

Plan upravljanja istraživačkim podacima

Biljan, Ivana

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2023**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:386764>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2025-01-05**



Repository / Repozitorij:

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



Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Ivana Biljan
	Matična organizacija	Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
	Naziv projekta	IP-2020-02-4467, Od aromatskih spojeva s dušikom do novih funkcionalnih organskih materijala
	Upravitelj podacima	Ivana Biljan, e-mail: ibiljan@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>Podaci prikupljeni istraživanjem mogu se svrstati u nekoliko kategorija:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. reakcijski uvjeti za sintezu produkata 2. spektroskopska karakterizacija priređenih spojeva 3. strukturna i termička karakterizacija priređenih spojeva 4. mikroskopska i elipsometrijska karakterizacija adsorbiranih spojeva na površini 5. rezultati dobiveni molekulskim modeliranjem <p>Podaci u kategoriji 1 bit će dokumentirani u laboratorijskim dnevnicima (tekstualne/pdf datoteke). Prikupljeni podaci u kategorijama 2, 3 i 4 bit će pohranjeni u digitalnom obliku u originalnom formatu dobivenom izravno s instrumenta, odnosno konvertirani u odgovarajući tekstualni format. Spektroskopski podaci iz kategorije 2 bit će pohranjeni u formatima sp, ASC i fid. Podaci iz kategorije 3 bit će pohranjeni u formatima rd, xy, xrdml, csv, dat (difrakcija rendgenskog zračenja na polikristalnom uzorku), rodhypix, hypix, hkl, ins, res, cif (difrakcija rendgenskog zračenja u monokristalom uzorku) te tad, txt, csv, dat, ascii (TG/DTA). Podaci iz kategorije 4 bit će pohranjeni u formatima spm (AFM i STM mikroskopija) i txt (elipsometrija) te će se po potrebi konvertirati u druge formate. Za kategorije 2 i 3 bit će potrebno oko 500 MB prostora za sve podatke vezane uz spektroskopsku, strukturnu i termičku karakterizaciju spojeva. Procjenjujemo da će za kategoriju 4 biti potrebno oko 1 GB prostora za AFM, STM i elipsometrijska mjerenja. Podaci dobiveni molekulskim modeliranjem (kategorija 5) obuhvatit će ulazne i izlazne tekstualne datoteke za program Gaussian (com, log, fchk, cube). Za program CRYSTAL17 pohranit će se tekstualne datoteke (d12, out, gui, f98, hessopt, optinfo, elainfo, SCFLOG, xyz, runlog), odnosno binarne datoteke (f20, f9). Podaci će biti vizualizirani programima GaussView, Chem3D, VESTA te konvertirani u grafičke datoteke (tiff, png ili jpeg). Obradeni računalni</p>

		podaci snimit će se u izvornim formatima datoteka pomoću programa Excel, PowerPoint i Word. Za ovu kategoriju očekuje se da zauzme oko 300 GB.
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	<p>Opažanja tijekom izvođenja kemijskih reakcija upisivat će se ručno u laboratorijske dnevnik i potom skenirati ili će se upisivati direktno u elektroničke datoteke.</p> <p>Podaci IR spektroskopskih mjerenja prikupljat će IR spektrometrom i obrađivati u matičnom programu <i>Perkin Elmer Spectrum IR</i>.</p> <p>Podaci NMR spektroskopskih mjerenja prikupljat će se NMR spektrometrom i obrađivati u matičnom programu <i>TopSpin</i>.</p> <p>Difrakcijski podaci prikupljat će se s difraktometrima i obrađivati u matičnim programima (<i>Data Collector</i>, <i>CrysAlisPRO</i>, <i>DiffraCT</i>).</p> <p>Podaci termičke analize prikupljat će se odgovarajućim instrumentima i obrađivati u matičnim programima <i>Star/Star Evaluation software</i> i <i>TA60</i>.</p> <p>Podaci AFM i STM mjerenja prikupljat će se AFM/STM mikroskopom pomoću programa <i>NanoScope software</i> te obrađivati u programu <i>NanoScope Analysis</i>.</p> <p>Elipsometrijski podaci prikupljat će se elipsometrom i obrađivati u matičnom programu <i>Gemp</i>.</p> <p>Rezultati molekuskog modeliranja bit će generirani na računalnim serverima u sklopu matične institucije i/ili na računalnom klasteru <i>Isabella</i> u matičnim programima, npr. <i>Gaussian16</i>, <i>CRYSTAL17</i>, itd. Numerički podaci bit će ekstrahirani iz programa za vizualizaciju ili pomoću skripti koje će se izvesti u operativnom sustavu <i>Linux</i> te naknadno obrađeni u programu <i>Excel</i>.</p> <p>Podaci će biti zapisani u sustavno imenovane datoteke i mape koji će u imenu sadržavati jedinstvenu oznaku spoja, kraticu korištene metode te eksperimentalne/računalne uvjete.</p> <p>Reducirani skupovi podataka bit će pohranjeni na središnjem laboratorijskom računalu te na stolnim računalima istraživača. Konačni rezultati bit će zapisani tablično ili grafički u <i>Word</i> ili <i>PowerPoint</i> datoteke.</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>Nakon objavljivanja publikacije, reducirani skup podataka bit će pohranjen u mapu nazvanoj prema referenci publikacije. Podaci će biti hijerarhijski grupirani u podmape nazvane prema prethodno dogovorenoj konvenciji (naziv provedene eksperimentalne ili računalne procedure, npr. IR, NMR, PXRD, TGA, AFM, STM, itd. i jedinstvena oznaka spoja).</p> <p>Prema potrebi, dokumenti s dodatnim objašnjenjima bit će pridruženi eksperimentalnim i teorijskim podacima. U mapi će biti dostupan dokument (tekstualna, Word i/ili PowerPoint datoteka) u kojem se opisuje korištena metodologija i program kojim su podaci prikupljeni, odnosno dalje analizirani, identifikacija istraživača i datum provedenog istraživanja.</p>
2.	Pravna i sigurnosna pitanja	

