeseen ja ihotuntumaan (Harris ym., 2022; Olomukoro ym., 2026). Ne voivat toimia esimerkiksi emulgaattoreina, pinta-aktiivisina aineina ja kalvonmuodostajina. Kosmetiikassa käytettävät PFAS-yhdisteet voivat olla joko polymeerisiä tai pienimolekyylisiä: esimerkiksi polytetrafluorieteeniä (PTFE) käytetään täyteaineena ja liukuvuuden parantajana, kun taas perfluorodekaliini toimii kaasujen kuljettajana (Céline ym., 2024; Le Bris ym., 2017).

PFAS-yhdisteiden käyttöön liittyy kuitenkin altistumisriskejä. Kosmetiikan kautta altistuminen tapahtuu pääasiassa ihokosketuksen kautta, mutta myös silmien ja suun alueella käytettävät tuotteet voivat johtaa yhdisteiden päätymiseen elimistöön (Abraham & Monien, 2022; Harris ym., 2022). Altistumisen on havaittu liittyvän muun muassa hormonitoiminnan ja aineenvaihdunnan häiriöihin (Sheinhaus & Gore, 2024; Zhang ym., 2024).

Luotettava altistumisen ja terveystarkkailun arviointi edellyttää kehittyneitä analyysimenetelmiä, jotta kosmetiikkatuotteista voidaan havaita erittäin pienetkin pitoisuudet (Abraham & Monien, 2022). Haastetta lisää se, että monet kosmetiikan sisältämät PFAS-yhdisteet päätyvät tuotteisiin ilmoittamattomina epäpuhtauksina tai hajoamistuotteina, joita ei ole merkitty ainesosaluetteloihin (Abraham & Monien, 2022). Analyytinen tutkimus onkin keskeisessä roolissa kuluttajaturvallisuuden varmistamisessa ja tieteellisen pohjan luomisessa tiukemmille sääntelytoimille (Ao ym., 2024).

PFAS-yhdisteiden analysointi kosmetiikasta on haastavaa monimutkaisen matriisin vuoksi. Keskeinen menetelmä on nestekromatografia–tandemmassaspektrometria (LC-MS/MS), jota täydennetään erilaisilla näytteenkäsittelytekniikoilla, kuten liuotinuutolla, kiinteäfaasimikrouutolla (SPME) ja automaattisella mikrokiinteäfaasiuutolla (μ SPE), sekä kokonaisfluorin määrittämisellä (Olomukoro ym., 2026; Schultes ym., 2018).

Tämän tutkielman tavoitteena on vastata kysymyksiin: Millaisia kemiallisia ja fysikaalisia ominaisuuksia PFAS-yhdisteillä on, ja miten niiden molekyyli rakenne selittää niiden poikkeuksellista stabiiliutta? Mihin tarkoituksiin PFAS-yhdisteitä käytetään kosmetiikassa, ja mitä reittejä pitkin ihminen altistuu näille aineille tuotteiden käytön seurauksena? Millaisilla analyttisillä menetelmillä PFAS-yhdisteitä voidaan tunnistaa ja mitata monimutkaisista kosmetiikkamatriiseista mahdollisimman luotettavasti?

2 PFAS-yhdisteiden kemiallinen rakenne

Per- ja polyfluoratut alkyyliryhdyhdisteet (PFAS) ovat synteettisiä fluorattuja orgaanisia yhdisteitä, joiden kemiallinen runko koostuu alifaattisesta hiiliketjusta (Céline ym., 2024). Rakenteellisesti PFAS-yhdisteet jaetaan perfluorattuihin yhdisteisiin, joissa kaikki hiiliketjun vetyatomit on korvattu fluorilla, sekä polyfluorattuihin yhdisteisiin, joissa hiiliatomeihin on sitoutunut vähintään yksi vetyatomi (Jane L Espartero ym., 2022). Laajan määritelmän mukaan yhdiste luokitellaan PFAS-aineeksi, jos sen rakenteessa on vähintään yksi täysin fluorattu metyyli- ($-CF_3$) tai metyleeniryhmä ($-CF_2-$) (Namazkar ym., 2024).

PFAS-yhdisteiden keskeiset kemialliset ominaisuudet perustuvat niiden hiili–fluori-sidokseen (C–F), joka on yksi orgaanisen kemian vahvimista sidoksista (O'Malley ym., 2025). Sen sidosenergia on noin 485 kJ/mol, mikä tekee siitä merkittävästi vahvemman kuin hiili–vety-sidos (~ 410 kJ/mol) (O'Malley ym., 2025). Sidoksen korkea energia johtuu fluoriatomin pienestä atomikoosta ja suuresta elektronegatiivisuudesta, mikä synnyttää voimakkaan dipolimomentin ja johtaa sidoksen korkeaan stabiilisuuteen (Céline ym., 2024; Keawmanee ym., 2024). Niiden muodostama tiivis elektroninen suoja hiilirungon ympärillä vähentää molekyylin reaktiivisuutta ja tekee yhdisteistä kemiallisesti inertejä (Céline ym., 2024).

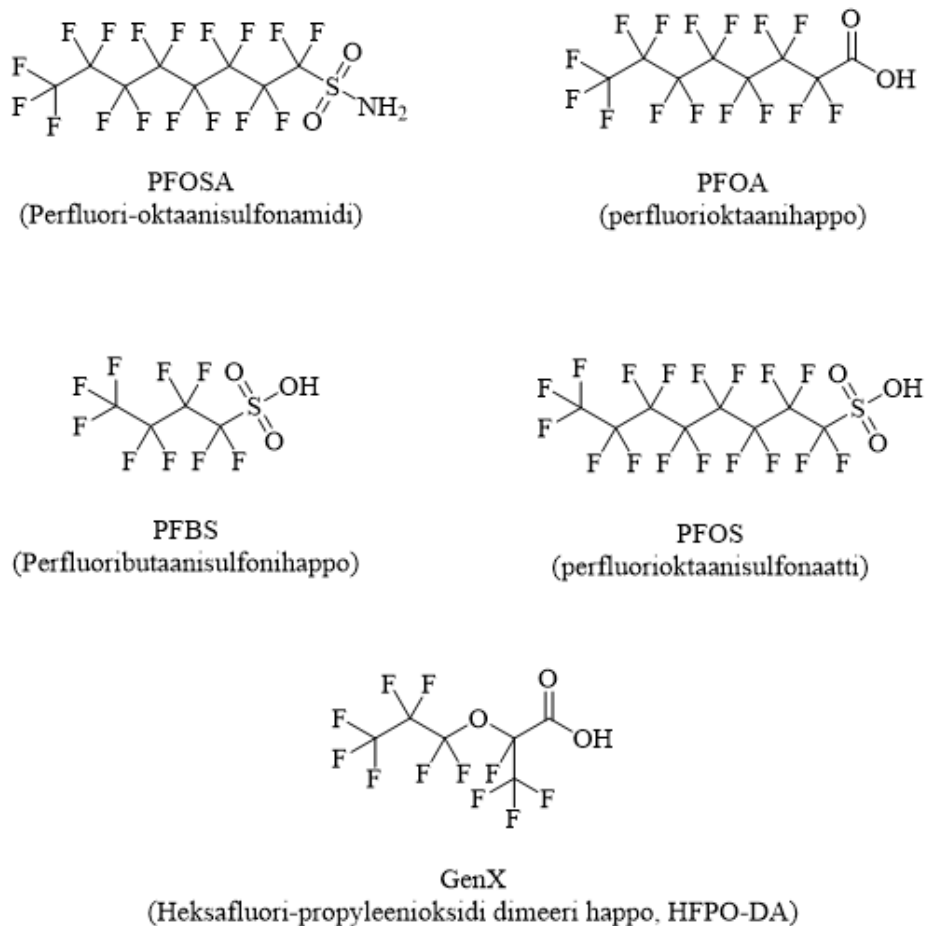
Perfluorialkyyliryhdyhdisteet ovat rakenteellisesti poikkeuksellisia, sillä ne ovat sekä hydrofobisia että oleofobisia (Figuière ym., 2025). Tämä ominaisuus liittyy C–F-sidoksen alhaiseen polarisoituvuuteen ja heikkoihin dispersiovoimiin, mikä vähentää vuorovaikutuksia sekä veden että orgaanisten yhdisteiden kanssa (Figuière ym., 2025).

