

Plan upravljanja istraživačkim podacima - PREBIOMECEM

Užarević, Krunoslav

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2023**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:241:090262>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-09-30**



Repository / Repozitorij:

[Fulir DATA - Ruđer Bošković Institute Research Data
Repository](#)

Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Krunoslav Užarević
	Matična organizacija	Institut Ruđer Bošković, Zagreb
	Naziv projekta	Važnost mehanokemijske reaktivnosti u prebiotičkoj kemijskoj evoluciji i njezin prijenos na održivu kemijsku proizvodnju s niskim emisijama (PREBIOMECEM)
	Upravitelj podacima	Krunoslav Užarević; krunoslav.uzarevic@irb.hr
1.	Prikupljanje podataka i dokumentacija	
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka)	<p>Prikupljat će se eksperimentalni podaci dobiveni analizama pomoću difrakcije na jediničnim kristalima i polikristaliničnim uzorcima, zatim spektroskopski podaci (FTIR, NMR, Raman, MS), podaci termičkih i kalorimetrijskih analiza, te podaci dobiveni vremenski razlučenim metodama praćenja reakcija u čvrstom stanju (difrakcijski, spektroskopski i termički podaci). Dodatno će se prikupljati podaci dobiveni kvantno-mehaničkim izračunima i molekulsko-dinamičkim simulacijama.</p> <p>Format podataka prikupljenih difrakcijskim metodama je .xrdml ili .tiff (polikristal) i .cif, .res ili .dat (jedinični kristal). Podaci prikupljeni spektroskopskim metodama dolaze u formatu .sp (FTIR), .dat ili .xy (Raman), .pdf (MS) te .fid, .log i .txt (NMR). Podaci termičkih i kalorimetrijskih analiza dolaze u formatu .stad, .csv i .txt In situ dobiveni podaci su u formatu .tiff, .xy, .csv i .txt. Opseg 1 MB-1 GB po setu, 2 TB ukupno.</p> <p>pDFT o geometrijskim optimizacijama kristalnih struktura i izračunima njihovih fizikalnih svojstava su u formatu *.cell i *.cif, te *.castep datoteka s podacima o tijeku optimizacije. 2) Podaci o izračunu spektroskopskih i magnetskih svojstava materijala. Podaci dobivenim molekulsko-dinamičkim simulacijama su u formatima .mdcdr, .dat, oko 200 MB po setu, 1 TB ukupno.</p>
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	<p>Svi podaci se prikupljaju na atestiranim instrumentima specifično namijenjenim za pojedine vrste analiza. Iako nisu jedini koji se planiraju koristiti, za difrakcijske pokuse će se podaci prikupljati na Panalytical AERIS Research difraktometru (polikristal) u Bragg-Brentano geometriji te biti pohranjeni kao .xrdml datoteke te na Rigaku XtaLAB Synergy S opremljenog četvorokružnim goniometrom, u kappa konfiguraciji, te će biti obrađeni putem OLEX2 ili sličnih programskih paketa dajući .cif, .res i .fcf datoteke. Za FTIR se planira koristiti primarno Perkin-Elmer Spectrum Two uređaj; za Raman spektroskopiju će se primarno koristiti OceanOptics Maya2000 Pro spektrometar, a za NMR uređaji dostupni u NMR centru. Svi podaci, uključujući one prikupljene računalnim simulacijama i kvantno-mehaničkim računima se planiraju pohranjivati na računala istraživača i na zajednički repozitorij sustav IRB-a gdje će biti na raspolaganju svim istraživačima uključenim u projekt. Podaci će biti organizirani prema dijelu i specifičnoj aktivnosti projekta, te će u nazivu imati uključen datum prikupljanja, jedinstvenu šifru uzorka, te osobu odgovornu za prikupljanje i obradu podataka.</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)	Uz podatke će biti pohranjene i tekstualne datoteke te objavljeni radovi u kojima će detaljno biti opisana metodologija analize i način interpretacije podataka.
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 ne uključuje prikupljanje i obradu osobnih podataka nego je fokusiran na karakterizaciju materijala sintetiziranih unutar projektnog prijedloga koji nisu podložni sporazumima o povjerljivosti nego će biti učinjeni javnima po objavljivanju znanstvenih radova i diseminaciji rezultata.
	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?	Podaci će biti pohranjeni u <i>cloud</i> sustavu za pohranu MojOblak Instituta Ruđer Bošković. Pristup podacima je zaštićen i slijedi najbolje prakse u pogledu upravljanja identitetom. Naš centralni sustav pohranjivanja podataka ima dostatnu zalihost, vrši se zrcaljenje i stalno se nadzire. Sva računala na kojima se prikupljaju i obrađuju podaci zaštićena su lozinkom, kao i vanjski memorijski diskovi na kojima će podaci dodatno biti pohranjeni.
	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?	Projekt nema visok potencijal za zaštitu intelektualnog vlasništva. U slučaju da se pojavi takva mogućnost, podjela autorskih prava i intelektualnog vlasništva će se odlučiti uz pomoć administracije i nadležnih tijela na Institutu Ruđer Bošković i ostalim uključenim institucijama.
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?	Podatke korištene za objavu publikacija ćemo čuvati trajno u institucijskom repozitoriju Instituta Ruđer Bošković na sustavu MojOblak. Podaci će dodatno biti sačuvani na dva memorijska diska i zaštićeni lozinkama. Većinu podataka pretvorit ćemo u .csv format i čuvat ćemo u tom obliku, a strukture spojeva ćemo pohraniti u CCDC bazu.

	Kojim se procedurama koristite za sigurnosnu kopiju (<i>backup</i>)?	
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?	Podatke korištene za objavu publikacija ćemo čuvati u institucijskom repozitoriju Instituta Ruđer Bošković na sustavu MojOblak. Podaci će dodatno biti sačuvani na dva memorijska diska i zaštićeni lozinkama. Većinu podataka pretvorit ćemo u .csv format i čuvat ćemo u tom obliku, a strukture spojeva ćemo pohraniti u CCDC bazu.
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?	Podatci korišteni za objavu publikacija bit će pohranjeni u sustavu MojOblak i moći će im se pristupiti na zahtjev putem dijeljenja poveznice. Potencijalni okrisnici će za podatke saznati putem diseminacijskih aktivnosti (konferencijskih izlaganja i publikacija).
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	N/A
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR</i> -a.	DA.
	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).	DA.

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 \(unizg.hr\)](#)