

Plan upravljanja istraživačkim podacima - projekt MacroSol (Koordinacijske reakcije makrocikličkih liganada u otopini, IP-2019-04-9560)

Usenik, Andrea

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2024**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:539111>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom](#).

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-15**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Vladislav Tomišić
	Matična organizacija	Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
	Naziv projekta	Koordinacijske reakcije makrocikličkih liganada u otopini
	Upravitelj podacima	Vladislav Tomišić vtomistic@chem.pmf.hr
1. Prikupljanje podataka i dokumentacija		
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka)	<p>Kategorija 1. Podatci vezani uz sintezu i karakterizaciju liganada korištenih u istraživanju</p> <p>Podatci u Kategoriji 1 bit će dokumentirani u laboratorijskim dnevnicima u fizičkom obliku. Ti podatci uključuju procedure za sintezu, pročišćavanje i analizu novih spojeva te optimizaciju navedenih postupaka. Podatci vezani uz sintezu i pročišćavanje spojeva su opisne prirode te uključuju tekstualne opise provedenih postupaka (uključujući napomene i komentare) te rezultate istih. Podatci vezani uz analizu pročišćenih spojeva uglavnom se prikupljaju na računalima vezanim uz instrumente na kojima se provodi karakterizacija. Vrsta datoteke ovisi o instrumentu i računalnom softveru na kojem se provodi analiza te su podatci uglavnom spremljeni u obliku foldera u kojima je sadržan niz datoteka različitih ekstenzija čitljivih jedino pomoću softvera koji dolazi uz instrument (primjerice TopSpin softver za analizu NMR spektara). U slučajevima gdje je to moguće, informacije će biti procesirane i spremljene u jednostavnijim oblicima poput .csv tablica (spektrofotometrijska i spektrofluorimetrijska analiza, termogravimetrija, diferencijalna skenirajuća kalorimetrija, ...) ili .cif datoteka (kristalne strukture).</p> <p>Kategorija 2. Podatci vezani uz eksperimentalno istraživanje koordinacijskih reakcija makrocikličkih liganada</p> <p>Podatci vezani u ovoj kategoriji prikupljat će se na više različitih instrumenata. Primjeri instrumenata/metoda dani su u nastavku.</p>

Kalorimetrijska istraživanja – provodit će se na titracijskim izotermnim kalorimetrima (Malvern VP-ITC i Malvern PEAQ ITC; sirovi podatci spremljeni u .itc formatu; analizirani uglavnom pomoću softvera OriginPro i Malvern PEAQ ITC Analysis Software, te rezultati analize spremljeni u .opj ili .apj formatu), disolucijskim i diferencijalnim skenirajućim kalorimetrima (TA Instruments TAM IV i Setaram BT 2.15; sirovi podatci spremljeni u .rslt i .dat/.pts/.exp formatima; analizirani pomoću softvera TAM Assistant i Calisto te rezultati analize spremljeni u .opj formatu).

Spektrofotometrijska i spektrofluorimetrijska istraživanja – provodit će se na spektrofotometrima (Agilent Cary 60, Agilent Cary 5000) i spektrofluorimetru (Agilent Cary Eclipse). Sirovi podatci spremljeni su u .bsw/.dsw odnosno .fbsw formatima te u .csv formatu. Za analizu će se koristiti HYPERQUAD softverski paket te će analize biti spremljene u .HQD formatu.

Potenciometrijska i konduktometrijska istraživanja – provodit će se na nizu pH-metara i konduktometara vezanih na računala s instaliranim odgovarajućim softverima. Bilježenje podataka je izravno u .csv datoteke, a za analizu će se koristiti HYPERQUAD softverski paket te će rezultati analize biti spremljene u .HQD formatu.