Useimmat PFAS-yhdisteet sisältävät fluorattuun hiiliketjuun liittyneen funktionaalisen pääryhmän, kuten karboksylaatti- ($-COO^-$), sulfonaatti- ($-SO_3^-$) tai fosfaattiryhmän (Abraham & Monien, 2022). Tämä rakenne tekee monista PFAS-yhdisteistä amfifiilisiä, eli niissä yhdistyy hydrofobinen fluorattu ketju ja hydrofiilinen pääryhmä (Abraham & Monien, 2022).

Funktionaalinen ryhmä vaikuttaa yhdisteen ionisoitumiseen ja liukoisuuteen vesiliuoksessa (Abraham & Monien, 2022).

PFAS-yhdisteiden kemiallisiin ominaisuuksiin vaikuttaa myös hiiliketjun pituus, sillä pitkäketjuiset yhdisteet ovat yleensä hydrofobisempia ja vähemmän liikkuvia kuin lyhytketjuiset yhdisteet (Namazkar ym., 2024). Lyhytketjuiset PFAS-yhdisteet puolestaan ovat vesiliukoisempia ja liikkuvampia ympäristössä (Namazkar ym., 2024). Ketjun pituus vaikuttaa myös yhdisteiden pinta-aktiivisiin ominaisuuksiin ja jakautumiseen eri faasien välillä (Namazkar ym., 2024).

PFAS-yhdisteiden rakenteellinen monimuotoisuus on erittäin laaja (vrt. kuva 1), ja tunnettuja rakenteita on kymmeniä tuhansia (Whitehead ym., 2025). Ryhmä kattaa sekä pienimolekyylisiä yhdisteitä että suurimolekyylisiä polymeerejä, joissa fluoriatomit voivat olla osa polymeerirunkoa tai sen sivuketjuja (Harris ym., 2022). Tämä rakenteellinen variaatio tekee yhdisteiden systemaattisesta luokittelusta, analysoinnista ja sääntelystä haastavaa (O'Malley ym., 2025).



Kuva 1. Erityyppisiä PFAS-yhdisteitä ja niiden rakenteita.

2.1 PFAS-yhdisteiden toiminnalliset ominaisuudet ja käyttö kosmetiikassa

PFAS-yhdisteitä hyödynnetään kosmetiikassa erityisesti niiden teknisten ja toiminnallisten ominaisuuksien vuoksi (Figuière ym., 2025). Kosmetiikkateollisuudessa käytetään sekä suurimolekyylisiä polymeerisiä PFAS-yhdisteitä että pienimolekyylisiä fluorattuja aineita, joiden kemiallinen rakenne määrittää niiden fysikaaliskemialliset ominaisuudet ja soveltuvuuden eri tuotetyyppeihin (Espartero ym., 2025; Schultes ym., 2018).

PFAS-yhdisteiden keskeinen toiminnallinen piirre on niiden kyky muokata rajapintaominaisuuksia ja muodostaa ohuita, yhtenäisiä kalvoja ihon pinnalle (Zhao ym., 2026). Tämä parantaa tuotteiden kestävyyttä kosteutta, hikeä ja ihon lipidejä vastaan, minkä vuoksi yhdisteitä hyödynnetään erityisesti ripsiväreissä, meikkivoiteissa, huulituotteissa ja aurinkosuojaustuotteissa (Harris ym., 2022; Whitehead ym., 2025). Samalla kalvonmuodostus vähentää pigmenttien ja muiden komponenttien siirtymistä ja parantaa tuotteen pysyvyyttä käytön aikana (Zhao ym., 2026).

PFAS-yhdisteet vaikuttavat myös merkittävästi tuotteiden rakenteeseen ja aistinvaraisiin ominaisuuksiin. Ne voivat alentaa pintajännitystä ja vähentää kitkaa, mikä mahdollistaa tasaisen levittymisen sekä kevyen ja ei-tahmaavan ihotuntuman (Céline ym., 2024; O'Malley ym., 2025). Lisäksi ne voivat hajottaa ja sirottaa valoa ihon pinnalla, mikä pehmentää visuaalisesti ihon epätasaisuuksia ja liittyy kosmetiikassa hyödynnettyyn blurring- tai soft focus -efektiin (Bălan ym., 2024; Céline ym., 2024).

Toiminnallisesti PFAS-yhdisteet voivat toimia emulgaattoreina, pinta-aktiivisina aineina ja stabilointiaineina, mikä mahdollistaa monivaiheisten emulsioiden muodostumisen ja säilymisen (Dewapriya ym., 2023; Zhao ym., 2026). Näitä ominaisuuksia hyödynnetään esimerkiksi voiteissa, seerumeissa, meikkipohjissa ja aurinkosuojissa, joissa veden ja öljyn välinen tasapaino on keskeinen (Harris ym., 2022).

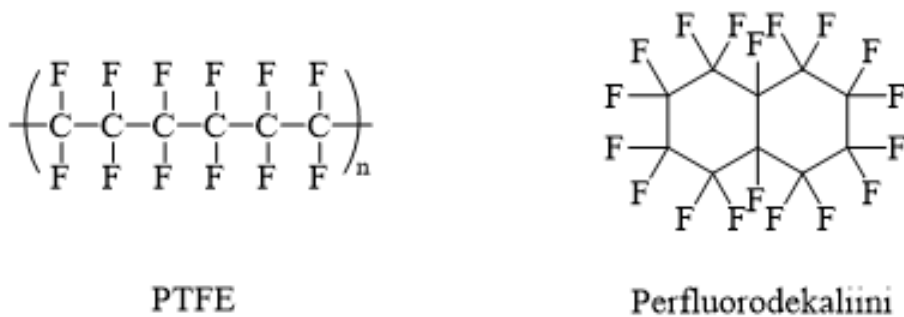
Lisäksi PFAS-yhdisteitä käytetään myös erikoissovelluksissa, kuten hiustenhoitotuotteissa ja kynsilakoissa, joissa ne voivat parantaa pinnan tasaisuutta, kiiltoa ja kulutuskestävyyttä (Bălan ym., 2024; Dewapriya ym., 2023). Joissakin ihonhoitotuotteissa pienimolekyyliset PFAS-yhdisteet voivat toimia myös liuottimina tai kuljetusväliaineina, mikä mahdollistaa muiden ainesosien tasaisemman jakautumisen (Le Bris ym., 2017).

PFAS-yhdisteiden käyttö kosmetiikassa perustuu siten ennen kaikkea niiden kykyyn hallita samanaikaisesti tuotteiden rakennetta, rajapintakäyttäytymistä ja visuaalista

lopputulosta, mikä tekee niistä monipuolisia ja vaikeasti korvattavia ainesosia (Figuière ym., 2025).

