Obsah

1. CÍL METODIKY 7

2. VLASTNÍ POPIS METODIKY 9

2.1. Současný stav poznání v oblasti necílené analýzy 9

2.1.1. Odběr a příprava vzorků 9

2.1.2. Instrumentální analýza a sběr dat 12

2.1.3. Zpracování dat 13

2.2. Popis vzorkovaných míst, použité metody vzorkování a instrumentální analýzy 18

2.2.1. Výběr vzorkovaných lokalit a jejich popis 19

2.2.2. Použité metody vzorkování 20

2.2.3. Použité metody instrumentální analýzy 21

2.3. Popis parametrů zpracování dat pomocí softwaru Compound Discoverer 3.3. 24

2.4. Komentovaný postup vyhodnocení dat 30

2.4.1. Práce se soubory před spuštěním vyhodnocení 30

2.4.2. Základní zpracování a vyhodnocení MS^1 dat 32

2.4.3. Základní zpracování a vyhodnocení MS^2 dat 39

2.4.4. Ukázky pokročilého vyhodnocení dat po automatickém zpracování 47

2.4.5. Komunikace a sdílení výsledků necílených analýz uživatelům dat 50

2.4.6. Příklady výsledků dosažených aplikací necílených analýz v rámci projektu a možnosti využití již získaných DIA dat 51

3. SROVNÁNÍ „NOVOSTI POSTUPŮ" 53

4. POPIS UPLATNĚNÍ CERTIFIKOVANÉ METODIKY 53

5. EKONOMICKÉ ASPEKTY 54

6. SEZNAM POUŽITÉ SOUVISEJÍCÍ LITERATURY 55

7. SEZNAM PUBLIKACÍ, KTERÉ PŘEDCHÁZELY METODICE 59