NMR istraživanja – provodit će se na Bruker Ascend™ 400 MHz te Bruker Ascend™ 600 MHz instrumentima pomoću TopSpin softvera. Sirovi podatci spremaju se kao folderi čitljivi softverima za obradu NMR spektara (TopSpin, MestReNova). Isti će biti korišteni za analizu NMR spektara pri čemu će analizirani spektri biti spremljeni u .mnova obliku.

Reprezentativni rezultati svih analiza opisanih gore (i dodatnih u slučaju rjeđe korištenih metoda) konačno se prikazuju u .opj i/ili .png/.jpg formatu, a podatci dobiveni na temelju njihove obrade prikazani su u odgovarajućim tablicama u izvješćima i znanstvenim radovima.

Kategorija 3. Podatci vezani uz računalno istraživanje koordinacijskih reakcija makrocikličkih liganada

Podatci dobiveni kao rezultat računalnih simulacija (molekulska dinamika) dobivenih programom GROMACS bit će spremljeni u .trr, .tsv i .gro obliku. Za potrebe prikaza, ogledni primjerci bit će izdvojeni, spremljeni i prikazani u nekom od često korištenih i lako čitljivih formata za prikaz vizualnih sadržaja (.jpg, .png, .tiff, .gif, ...).

		<p>Ukupnu veličinu datoteka koje sadrže podatke iz bilo koje od navedenih kategorija teško je predvidjeti zbog izražene ovisnosti veličine datoteke o korištenoj metodi i odabiru parametara u većini slučajeva. Predviđa se da je ukupna količina prikupljenih podataka reda veličine 2 do 4 TB.</p>
	<p>Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)</p>	<p>S obzirom na velik broj istraživača u radnoj skupini s već uhodanim protokolima i metodologijom imenovanja eksperimenata i dobivenih podataka, ali i zbog različitosti instrumentalnih metoda i ograničenja pri imenovanju istih, na razini projekta nije striktno definiran sustav imenovanja podataka. Unatoč tome, za sve je podatke nužno da su popraćeni detaljnim dnevnikom na temelju kojega bilo koji od članova istraživačke skupine može zaključiti na koji je način eksperiment proveden te ga ponoviti.</p> <p>Primjerice, folder u koji su spremljeni sirovi rezultati istraživanja sadrži kratki opis eksperimenta (npr. Ligand_kation_otapalo_metoda_brojeksperimenta_datum). U slučaju kada je to moguće, u istom folderu nalazi se i dokument koji se koristi za obradu podataka u kojem su navedeni najvažniji parametri poput koncentracija otopina, temperature, detalja u vezi eksperimentalnog postupka (npr. broj i volumen dodataka u titraciji, razmak između dodataka, parametri vezani uz instrument, ...). Svi članovi istraživačke skupine konačne rezultate istraživanja prikazuju na isti način, uz eventualna sitnija odstupanja koja su vezana uz specifične problematike u okviru projekta. U slučaju kada je to potrebno, instrumenti i mjerni uređaji bit će kalibrirani na isti način (po uspostavljenoj proceduri) – primjerice u slučaju kalibracije pH-metra bit će korišteni certificirani puferi od istog proizvođača. Kvaliteta podataka će se evaluirati na temelju ponovljenih eksperimenata u slučajevima kada je to moguće te će odstupanja biti iskazana kao standardna pogreška aritmetičke sredine.</p> <p>Konačni dokumenti (sirovi podatci, obrađeni podatci, izvješća, ocjenke radnje te dokumentacija vezana uz znanstvene i slične radove) pohranjuju se u oblaku (OneDrive) te su dostupni svim članovima istraživačke skupine u svakom trenutku.</p>
	<p>Koju ćete dokumentaciju i metapodatke ustupiti osim podataka? (navedite koje su informacije potrebne korisnicima kako bi mogli čitati i interpretirati podatke u budućnosti te koji će se standardi koristiti pri tumačenju podataka)</p>	<p>Svi podatci iz Kategorije 1 bit će popraćeni dokumentacijom u fizičkom obliku s objašnjenjima uobičajenima za sintezu, analizu i karakterizaciju nosivih spojeva. To uključuje pojedinosti vezane uz uvjete provedenih reakcija, parametre ključne za sintetski postupak (otapalo, temperatura, brzina miješanja, katalizator, ...), parametre analize dobivenih spojeva te informacije na koji je način odnosno na kojim instrumentima provedena njihova izolacija i analiza. Svi dokumenti prikupljeni na računalu bit će dostupni u nekom od prethodno navedenih oblika na lokaciji dostupnoj svim članovima istraživačke skupine. Svi članovi istraživačke skupine dužni su uz sirove i obrađene podatke na istom mjestu priložiti i dokumentaciju na temelju koje je moguće eksperimente provesti neovisno. S obzirom na raznolikost postupaka i problematika koje se provode na razini projekta te ograničenja istih (po pitanju</p>