2.2 PTFE ja perfluorodekaliini kosmetiikan ainesosina

PTFE on lineaarinen ja täysin fluorattu polymeeri (vrt. kuva 2), joka tunnetaan kaupallisesti nimellä Teflon (Dias ym., 2024). Se kuuluu yleisimpiin kosmetiikassa käytettyihin PFAS-yhdisteisiin, ja fluorattuja polymeerejä on raportoitu esiintyvän laajasti erilaisissa kosmetiikkatuotteissa (Harris ym., 2022). Kosmetiikassa PTFE:tä hyödynnetään ensisijaisesti täyteaineena ja liukuvuuden muokkaajana, mikä parantaa tuotteen levittyvyyttä ja antaa iholle tasaisen ja sileän pinnan (Céline ym., 2024). Sen matala kitkakerroin sekä kyky hylkiä vettä ja öljyä tekevät siitä erityisen hyödyllisen koristekosmetiikassa, kuten puutereissa, luomiväreissä, huulipunissa ja meikkivoiteissa (Bălan ym., 2024; Dias ym., 2024).



Kuva 2. Polytetrafluorieteenin (PTFE:n) ja perfluorodekaliinin rakennekaavat.

Perfluorodekaliini ($C_{10}F_{18}$) on puolestaan pienimolekyylinen (vrt. kuva 2), syklinen ja täysin fluorattu yhdiste (Le Bris ym., 2017). Se eroaa PTFE:stä merkittävästi sekä rakenteensa että toimintansa osalta. Perfluorodekaliinille on ominaista poikkeuksellinen kyky liuottaa ja kuljettaa kaasuja, erityisesti happea (Céline ym., 2024). Tämän ominaisuuden vuoksi sitä käytetään kosmetiikassa ihoa hoitavana ainesosana, ja PFAS-yhdisteiden käyttö henkilökohtaisissa hoitotuotteissa liittyy usein juuri tällaisiin funktionaalisiin ominaisuuksiin (Dewapriya ym., 2023). Yhdistettä hyödynnetään erityisesti ihonhoitotuotteissa, kuten kosteusvoiteissa ja kasvonaamioissa, mutta sitä esiintyy myös joissakin koristekosmetiikan tuotteissa (Dewapriya ym., 2023).

PTFE:n ja perfluorodekaliinin välinen vertailu osoittaa selkeästi, kuinka PFAS-yhdisteiden kemiallinen rakenne määrittää niiden funktion kosmetiikkatuotteissa (vrt. taulukko 1).

Taulukko 1. PTFE:n ja perfluorodekaliinin rakenteellisten ja toiminnallisten ominaisuuksien vertailu kosmetiikassa (Bälan ym., 2024; Dias ym., 2024; Harris ym., 2022; Le Bris ym., 2017; Olomukoro ym., 2026; Winkens Pütz ym., 2022).

Ominaisuus	PTFE (polytetrafluorieteeni)	Perfluorodekaliini
Kemiallinen luonne	Polymeerinen PFAS-yhdiste	Pienimolekyylinen PFAS-yhdiste
Rakenne	Lineaarinen, täysin fluorattu polymeeri	Syklinen, täysin fluorattu yhdiste
Molekyylikoko	Suuri	Pieni
Fysikaalinen muoto	Kiinteä	Nestemäinen
Keskeinen ominaisuus	Matala kitkakerroin, veden ja rasvan hylkivyyys	Korkea kaasuliukoisuus (erityisesti happi)
Toimintamekanismi	Muokkaa tuotteen pintaa ja tekstuuria	Kuljettaa kaasuja ja toimii funktionaalisen ainesosana
Pääasiallinen käyttötarkoitus	Täyteaine ja liukuvuuden parantaja	Ihohoidollinen ja mahdollinen liuotin
Tyypilliset tuotteet	Puuterit, luomivärit, huulipunat, meikkivoiteet	Kosteusvoiteet, kasvonaamiot, osa meikeistä
Rooli tuotteessa	Passiivinen (fysikaalinen suorituskyky)	Aktiivinen (biologinen/kemiallinen vaikutus)
Imeytyminen ihoon	Vähäinen (polymeerinen rakenne)	Mahdollinen (pienimolekyylinen)
Perustuu C–F-sidokseen	Kyllä	Kyllä

Taulukossa 1 esitetty vertailu havainnollistaa, että vaikka molemmat yhdisteet perustuvat hiili–fluori-sidoksen poikkeukselliseen stabiiliuteen, niiden käyttötarkoitukset eroavat

merkittävästi. PTFE toimii pääasiassa tuotteen fysikaalisten ominaisuuksien parantajana, kun taas perfluorodekaliini liittyy enemmän biologisiin ja ihonhoidollisiin vaikutuksiin. Tämä korostaa PFAS-yhdisteiden rakenteellisen monimuotoisuuden merkitystä niiden sovelluksissa kosmetiikassa (Dewapriya ym., 2023).

3 PFAS-yhdisteisiin liittyvä altistuminen ja terveydellinen merkitys

Vaikka PFAS-yhdisteet tarjoavat kosmetiikassa merkittäviä teknisiä etuja, niiden käyttöön liittyy kasvavaa huolta kuluttajaturvallisuudesta ja mahdollisista terveysvaikutuksista (Bälan ym., 2024; Zhao ym., 2026). Yhdisteiden korkea kemiallinen stabiilisuus, joka on keskeinen niiden toiminnallisten ominaisuuksien kannalta, johtaa samalla niiden erittäin hitaaseen hajoamiseen ympäristössä ja elimistössä (Dias ym., 2024; O'Malley ym., 2025). Niiden keskeinen riskitekijä liittyy niiden biokertymiseen ja pitkiin puoliintumisaikoihin, jotka voivat olla useita vuosia (Namazkar ym., 2024; Sheinhaus & Gore, 2024). Tämän seurauksena jatkuva altistuminen, myös pienille pitoisuuksille, voi johtaa yhdisteiden kertymiseen elimistöön ajan myötä (Abraham ja Monien, 2022; Céline ym., 2024).

Kosmetiikan yhteydessä altistuminen tapahtuu useiden eri reittien kautta. Yleisin altistusreitti on ihokosketus, jonka kautta PFAS-yhdisteet voivat siirtyä ihon pinnalle ja osittain imeytyä ihon läpi verenkiertoon (Abraham & Monien, 2022; Lin ym., 2023). Ihon läpäisevyyteen vaikuttaa erityisesti yhdisteen kemiallinen rakenne, sillä pienimolekyyliset ja lyhytketjuiset PFAS-yhdisteet läpäisevät ihoa tehokkaammin kuin suurimolekyyliset tai polymeeriset yhdisteet (Espartero ym., 2025).

Kasvojen alueen kosmetiikkaan liittyy lisäksi spesifisiä altistusreittejä. Silmänympärysalueen tuotteet, kuten ripsivärit ja rajuuskynät, voivat altistaa PFAS-yhdisteille kyynelnesteen välityksellä, jolloin aineet voivat kulkeutua kyynelkanavien kautta nenäonteloon ja edelleen systeemiseen verenkiertoon (Zhao ym., 2026). Limakalvopintojen suurempi läpäisevyys verrattuna ihoon voi lisätä yhdisteiden imeytymistä. Huulituotteiden käyttö puolestaan johtaa usein tahattomaan nielemiseen, jolloin altistuminen tapahtuu ruoansulatuskanavan kautta (Harris ym., 2022; Zhao ym., 2026). Lisäksi aerosoli- ja spraymuotoiset tuotteet, kuten kiinnityssuihkeet ja puuterit, voivat mahdollistaa PFAS-yhdisteiden hengitysteitse tapahtuvan altistumisen (Heywood ym., 2026).