	<p>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)?</p>	<p>Pri izvedbi ovog projekta neće se kršiti etička načela. U sklopu projekta nije planirano prikupljanje ni obrada osjetljivih osobnih podataka. Podatke (sintetske, eksperimentalne i računalne) generirat će istraživači na projektu sukladno važećem radnom planu u skladu s postojećim licencama za rad na odgovarajućim uređajima i s odgovarajućim programima.</p>
	<p>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>	<p>Podaci će se pohraniti u centraliziranom sustavu u sklopu Microsoft Office 365 usluge koja je omogućena akademskim institucijama. U sklopu usluge omogućen je pristup na oblak <i>OneDrive</i> uz prijavu pomoću AAI@EduHr elektroničkog identiteta. Dodatno, stolna računala istraživača i središnja laboratorijska računala zaštićena su lozinkama.</p>
	<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 ograničenja primjenjivati na ponovnu uporabu osobnih podataka?</p>	<p>Ne očekujemo da će rezultati istraživanja dovesti do patenta. Ostali problemi intelektualnog vlasništva rješavat će se sukladno preporukama matične institucije. Rezultati istraživanja bit će objavljeni u znanstvenim časopisima, a autorska prava bit će regulirana sukladno pravilima izdavača.</p>
3.	Pohrana i čuvanje podataka	
	<p>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</p>	<p>Laboratorijski dnevnicu čuvat će se u istraživačkom laboratoriju glavnog istraživača. Podaci računalnih istraživanja bit će pohranjeni na serveru s kojeg će se redovito raditi sigurnosne kopije na još jedno udaljeno stolno računalo, na vanjski disk i bit će provedena stalna sinkronizacija podataka na <i>OneDrive</i> računalni oblak (1 TB). Ostali elektronički podaci pohranjivat će se na stolnom računalu glavnog istraživača koji na tjednoj bazi izrađuje sigurnosne kopije na vanjskom disku. Podaci će biti trenutno sinkronizirani na <i>OneDrive</i> računalnom oblaku (1 TB) te dodatno na prijenosno računalo glavnog istraživača.</p>

	koristite za sigurnosnu kopiju (<i>backup</i>)?	
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?	Nakon isteka projekta sirovi podaci i reducirani skup podataka (<i>Excel, Word, PowerPoint</i> ili <i>pdf</i>) arhivirat će se na serveru za pohranu podataka u laboratoriju glavnog istraživača. Rezultati istraživanja (publikacije, doktorske disertacije, diplomski radovi, radovi za Rektorovu nagradu) bit će dugoročno pohranjeni na nacionalnoj infrastrukturi Digitalni akademski arhivi i repozitoriji — Dabar u obliku pdf datoteka.
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?	Konačnu verziju skupa podataka voditelj projekta podijelit će putem institucijskog repozitorija PMF-a u nacionalnom sustavu Dabar gdje će biti pohranjene i publikacije i ostala projektna dokumentacija. Institucijski repozitorij u sustavu Dabar odabrali smo jer podržava FAIR principe: skupovima dodjeljuje trajni identifikator URN:NBN, osigurava vidljivost podataka putem OpenAIRE portala i Google Scholar a te tražilice dabar.srce.hr, a ujedno doprinosi vidljivosti i transparentnosti rada PMF-a.
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	Podaci neophodni za bilo koju publikaciju bit će dostupni u trenutku objavljivanja. Svi neobjavljeni podaci pohranit će se u repozitoriju na 12 mjeseci od završetka projekta.
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima FAIR-a.	Koristit će se Digitalni akademski arhivi i repozitoriji – Dabar koji omogućava pohranu svih objekata u skladu s FAIR načelima.
	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).	Koristit će se Digitalni akademski arhivi i repozitoriji – Dabar koji omogućava pohranu svih objekata u skladu s FAIR načelima.

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 \(unizg.hr\)](#)