		imenovanja dokumenata, opisa i sl.), nije definiran protokol za imenovanje podataka i dostavu popratne dokumentacije, već je istu nužno priložiti u formatu koji omogućuje neovisnom istraživaču da ponovi eksperiment na isti način.
2.	Pravna i sigurnosna pitanja	
	Jeste li ograničeni sporazumom o povjerljivosti? Imate li potrebna dopuštenja za prikupljanje, obradu, čuvanje i dijeljenje podataka? Jesu li osobe čiji se podaci pohranjuju informirani o tome i jesu li dali privolu? Kojim ćete se metodama koristiti u svrhu zaštite osjetljivih podataka (GDPR - posebne kategorije osobnih podataka)?	Projekt nije ograničen sporazumom o povjerljivosti.
	Kako će se regulirati pristup podacima i njihova sigurnost? Koji su potencijalni rizici koje treba uzeti u obzir? Kako ćete osigurati sigurnost pohrane osjetljivih podataka?	<p>Budući da se u okviru projekta ne prikupljaju osobni ili osjetljivi podatci, nisu potrebne dodatne mjere zaštite podataka. Pristup sirovim podacima poput laboratorijskih dnevnika, kao i onima dostupnima na računalima vezanim uz instrumente na kojima se provode istraživanja imaju svi članovi laboratorija u kojima se provode istraživanja. Pristup svim (sirovim i obrađenim) podacima spremljenim na OneDrive osiguran je isključivo članovima istraživačke skupine koji se u isti prijavljuju preko identiteta ustanove i njihova sigurnost regulirana je na razini fakulteta (AAIEdu platforma).</p> <p>Eventualni rizici koje treba uzeti u obzir uključuju potencijalni gubitak podataka uslijed kvara na računalima što se nastoji izbjeći spremanjem svih podataka na više mjesta, odnosno stvaranjem <i>backup</i>-a (uključujući Cloud).</p> <p>Svi osjetljivi podatci odmah će se prebaciti na Cloud kako ne bi bili dostupni korisnicima koji nisu članovi istraživačke skupine.</p>
	Kako ćete upravljati zaštitom autorskih prava i intelektualnog vlasništva? Tko će biti vlasnik podataka? Koje će se licencije primjenjivati na podatke? Koja će se	<p>Ne očekuje se da će istraživanja provedena u okviru projekta dovesti do patenata.</p> <p>Vlasnici autorskih prava te prava intelektualnog vlasništva su članovi istraživačke skupine koji su se bavili određenim istraživanjem u okviru projekta. Za korištenje podataka od strane drugih istraživačkih skupina potrebna je privola članova istraživačke skupine koji su se bavili tim dijelom istraživanja i</p>