Tutkimukset osoittavat, että PFAS-yhdisteitä esiintyy laajasti kosmetiikkatuotteissa, ja niiden on havaittu olevan yleisiä erityisesti pitkäkestoisiksi ja vedenkestäviksi markkinoiduissa tuotteissa (Schultes ym., 2018; Whitehead ym., 2025). Vaikka yksittäisen tuotteen aiheuttama

altistus on usein pieni, useiden tuotteiden päivittäinen ja pitkäaikainen käyttö voi lisätä merkittävästi yksilön kokonaisaltistusta (Céline ym., 2024; Keawmanee ym., 2024). On myös esitetty, että kosmetiikan kautta saatava altistus voi joissakin tapauksissa olla samaa suuruusluokkaa tai jopa suurempi kuin ravinnon kautta tapahtuva altistus (Harris ym., 2022).

Terveysvaikutusten osalta PFAS-yhdisteiden on havaittu olevan yhteydessä useisiin haitallisiin biologisiin vaikutuksiin. Niiden on todettu voivan toimia hormonitoimintaa häiritsevinä aineina (EDC), jotka vaikuttavat esimerkiksi kilpirauhashormonien ja sukupuolihormonien säätelyyn (Sheinhaus & Gore, 2024; Zhang ym., 2024). Väestötutkimuksissa altistumisen on havaittu liittyvän muun muassa kilpirauhasen toimintahäiriöihin, muutoksiin hormonitasapainossa sekä aineenvaihdunnallisiin häiriöihin, kuten kohonneisiin kolesteroliarvoihin ja tyypin 2 diabeteksen riskiin (Ao ym., 2024; Dias ym., 2024; Jane L Espartero ym., 2022).

On kuitenkin tärkeää huomioida, että kaikki PFAS-yhdisteet eivät ole toksikologisesti samanlaisia. Esimerkiksi suurimolekyylisten polymeeristen yhdisteiden, kuten PTFE:n, imeytymisen ihon läpi arvioidaan olevan vähäistä, kun taas pienimolekyyliset yhdisteet voivat olla biologisesti aktiivisempia (Heywood ym., 2026). Tästä huolimatta PFAS-yhdisteitä tarkastellaan usein ryhmänä niiden yhteisten ominaisuuksien, erityisesti pysyvyyden ja kumuloitumisen vuoksi (Figuière ym., 2025).

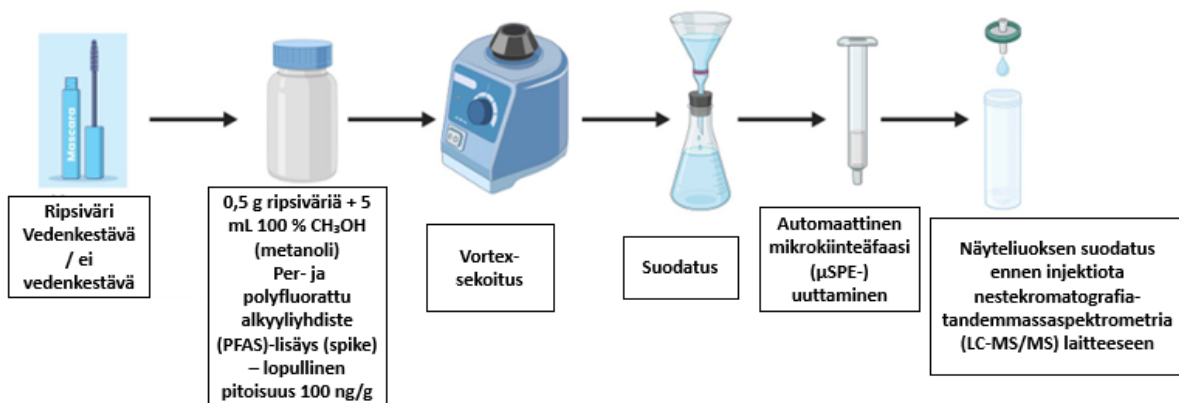
Kokonaisuudessaan PFAS-yhdisteisiin liittyvä altistuminen kosmetiikan kautta on monitekijäinen ilmiö, jonka arviointia vaikeuttavat yhdisteiden suuri määrä, vaihteleva kemiallinen käyttäytyminen sekä pitkäaikaisvaikutuksiin liittyvät epävarmuudet. Tämän vuoksi lisätutkimus on edelleen tarpeen altistumisen ja terveysriskien tarkemmaksi arvioimiseksi.

Lisääntyvä tieteellinen näyttö riskeistä on jo käynnistänyt merkittävän sääntelykehityksen, kuten EU:n asettamat pitoisuusrajat tietyille hapoille sekä Kalifornian ja Uuden-Seelannin asettamat kiellot PFAS-aineiden tarkoitukselliselle käytölle kosmetiikassa (Abraham & Monien, 2022; Bälän ym., 2024). Sääntelyn ja kuluttajaturvallisuuden varmistaminen edellyttävät kuitenkin entistä tarkempaa analytiikkaa, sillä monet haitalliset yhdisteet päätyvät tuotteisiin ilmoittamattomina epäpuhtauksina tai hajoavina esiasteina (Abraham & Monien, 2022; Olomukoro ym., 2026). Tästä syystä on kriittistä kyetä tunnistamaan myös ainesosaluettelon ulkopuoliset fluoratut aineet, ja seuraavassa luvussa syvennytäänkin toimiviin analyttisiin strategioihin.

4 PFAS-yhdisteiden analysointi kosmetiikkamatriisissa

PFAS-yhdisteiden analysointi kosmetiikasta on analyttisesti haastavaa, mikä johtuu sekä yhdisteiden kemiallisesta monimuotoisuudesta että kosmetiikkatuotteiden kompleksisesta koostumuksesta (O'Malley ym., 2025; Zhao ym., 2026). Kosmetiikkamatriisi sisältää tyypillisesti rasvoja, vahoja, pigmenttejä, silikoneja ja muita lisäaineita, jotka voivat häiritä analyysiä ja vaikeuttaa kohdeyhdisteiden erottamista ja tunnistamista (Keawmanee ym., 2024; Lin ym., 2023). Lisäksi PFAS-yhdisteiden suuri lukumäärä ja vaihtelevat fysikaalis-kemialliset ominaisuudet asettavat rajoitteita yksittäisten analyysimenetelmien kattavuudelle (Heywood ym., 2026).

PFAS-yhdisteiden analysoinnissa hyödynnetään sekä kohdennettuja että epäsuoria lähestymistapoja. Yhdistekohtaiset menetelmät, kuten LC-MS/MS, mahdollistavat tarkkojen pitoisuuksien määrittämisen tunnetuille yhdisteille, kun taas kokonaisfluorin analytiikka tarjoaa yleiskuvan näytteen fluorikuormasta (Schultes ym., 2018; Whitehead ym., 2025). Kuten kuvasta 3 nähdään, näytteenkäsittelyllä on keskeinen rooli analyysin onnistumisessa, sillä kohdeyhdisteet on erotettava tehokkaasti häiritsevistä matriisista ennen instrumentaalianalyysiä (Olomukoro ym., 2026).



Kuva 3. PFAS-yhdisteiden näytteenkäsittely- ja analyysiprosessi kosmetiikkanäytteestä nestekromatografia-tandemmassaspektrometria (LC-MS/MS)-määrittystä varten hyödyntäen automatisoitua mikrokiinteäfaasi (μSPE)-uuttoa. Kuva on käännetty muokattu avoimen julkaisun artikkelista ”Evaluation of extraction methodologies for PFAS analysis in mascara: a comparative study of SPME and automated μSPE”, jota voi jatkolevittää ja muokata Creative Commons Attribution License 4.0 International -lisenssillä (Olomukoro ym., 2026).

