

Plan upravljanja istraživačkim podacima -TOPOXAL-SYPROXID

Jurić, Marijana

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2024**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:241:600943>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-02**



Repository / Repozitorij:

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



DIGITALNI AKADEMSKI ARHIVI I REPOZITORIJI

Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Marijana Jurić
	Matična organizacija	Institut Ruđer Bošković
	Naziv projekta	Topološka raznolikost oksalatnih spojeva: sinteza, svojstva i upotreba za okside
	Upravitelj podacima	Marijana Jurić, e-mail: Marijana.Juric@irb.hr
1.	Prikupljanje podataka i dokumentacija	<p>Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navедите format, vrstu i opseg podataka)</p> <p>Podaci prikupljeni istraživanjima provedenim u sklopu ovog projekta mogu se svrstati u sedam kategorija:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Različiti parametri reakcija za sintezu željenih produkata (kao što su korišteni reaktanti, njihovi omjeri, otapala, temperatura provođenja reakcije itd.); 2. Spektroskopska karakterizacija svih produkata pripadajućih tijekom projekta; 3. Strukturna karakterizacija spojeva pripadajućih tijekom projekta; 4. Termička karakterizacija odabranih spojeva pripadajućih tijekom projekta; 5. Magnetska karakterizacija odabranih spojeva pripadajućih tijekom projekta; 6. Električna karakterizacija odabranih spojeva pripadajućih tijekom projekta; 7. Fotokatalitička karakterizacija odabranih spojeva pripadajućih tijekom projekta. <p>Podaci u kategoriji 1 bit će dokumentirani u laboratorijskim dnevnicima.</p> <p>Spektroskopski podaci u kategoriji 2 bit će snimljeni u formatu [.sp] i konvertirani u format [.ASC] za daljnju uporabu.</p> <p>Podaci u kategoriji 3 bit će snimljeni u [.hypix] formatu za difrakciju u monokristalu, a nakon rješavanja kristalnih struktura bit će pohranjeni u obliku [.cif], dok će se podaci difrakcije u prahu snimati u [.xrdml] formatu te će se konvertirati u [.xy] format.</p> <p>Podaci u kategoriji 4 bit će snimljeni u [.tad] formatu za TG/DTA te će se konvertirati u [.txt] za daljnju uporabu.</p> <p>Magnetsku karakterizaciju (kategorija 5) radit će naši kolege i suradnici fizičari s Fizičkog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.</p> <p>Podaci u kategoriji 6 bit će snimljeni u [.EPS] formatu (impedancijska mjerena) te će se konvertirati u</p>