	ograničenja primjenjivati na ponovnu uporabu osobnih podataka?	voditelja projekta. U slučaju ostvarivanja suradnji s drugim istraživačkim skupinama primjenjivat će se iste smjernice za korištenje podataka.
3.	Pohrana i čuvanje podataka	
	Kako će podaci biti pohranjeni i kako će biti napravljena sigurnosna kopija podataka (<i>backup</i>) tijekom istraživanja? Koji su kapaciteti čuvanja podataka kojim raspolazete? Kojim se procedurama koristite za sigurnosnu kopiju (<i>backup</i>)?	Podatci dostupni u fizičkom obliku (laboratorijski dnevници) bit će pohranjeni isključivo u tom obliku, odnosno po potrebi skenirani i spremljeni kao <i>backup</i> na OneDrive. Sirovi podatci bit će pohranjeni na računalima uz instrumente na kojima su istraživanja provedena. Sirovi i obrađeni podatci bit će pohranjeni i na računalima istraživača koji su sudjelovali u tom dijelu istraživanja te će sirovi podatci biti spremljeni uz finalne verzije obrađenih podataka i na OneDrive dostupan članovima istraživačke skupine. Podatci će biti dostupni na računalima vezanima uz instrumente najkraće do objave znanstvenog rada u kojemu su isti rezultati iskazani. Spremanje sigurnosnih kopija je planirano na eksternim diskovima (nekoliko njih, kapaciteta 2–4 TB) te na OneDrive platformi. Postupak izrade sigurnosnih kopija odvija se ručno, a za isto su zaduženi svi članovi istraživačke skupine.
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?	Podatci će se čuvati u izvornom obliku u kojemu su zabilježeni/spremljeni. Sirovi podatci na računalima vezanima uz instrumente čuvat će se najmanje dvije godine od objave znanstvenog rada u kojemu su isti rezultati iskazani. Planira se iste rezultate čuvati na svim prethodno navedenim mjestima minimalno 10 godina. U iznimnim slučajevima nedostatka prostora za pohranu na računalima vezanima uz instrumente na tom će mjestu biti nešto ranije obrisani, a sačuvani na drugim mjestima (osobna računala i <i>backup</i> lokacije).
4.	Dijeljenje i ponovna uporaba podataka	
	Kako i gdje će se podaci dijeliti? Na kojem repozitoriju planirate dijeliti podatke? Kako će potencijalni korisnici doznati za podatke?	Sirovi i obrađeni podatci neće se dijeliti izvan istraživačke skupine. Konačni rezultati istraživanja bit će prezentirani u znanstvenim radovima, ocjenskim radnjama i na konferencijama. Sve ocjenske radnje nalazit će se na nacionalnoj infrastrukturi Digitalni akademski arhiv i repozitorij (Dabar). Evidencija svih diseminacijskih aktivnosti i objavljenih radova bit će dostupna na web stranici projekta povezanoj s Hrvatskom znanstvenom bibliografijom (CROSBİ). U slučaju potrebe za uvidom u podatke na kojima su temeljeni rezultati prezentirani u znanstvenim radovima, ocjenskim radnjama i na konferencijama, isti će biti dostupni na zahtjev i podijeljeni na odgovarajućoj platformi.
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila,	Ne postoje takvi podatci.

	povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i> .	Potvrđujem.
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji održava neprofitna organizacija (ako ne, objasnite zašto ne možete dijeliti podatke na digitalnom repozitoriju koji nije komercijalan).	Podatci se neće dijeliti na repozitoriju koji održava neprofitna organizacija isključivo iz razloga što je na razini fakulteta organizirano dijeljenje podataka na platformama koje održava Microsoft (OneDrive, Sharepoint, Office365, ...). Na taj je način osigurana veća sigurnost podataka, a pristup podacima osiguran je svim članovima istraživačke skupine. Navedena je platforma besplatna za korištenje svim članovima istraživačke skupine.

Ref:

[1] Celjak, D., Dorotić Malič, I., Matijević, M., Poljak, Lj., Posavec K. i Turk, I.: „Istraživački podaci - što s njima?“ [Istraživački podaci - što s njima? : priručnik o upravljanju istraživačkim podacima | Digitalni repozitorij Srca \(unizg.hr\)](#)