4.1 Näytteenkäsittelymenetelmät: liuotinuutto, SPME ja μ SPE

Ennen LC-MS/MS analyysiä PFAS-yhdisteet on erotettava kosmetiikkamatriisista, joka on kemiallisesti monimutkainen ja sisältää muun muassa lipofiilisiä komponentteja, kuten öljyjä ja vahoja, sekä silikoneja ja epäorgaanisia pigmenttejä (O'Malley ym., 2025; Zhao ym., 2026). Tällainen matriisi aiheuttaa merkittäviä analyyttisiä haasteita, erityisesti ionisaatiohäiriöitä LC-MS/MS-analyyssissä, joissa samanaikaisesti esiintyvät yhdisteet voivat vaimentaa tai vääristää analyytin signaalia (Keawmanee ym., 2024; Lin ym., 2023). Näytteenkäsittelyn keskeinen tehtävä onkin selektiivisesti eristää PFAS-yhdisteet muusta kosmetiikkamatriisista ja samalla minimoida matriisista peräisin olevat häiriöt, mikä tekee siitä koko analyysin kriittisimmän vaiheen.

Perinteinen liuotinuutto on laajasti käytetty menetelmä, joka perustuu PFAS-yhdisteiden siirtymiseen orgaaniseen liuottimeen. Sen etuna on hyvä yleiskäyttöisyys ja kyky uuttaa laaja kirjo erilaisia PFAS-yhdisteitä, erityisesti ionisia karboksylaatteja ja sulfonaatteja (Olomukoro ym., 2026; O'Malley ym., 2025). Menetelmä on myös hyvin tunnettu ja suhteellisen helposti toteutettavissa. Toisaalta liuotinuuton keskeinen rajoite on sen heikko selektiivisyys, sillä samanaikaisesti uutuu suuri määrä matriisin komponentteja, kuten rasvoja ja silikoneja, mikä lisää matriisivaikutuksia ja voi heikentää analyysin tarkkuutta (Lin ym., 2023). Tämä menetelmä on työläs ja kuluttaa merkittäviä määriä orgaanisia liuottimia, mikä heikentää sen tehokkuutta ja ekologisuutta (Olomukoro ym., 2026). Uuttotehokkuus riippuu myös yhdisteen rakenteesta, sillä pitkäketjuiset PFAS-yhdisteet sitoutuvat voimakkaammin matriisiin ja voivat jäädä osittain uuttumatta (Namazkar ym., 2024).

Kiinteäfaasimikrouutto (SPME) tarjoaa selektiivisemmän vaihtoehdon, jossa analyytit siirtyvät näytteestä kiinteään faasin pinnoitteeseen tasapainoprosessin kautta (Olomukoro ym., 2026). PFAS-yhdisteiden tapauksessa sitoutuminen perustuu pääasiassa hydrofobisiin vuorovaikutuksiin sekä heikkoihin dipoli-interaktioihin fluorattujen hiiliketjujen ja kiinteän faasin materiaalin välillä. Menetelmän keskeisiä etuja ovat vähäinen liuotinkulutus, yksinkertainen työvaiheiden määrä sekä pienempi kontaminaatio- ja häviöriski, koska näytteenotto, rikastus ja erottaminen tapahtuvat samassa vaiheessa. Lisäksi menetelmä voi vähentää matriisihäiriöitä, koska kaikki matriisin komponentit eivät sitoudu yhtä tehokkaasti kiinteään faasiin. Haasteena on kuitenkin menetelmän riippuvuus tasapainotilasta, mikä voi rajoittaa kvantitatiivista tarkkuutta, sekä kiinteän faasin materiaalin valinnan merkitys, sillä kaikki PFAS-yhdisteet eivät sitoudu yhtä tehokkaasti (Olomukoro ym., 2026).

Mikrokiinteäfaasiuutto (μ SPE) perustuu vastaavaan periaatteeseen, mutta siinä

analyytit rikastetaan kiinteään faasiin kontrolloiduissa virtausolosuhteissa (Olomukoro ym., 2026). PFAS-yhdisteiden erottuminen voi tapahtua sekä hydrofobisten vuorovaikutusten että ioninvaihtomekanismien kautta, erityisesti silloin, kun kiinteä faasi sisältää funktionaalisia ryhmiä, jotka sitoutuvat negatiivisesti varautuneisiin PFAS-yhdisteisiin (Abraham & Monien, 2022). Tämä lisää menetelmän selektiivisyyttä ja mahdollistaa tehokkaamman matriisin poistamisen verrattuna perinteiseen liuotinuuttoon (Olomukoro ym., 2026). Automatisoidut μ SPE-järjestelmät parantavat lisäksi analyysin toistettavuutta ja vähentävät käyttäjästä johtuvaa vaihtelua. Toisaalta menetelmä voi vaatia näytteen esisuodatusta tukkeutumisen estämiseksi, ja kiinteän faasin kapasiteetti voi rajoittaa analysoitavien yhdisteiden määrää erityisesti monimutkaisissa näytteissä (Olomukoro ym., 2026).

Kokonaisuudessaan näytteenkäsittelymenetelmien välillä on selvä kompromissi selektiivisyyden, tehokkuuden ja käytännöllisyyden välillä. Liuotinuutto tarjoaa laajan kattavuuden, mutta kärsii matriisihäiriöistä, kun taas SPME ja μ SPE parantavat selektiivisyyttä ja vähentävät häiriöitä, mutta vaativat tarkempaa optimointia ja soveltuvat eri tavoin eri PFAS-yhdisteille. Kosmetiikkamatriisin kompleksisuuden vuoksi näytteenkäsittelyn huolellinen valinta ja optimointi on ratkaisevaa luotettavien ja toistettavien analyysitulosten saavuttamiseksi (Keawmanee ym., 2024; Olomukoro ym., 2026).

4.2 LC-MS/MS yksittäisten yhdisteiden määrittämisessä

Nestekromatografia–tandemmassaspektrometria (LC-MS/MS) on ensisijainen ja laajimmin käytetty menetelmä yksittäisten PFAS-yhdisteiden tunnistamiseen ja kvantifiointiin kosmetiikasta (Céline ym., 2024; Schultes ym., 2018). Menetelmä perustuu kahden analyytin tekniikan yhdistelmään, jossa nestekromatografia (LC) erottaa näytteen sisältämät yhdisteet niiden fysikaalis-kemiallisten ominaisuuksien perusteella kromatografisessa kolonnissa, minkä jälkeen tandem-massaspektrometria (MS/MS) mahdollistaa yhdisteiden tunnistamisen niiden massavaraussuhteen (m/z) sekä ominaisten fragmentaatiokuvioiden perusteella (Abraham & Monien, 2022; Namazkar ym., 2024; O'Malley ym., 2025; Zhao ym., 2026).

Menetelmä soveltuu erityisen hyvin pienimolekyylisten ja ionisoituvien PFAS-yhdisteiden analysointiin, kuten perfluorattuihin karboksyyli- ja sulfonaattiyhdisteisiin, joissa funktionaalinen pääryhmä mahdollistaa tehokkaan ionisaation sähkösumutus-ionisaatiolla (ESI) ja tekee analyysistä sekä herkän että selektiivisen (Abraham & Monien, 2022; Keawmanee ym., 2024). Tämän ansiosta LC-MS/MS-menetelmällä voidaan saavuttaa ng/g-tason määrittämissrajat myös monimutkaisissa kosmetiikkamatriiseissa (Whitehead ym., 2025).

Menetelmän keskeiset vahvuudet liittyvät sen korkeaan herkkyYTEEN, jonka ansiosta voidaan havaita erittäin alhaisia pitoisuuksia, sekä selektiivisyyteen, joka mahdollistaa kohdeyhdisteiden erottamisen matriisin häiritsevistä komponenteista. Lisäksi menetelmä mahdollistaa yksittäisten PFAS-yhdisteiden, kuten perfluorioktaanihapon (PFOA), perfluorioktaanisulfonaatin (PFOS) ja polyfluorattujen fosfaattiesterien (PAP), luotettavan tunnistamisen ja erottamisen toisistaan (Harris ym., 2022; Lin ym., 2023; Zhao ym., 2026).