		<p>[.dat] za daljnju uporabu.</p> <p>Podaci u kategoriji 7 bit će snimljeni u [.DSW] formatu (UV-Vis spektroskopija) te će se konvertirati u [.csv] format za daljnju obradu.</p> <p>Procjenjujemo da će za 1. kategoriju biti potrebna 3 dnevnika po godini projekta (100 stranica A4 formata), za 2., 4., 6. i 7. kategorije oko 20 MB prostora po kategoriji, a za 3. kategoriju 200–500 MB prostora po jednoj strukturi.</p>
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	<p>Zapisi opažanja odnosno provedenih eksperimenata digitaliziraju se skeniranjem ručno pisanih tekstova u laboratorijskim dnevnicima.</p> <p>Podaci za infracrvenu spektroskopiju prikupljaju se s instrumenta koji ih generira i obrađuje u matičnom programu Opus 6.5 u formatu [.dpt].</p> <p>Podaci za difraciju u monokristalu prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnom programu CrysAlisPRO, verzija 1.171.41.120a, u formatu [.hypix]. Ovi podaci se zatim procesiraju u istom programu pri čemu se generira format [.hkl], koji se dalje koristi za rješavanje strukture spoja.</p> <p>Podaci za difraciju u prahu prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnom programu Data Collector, verzija 7.0, u formatu [.xrdml].</p> <p>Podaci termičke (TG/DTA) analize prikupljaju se s instrumenta koji ih generira i obrađuje u matičnom programu TA60, verzija 2.01, u formatu [.tad].</p> <p>Podaci impedancijske spektroskopije prikupljaju se s instrumenta koji ih generira i obrađuje u matičnom programu WinDETA, verzija 6.02, u formatu [.eps].</p> <p>Podaci za maksimalnu apsorpciju prikupljaju se s instrumenta koji ih generira i obrađuje u matičnom programu Scan, verzija 5.1.3.1042, u formatu [.DSW].</p> <p>Svaka započeta eksperimentalna procedura, odnosno reakcija bit će obilježena odgovarajućom oznakom u laboratorijskom dnevniku i to tako da sadrži redni broj procedure, inicijale osobe koja provodi eksperiment, te opisne komentare vezane uz samu reakciju, npr.: 1-MJ-Cu-bpy-Fe, 2-MJ-Cr-terpy-ox(prizme) itd.</p> <p>Mjerenja (IR, TG/DTA, UV/Vis, PXRD i ostala) koja će biti napravljena iz produkata određene reakcije također će biti označena tako i pohranjena u odgovarajuću mapu.</p> <p>Eksperimentalni podaci koji odgovaraju identificiranom željenom produktu reakcije pohraniti će se u institucijski repozitorij iz mjernog uređaja, dok će ostali podaci ostati pohranjeni na računalu gdje je mjerjenje napravljeno i na računalima istraživača.</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)	Osim podataka pojedinih mjerena u [.txt] formatu koji su korišteni za pripremu publikacija, pohranit će se i [.txt] podaci koji opisno objašnjavaju što je mjereno i pod kojim uvjetima.
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)?	Pri izvedbi ovog projekta neće se kršiti etička načela. Tijekom provođenja projekta ne prikupljaju se, ne obrađuju se, ne čuvaju se niti ne dijele osjetljivi ili osobni podataka, te ne postoji sporazum o povjerljivosti. Podatke (vezane uz sinteze spojeva i njihovu karakterizaciju različitim eksperimentalnim metodama) stvaraju i obrađuju istraživači uključeni u projekt, što i jest svrha istraživanja.
	Kako ćete regulirati pristup podacima i njihova sigurnost? Koji su potencijalni rizici koje treba uzeti u obzir? Kako ćete osigurati sigurnost pohrane osjetljivih podataka?	Podaci će se pohraniti u centraliziranom sustavu za pohranu <i>MojOblak</i> kojim upravlja Centar za znanstvene informacije Instituta Ruđer Bošković. Pristup podacima upravlja se preko identiteta ustanove koji je siguran sustav i slijedi najbolje prakse u pogledu upravljanja identitetom. Naš centralni sustav pohranjivanja podataka ima dostatnu zalihost, vrši se zrcaljenje i stalno se nadzire. Osim toga, sva računala u laboratoriju na kojima se prikupljaju i obrađuju podaci zaštićena su lozinkom.
	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	Ne očekuje se da će rezultati istraživanja dovesti do patenta. Ostali problemi intelektualnog vlasništva će se rješavati prema preporukama Instituta Ruđer Bošković.

	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 raspolažete? Kojim se procedurama koristite za sigurnosnu kopiju (<i>backup</i>)?	Laboratorijski dnevnički se čuvaju u laboratoriju glavnog istraživača. Elektronički podaci pohraniti će se na računalu glavnog istraživača, koji mjesечно izrađuje sigurnosne kopije. Osim toga, istraživači će se koristiti laboratorijskim prostorom na institucijskom repozitoriju za sekundarnu pohranu podataka. Laboratorij glavnog istražitelja ima na raspolaganju 6 GB prostora za mrežnu pohranu podataka koji se može i dodatno proširiti, te preko 10 TB prostora na tvrdom disku. Rezultati projekta pohraniti će se na institucionalnom repozitoriju koji redovito izrađuje sigurnosne kopije.
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?	Podatke korištene za objavu publikacija ćemo čuvati trajno u institucijskom repozitoriju Instituta Ruđer Bošković uspostavljenom na sustavu MojOblak. Većinu podataka pretvoriti ćemo u [.txt] datoteke i čuvati ćemo u tom obliku, a strukture spojeva u [.cif] obliku.
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?	Podaci korišteni za objavu publikacija bit će pohranjeni u sustavu MojOblak i moći će im se pristupiti na zahtjev putem dijeljenja poveznice. Potencijalni korisnici za podatke će doznati iz publikacije u kojoj su objavljeni.
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	Nema ograničenja.
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima FAIR-a.	DA.
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji održava neprofitna organizacija (ako ne, objasnite zašto ne možete dijeliti podatke na digitalnom	DA.

repozitoriju koji nije komercijalan).

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 \(unizg.hr\)](#)