Vaikka LC-MS/MS-järjestelmiä on hyödynnetty ensisijaisesti kohdennettuun analytiikkaan, on kohdentamaton analyysi (NTA) ja suspektiseulonta mahdollista korkean erotuskyvyn massaspektrometrian (HRMS) avulla (Megson ym., 2025). Nämä menetelmät mahdollistavat uusien yhdisteiden löytämisen ja karakterisoinnin ilman ennako-oletusta niiden esiintymisestä, mikä auttaa täyttämään aukkoja rutiininomaisessa seurannassa, joka kattaa tyypillisesti vain murto-osan tuhansista mahdollisista PFAS-rakenteista (Megson ym., 2025). Tästä huolimatta PFAS-yhdisteiden laaja rakenteellinen monimuotoisuus johtaa siihen, että suuri osa yhdisteistä, erityisesti uudet tai tuntemattomat yhdisteet, jää havaitsematta, minkä vuoksi analyysi antaa usein vain osittaisen kuvan näytteen todellisesta fluorikuormasta (Heywood ym., 2026; Whitehead ym., 2025).

Lisäksi kaikki PFAS-yhdisteet eivät ole analysoitavissa tällä menetelmällä. Polymeeriset yhdisteet, kuten polytetrafluorieteeni (PTFE), eivät muodosta yksittäisiä ionisoituvia molekyylejä, minkä vuoksi niitä ei voida määrittää LC-MS/MS-tekniikalla (Céline ym., 2024). Vastaavasti neutraalit ja heikosti ionisoituvat yhdisteet, kuten perfluorodekaliini, eivät ionisoidu tehokkaasti ESI-lähteessä, mikä rajoittaa niiden analysointia ja edellyttää vaihtoehtoisten menetelmien, kuten kaasukromatografia–massaspektrometrian (GC-MS), käyttöä (Le Bris ym., 2017; Olomukoro ym., 2026). Näistä syistä LC-MS/MS-analyysi ei yksin riitä kattavan kokonaiskuvan muodostamiseen kosmetiikkatuotteiden PFAS-pitoisuuksista (Céline ym., 2024; Heywood ym., 2026).

Kvantitatiivinen määrittäminen perustuu näytteestä saadun signaalin vertaamiseen tunnettuihin pitoisuusstandardeihin, ja analyysin tarkkuutta parannetaan käyttämällä isotooppileimattuja sisästandardeja, jotka kompensoivat matriisivaikutuksia ja näytteenkäsittelyn aikana tapahtuvia häviöitä (Abraham & Monien, 2022; Namazkar ym., 2024). LC-MS/MS-analytiikassa PFAS-yhdisteitä mitataan ensisijaisesti hyödyntämällä valikoitua reaktioseurantaa (Selected Reaction Monitoring, SRM) tai monivaiheista reaktioseurantaa (Multiple Reaction Monitoring, MRM) (Ebhardt, 2014). Vaikka termejä käytetään joskus synonyymeinä, MRM- termiä käytetään erityisesti silloin, kun kolmoiskvadrupolilaitteistolla seurataan useita eri siirtymiä (transitions) samanaikaisesti yhden

analyysin aikana (Ebhardt, 2014). SRM/MRM-menetelmässä massaspektrometri toimii suodattimena, jossa ensimmäinen kvadrupoli (Q1) valitsee halutun lähtöionin (precursor ion) tietyn massa-varaussuhteen (m/z) perusteella (Ebhardt, 2014). Tämä ioni fragmentoidaan toisessa kvadrupolissa (Q2), ja kolmas kvadrupoli (Q3) suodattaa esiin vain tietyn, kyseiselle yhdisteelle luonteenomaisen tuoteionin (product ion) (Ebhardt, 2014). Menetelmän suuri selektiivisyys ja herkkyys perustuvat näin peräkkäisiin suodatusvaiheisiin, jotka poistavat tehokkaasti kosmetiikkamatriisin taustahälyä.

Taulukossa 2 on esitetty yleisimpiä LC-MS/MS-menetelmällä analysoitavia PFAS-yhdisteitä, niiden SRM/MRM-siirtymiä sekä kosmetiikassa havaittuja pitoisuusvälejä. Arvot on merkitty likimääräisiksi (~), koska massasuodattimilla on tyypillisesti $m/z \pm 0,7$ tai $\pm 0,35$ suuruinen massaikkuna instrumentin asetuksista riippuen (Abraham & Monien, 2022; Ebhardt, 2014).

Taulukko 2. Tyypilliset LC-MS/MS-analysoitavat PFAS-yhdisteet: hiiliketjun pituudet, m/z -arvot ja pitoisuudet

Yhdiste	Lyhenne	C-ketjun pituus	Tyypillinen SRM/MRM-siirtymä m/z	Pitoisuudet kosmetiikassa	Lähteet
Perfluorioktaanihappo	PFOA	C8	~413 → 369	<1–2330 ng/g	Schultes ym., 2018; Whitehead ym., 2021
Perfluorioktaanisulfonaatti	PFOS	C8	~499 → 80	<1–16,5 ng/g	Harris ym., 2022
Perfluoriheksaanihappo	PFHxA	C6	~313 → 269	<1–6710 ng/g	Harris ym., 2022,
Perfluoributaanihappo	PFBA	C4	~213 → 169	<1–4270 ng/g	Harris ym., 2022
Perfluoributaanisulfonaatti	PFBS	C4	~299 → 80	<1–86,1 ng/g	Harris ym., 2022,

Yhdiste	Lyhenne	C-ketjun pituus	Tyypillinen SRM/MRM-siirtymä <i>m/z</i>	Pitoisuudet kosmetiikassa	Lähteet
					Zhao ym., 2026
Perfluorinonaanihappo	PFNA	C9	~463 → 419	<1–6230 ng/g	Harris ym., 2022

4.3 Kokonaisfluorin analytiikka PFAS-indikaattorina

Kokonaisfluorin (TF) analytiikka tarkoittaa menetelmää, jolla mitataan näytteen sisältämän fluorin kokonaismäärää riippumatta siitä, missä kemiallisessa muodossa se esiintyy (Abraham & Monien, 2022; Schultes ym., 2018). Tämä lähestymistapa ei kykene yksilöimään tai tunnistamaan tiettyjä PFAS-yhdisteitä, vaan se antaa kattavan kokonaiskuvan näytteen fluoripitoisuudesta (Bälan ym., 2024; Schultes ym., 2018). Menetelmää hyödynnetään kosmetiikan tutkimuksessa erityisesti nopeana seulontatyökaluna, jonka avulla voidaan seuloa suuria määriä tuotteita ja saada viitteitä PFAS-yhdisteiden mahdollisesta esiintymisestä (Céline ym., 2024; Whitehead ym., 2025). Korkea kokonaisfluoripitoisuus on usein vahva indikaattori siitä, että tuotteeseen on lisätty tarkoituksellisesti fluorattuja ainesosia suorituskyvyn parantamiseksi (Harris ym., 2022; Whitehead ym., 2025).

Kokonaisfluorin analytiikkaan liittyy kuitenkin merkittäviä rajoituksia, sillä kaikki näytteessä havaittu fluori ei välttämättä ole PFAS-peräistä. Esimerkiksi koristekosmetiikassa käytettävät epäorgaaniset ainesosat, kuten synteettinen kiille, sisältävät fluoria, joka vääristää TF-mittauksen tulosta PFAS-indikaattorina (Céline ym., 2024; Namazkar ym., 2024). Menetelmä ei myöskään kykene yksilöimään yhdisteitä tai niiden ketjupituuksia, mikä on välttämätöntä aineiden terveysriskien arvioimiseksi (Bälan ym., 2024; Schultes ym., 2018).

Kokonaisfluori toimii yleisenä indikaattorina, joka paljastaa myös ne fluoratut yhdisteet ja polymeerit, joita kromatografiset menetelmät eivät tunnista (Namazkar ym., 2024; Schultes ym., 2018). LC-MS/MS- ja kokonaisfluorin menetelmät täydentävätkin toisiaan erinomaisesti: kokonaisfluorin mittaus paljastaa näytteen todellisen fluorikuorman laajuuden, kun taas yhdistekohtainen analytiikka varmistaa tunnettujen haitallisten PFAS-aineiden pitoisuudet (O'Malley ym., 2025; Schultes ym., 2018).

5 Johtopäätökset

Kosmetiikan kannalta PFAS-yhdisteet muodostavat selkeän hyöty–riski-ristiriidan. PTFE:n ja perfluorodekaliinin vertailu osoittaa, että PFAS-yhdisteitä ei voida tarkastella yhtenä samanarvoisena ryhmänä, sillä polymeeriset ja pienimolekyyliset yhdisteet eroavat merkittävästi rakenteen, käyttötarkoituksen ja mahdollisen imeytymisen osalta. Tämä korostuu myös analytiikassa: pienimolekyyliset, ionisoituvat yhdisteet ovat hyvin kvantifioitavissa LC-MS/MS-menetelmällä, kun taas polymeeriset yhdisteet, kuten PTFE, jäävät usein kokonaan analyysin ulkopuolelle. Näin ollen myös analyttinen näkyvyys eri PFAS-yhdisteisiin on epätasainen, mikä heijastuu suoraan riskinarvioinnin luotettavuuteen.

Altistumisen arvioinnissa keskeistä on huomioida kosmetiikan käyttötapa. Iholle jätettävät tuotteet, silmänympärysalueen tuotteet ja huulituotteet voivat lisätä altistumista eri reittien kautta, eikä pelkkä yksittäisen tuotteen pitoisuus kuvaa kokonaisriskiä riittävästi. Analyttisesti tämä tarkoittaa, että pelkkä yhdistekohtainen pitoisuusdata ei riitä, vaan tarvitaan myös tietoa yhdisteiden fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista, kuten ketjun pituudesta, ionisoitumisesta ja lipofiilisyydestä, jotka vaikuttavat imeytymiseen ja jakautumiseen elimistössä.

Analytiikan näkökulmasta keskeinen havainto on, että mikään yksittäinen menetelmä ei tuota kattavaa kuvaa kosmetiikan PFAS-sisällöstä. LC-MS/MS tarjoaa korkean herkkyyden ja selektiivisyyden tunnetuille yhdisteille ja nykyaikainen korkean erotuskyvyn massaspektrometriaan (HRMS) perustuva kohdentamaton analyysi (NTA) ja suspektiseulonta mahdollistavat uusien, ennalta tuntemattomien PFAS-rakenteiden ja hajoamistuotteiden tunnistamisen ja karakterisoinnin ilman ennako-oletuksia. Tästä huolimatta merkittävä osa näytteen todellisesta fluorikuormasta jää usein selittämättä. Näytteenkäsittelymenetelmät, kuten liuotinuutto, SPME ja μ SPE, vaikuttavat ratkaisevasti siihen, mitkä yhdisteet ylipäättään päätyvät analysoitaviksi, sillä uuttomekanismit (hydrofobiset vuorovaikutukset, ioninvaihto) suosivat eri tavoin eri PFAS-ryhmiä. Tämän seurauksena analyysitulokset voivat olla menetelmäriippuvaisia.

Kokonaisfluorin määrittäminen toimii tärkeänä täydentävänä lähestymistapana, koska se mahdollistaa myös sellaisten fluorattujen yhdisteiden havaitsemisen, joita LC-MS/MS ei tunnista, mukaan lukien polymeeriset ja tuntemattomat PFAS-yhdisteet. Fluorimassatasapainon tarkastelu (TF vs. kohdennettu analyysi) tuo esiin analytiikan keskeisen puutteen: usein vain pieni osa kokonaisfluorista voidaan selittää tunnetuilla yhdisteillä. Tämä

viittaa siihen, että kosmetiikkatuotteet sisältävät merkittäviä määriä analytiikan ulkopuolelle jääviä yhdisteitä, mikä lisää epävarmuutta sekä altistumisen että riskin arvioinnissa.

Koska suuri osa tästä fluorikuormasta on usein "näkyvätöntä" eli perinteisen analytiikan ulkopuolelle jääviä esiasteita, on kehitetty uusia strategioita tilanteen kartoittamiseksi. Esimerkiksi TOP-analyysi kykenee paljastamaan näytteessä olevia esiasteita hapettamalla ne kemiallisesti mitattavissa oleviksi perfluorikarboksyylihapoiksi (Antell ym., 2024). TOP-AOF-menetelmä taas parantaa PFAS-analyysin selkeyttä poistamalla ei-PFAS-yhdisteitä, mikä mahdollistaa syntyvien fraktioiden tarkemman seurannan (Choi ym., 2026).

Kokonaisuutena PFAS-yhdisteiden tutkimus kosmetiikassa edellyttää monimenetelmällistä analyysistrategiaa, jossa yhdistetään kohdennettu LC-MS/MS, erilaiset näytteenkäsittelytekniikat sekä kokonaisfluorin määrittäminen. Tällainen lähestymistapa ei ainoastaan paranna analyysin kattavuutta, vaan myös mahdollistaa paremman käsityksen siitä, kuinka suuri osa fluorikuormasta jää tunnistamatta. Jatkossa keskeinen haaste on kehittää analytiikkaa, joka yhdistää yhdistekohtaisen tarkkuuden ja laajan kattavuuden, erityisesti polymeeristen, neutraalien ja uusien PFAS-yhdisteiden osalta. Tähän tavoitteeseen vastaavat parhaiten kohdentamaton analytiikka (NTA) ja skriinaavat menetelmät, joiden avulla voidaan tunnistaa ennalta tuntemattomia aineita sekä mahdollisia hajoamistuotteita monimutkaisista kosmetiikkamatriiseista ilman standardien asettamia rajoitteita. Tämä on välttämätöntä, jotta kosmetiikan PFAS-yhdisteisiin liittyvät riskit voidaan arvioida luotettavasti suhteessa niiden tuottamiin teknisiin hyötyihin.

6 Lähteet

- Abraham, K., & Monien, B. H. (2022). Transdermal absorption of ¹³C₄-perfluorooctanoic acid (¹³C₄-PFOA) from a sunscreen in a male volunteer – What could be the contribution of cosmetics to the internal exposure of perfluoroalkyl substances (PFAS)? *Environment International*, *169*, 107549. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2022.107549>
- Antell, E. H., Yi, S., Olivares, C. I., Ruyle, B. J., Kim, J. T., Tsou, K., Dixit, F., Alvarez-Cohen, L., & Sedlak, D. L. (2024). The total oxidizable precursor (TOP) assay as a forensic tool for per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) source apportionment. *ACS ES&T Water*, *4*(3), 948–957. <https://doi.org/10.1021/acsestwater.3c00106>
- Ao, J., Tang, W., Liu, X., Ao, Y., Zhang, Q., & Zhang, J. (2024). Polyfluoroalkyl phosphate esters (PAPs) as PFAS substitutes and precursors: An overview. *Journal of Hazardous Materials*, *464*, 133018. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2023.133018>
- Bălan, S. A., Bruton, T. A., Harris, K., Hayes, L., Leonetti, C. P., Mathrani, V. C., Noble, A. E., & Phelps, D. S. C. (2024). The total mass of per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs) in California cosmetics. *Environmental Science & Technology*, *58*(27), 12101–12112. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c06539>
- Céline, C., Catherine, B., Romane, C., & Laurence, C. (2024). Per- and polyfluoroalkyls used as cosmetic ingredients—Qualitative study of 765 cosmetic products. *Food and Chemical Toxicology*, *187*, 114625. <https://doi.org/10.1016/j.fct.2024.114625>
- Choi, S., Son, H., Lee, W., Shin, J., & Lee, Y. (2026). Bridging target analysis and total-fluorine screening: TOP-AOF enables improved assessment of PFAS contamination in industrialized watersheds. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, *14*(3), 122442. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2026.122442>
- Dewapriya, P., Chadwick, L., Gorji, S. G., Schulze, B., Valsecchi, S., Samanipour, S., Thomas, K. V., & Kaserzon, S. L. (2023). Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in consumer products: Current knowledge and research gaps. *Journal of Hazardous Materials Letters*, *4*, 100086. <https://doi.org/10.1016/j.hazl.2023.100086>

- Dias, D., Bons, J., Kumar, A., Kabir, M. H., & Liang, H. (2024). Forever chemicals, per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS), in lubrication. *Lubricants*, *12*(4), 114. <https://doi.org/10.3390/lubricants12040114>
- Ebhardt, H. A. (2014). Selected reaction monitoring mass spectrometry: A methodology overview. Teoksessa J. V. Jorin-Novo, S. Komatsu, W. Weckwerth, & S. Wienkoop (Toim.), *Plant Proteomics: Methods and Protocols* (s. 209–222). Humana Press. https://doi.org/10.1007/978-1-62703-631-3_16
- Espartero, L. J. L., Ishaq, Z., Bradley, S., Moore, M., Yamada, M., Wang, X., Prow, T., Juhasz, A., & Thai, P. K. (2025). Dermal permeation of perfluoroalkyl substances in human skin – An *in-vitro* study. *Chemosphere*, *378*, 144408. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2025.144408>
- Figuière, R., Miaz, L. T., Savvidou, E., & Cousins, I. T. (2025). An overview of potential alternatives for the multiple uses of per- and polyfluoroalkyl substances. *Environmental Science & Technology*, *59*(4), 2031–2042. <https://doi.org/10.1021/acs.est.4c09088>
- Harris, K. J., Munoz, G., Woo, V., Sauv e, S., & Rand, A. A. (2022). Targeted and suspect screening of per- and polyfluoroalkyl substances in cosmetics and personal care products. *Environmental Science & Technology*, *56*(20), 14594–14604. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c02660>
- Heywood, J., Sahmel, J., Tack, S., Lotter, J., Gaffney, S. H., & Dotson, S. G. (2026). A critical review of scientific data pertaining to dermal exposures to per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS). *Risk Analysis*, *46*(5), e70245. <https://doi.org/10.1111/risa.70245>
- Jane L Espartero, L., Yamada, M., Ford, J., Owens, G., Prow, T., & Juhasz, A. (2022). Health-related toxicity of emerging per- and polyfluoroalkyl substances: Comparison to legacy PFOS and PFOA. *Environmental Research*, *212*, 113431. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.113431>
- Keawmanee, S., Piyaviriyakul, P., Boontanon, N., Waiyarat, S., Sukeesan, S., Kongpran, J., & Boontanon, S. K. (2024). Concentration and health risk assessment of per- and polyfluoroalkyl substances in cosmetic and personal care products. *Journal of Environmental Science and Health, Part B*, *59*(9), 551–561. <https://doi.org/10.1080/03601234.2024.2384234>
- Le Bris, K., DeZeeuw, J., Godin, P. J., & Strong, K. (2017). *Cis*- and *trans*-perfluorodecalin: Infrared spectra, radiative efficiency and global warming potential. *Journal of Quantitative Spectroscopy*

- and Radiative Transfer, HITRAN2016 Special Issue*, 203, 538–541.
<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2017.01.011>
- Lin, X., Xing, Y., Chen, H., Zhou, Y., Zhang, X., Liu, P., Li, J., Lee, H. K., & Huang, Z. (2023). Characteristic and health risk of per- and polyfluoroalkyl substances from cosmetics via dermal exposure. *Environmental Pollution*, 338, 122685. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2023.122685>
- Megson, D., Bruce-Vanderpuije, P., Idowu, I. G., Ekpe, O. D., & Sandau, C. D. (2025). A systematic review for non-targeted analysis of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS). *Science of The Total Environment*, 960, 178240. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.178240>
- Namazkar, S., Ragnarsdottir, O., Josefsson, A., Branzell, F., Abel, S., Abou-Elwafa Abdallah, M., Harrad, S., & Benskin, J. P. (2024). Characterization and dermal bioaccessibility of residual- and listed PFAS ingredients in cosmetic products. *Environmental Science-Processes & Impacts*, 26(2), 259–268. <https://doi.org/10.1039/d3em00461a>
- Olomukoro, A. A., Lüthy, L., Flug, T., & Gionfriddo, E. (2026). Evaluation of extraction methodologies for PFAS analysis in mascara: A comparative study of SPME and automated μ SPE. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 418(2), 619–632. <https://doi.org/10.1007/s00216-025-05908-x>
- O'Malley, K., Hidle, H. B., Jones, B. P., Liang, S., Tong, Y. J., & Chen, D. (2025). A suspects screening workflow towards total per- and poly-fluoroalkyl substances in cosmetics with time-of-flight mass spectrometry. *Journal of Hazardous Materials Advances*, 17, 100580. <https://doi.org/10.1016/j.hazadv.2024.100580>
- Schultes, L., Vestergren, R., Volkova, K., Westberg, E., Jacobson, T., & Benskin, J. P. (2018). Per- and polyfluoroalkyl substances and fluorine mass balance in cosmetic products from the Swedish market: Implications for environmental emissions and human exposure. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 20(12), 1680–1690. <https://doi.org/10.1039/C8EM00368H>
- Sheinhaus, D. L., & Gore, A. C. (2024). Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances: The price of forever chemicals. *The Lancet Diabetes & Endocrinology*, 12(6), 374–375. [https://doi.org/10.1016/S2213-8587\(24\)00125-6](https://doi.org/10.1016/S2213-8587(24)00125-6)
- Whitehead, H. D., Buckley, T. J., Sobus, J. R., Bangma, J., MacMillan, D. K., Ferland, T. M., Chao, A., Williams, A. J., Janesch, G., Poeske, R., Newman, E., Braverman, C., Small, M., Urban, S.,

- Cao, Z., Dahlmeier, A., Saravia, S., Rushing, R., DeVault, M., ... McCord, J. P. (2025). The ENTAiLS Toolkit: An integrated workflow to perform non-targeted analysis of per- and polyfluoroalkyl substances. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 417(17), 3997–4009. <https://doi.org/10.1007/s00216-025-05921-0>
- Winkens Pütz, K., Namazkar, S., Plassmann, M., & P. Benskin, J. (2022). Are cosmetics a significant source of PFAS in Europe? Product inventories, chemical characterization and emission estimates. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 24(10), 1697–1707. <https://doi.org/10.1039/D2EM00123C>
- Zhang, Y., Tu, L., Chen, J., & Zhou, L. (2024). Interference mechanisms of endocrine system and other systems of endocrine-disrupting chemicals in cosmetics—In vitro studies. *International Journal of Endocrinology*, 2024(1), 2564389. <https://doi.org/10.1155/ije/2564389>
- Zhao, L., Chen, J., Sun, Y., Li, Y., Li, H., & Wu, Q. (2026). Integrating target, nontarget analysis with machine learning to illuminate PFAS characteristics and health risks in Chinese cosmetics. *Environmental Pollution*, 397, 127933. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2026.127933>