

# Plan upravljanja istraživačkim podacima - MULTICENTRICBONDING

---

**Molčanov, Krešimir**

**Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima**

*Publication year / Godina izdavanja:* **2024**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:241:971250>

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

*Download date / Datum preuzimanja:* **2025-03-04**



*Repository / Repozitorij:*

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

Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Krešimir Molčanov
	Matična organizacija	Institut Ruđer Bošković
	Naziv projekta	Multicentrične kovalentne veze i $\pi$ -interakcije određuju fizička svojstva kristala organskih radikala
	Upravitelj podacima	Krešimir Molčanov, e-mail: kmolcano@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>Podaci prikupljeni istraživanjima u sklopu projekta mogu se svrstati u pet kategorija:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. parametri sinteze (npr. korišteni reaktanti, otapala, temperatura, itd.)</li> <li>2. strukturna karakterizacija pripremljenih spojeva</li> <li>3. elektronska gustoća određena eksperimentalno (rengdenskom difrakcijom) ili teorijski</li> <li>4. magnetska karakterizacija odabranih spojeva pripremljenih tijekom projekta</li> <li>5. električna karakterizacija odabranih spojeva pripremljenih tijekom projekta</li> </ol> <p>Podaci 1. u kategoriji 1. bit će dokumentirani u laboratorijskim dnevnicima.            Podatci u kategoriji 2. bit će snimljeni u [.xrdml] formatu (za difrakciju u prahu) i [.hypix] formatu (za difrakciju u monokristalu), a nakon rješavanja kristalnih struktura bit će pohranjeni u obliku [.cif] datoteke. Podatci difrakcije u prahu će se konvertirati u [.xy] format.            Podatci u kategoriji 3. bit će snimljeni [.hypix] formatu (za difrakciju u monokristalu), a nakon multipolarnog utočnjavanja bit će pohranjeni u obliku [.par] i [.cif] datoteke. Mape eksperimentalne i teorijske elektronske gustoće bit će pohranjene u formatima [.four] i [.xplor].            Podaci u kategoriji 4. bit će snimljeni i pohranjeni u formatima [.txt] (EPR spektroskopija) i [.rw.dat] (SQUID); obrađena mjerenja bit će pohranjena u formatu [.opj].            Podatci u kategoriji 5. bit će snimljeni u [.EPS] formatu (za impedancijska mjerenjate će se konvertirati u [.dat] za daljnju uporabu.            Procjenjujemo da će za 1. kategoriju biti potreban 1 dnevnik po godini projekta (60 stranica A4 formata), za kategoriju 2. 150-200 GB podataka (500 MB - 1 GB po skupu difrakcijskih podataka za svaki monokristal) za sirove podatke te 100-200 MB za kristalne strukture pohranjene u formatu [.cif].            Za 3. kategoriju očekujemo 100-150 GB podataka (5-10 GB po skupu podataka za određivanje elektronske gustoće) za sirove podatke te oko 1 GB za utočnjene strukture.</p>

		Za 4. i 5. kategoriju očekujemo otprilike 20 MB prostora po kategoriji.
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	<p>Opažanja i zapisi eksperimenata (sinteza) digitaliziraju se skeniranjem iz ručno pisanih zapisa (laboratorijskog dnevnika).</p> <p>Podaci za difrakciju u monokristalu (strukturna karakterizacija i određivanje elektronske gustoće) prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnom programu <i>CrysAlisPRO</i>, u formatu [.hypix]. Ovi podatci se zatim procesiraju u istom programu i generira se [.hkl] format, koji se dalje koristi za rješavanje i utočnjavanje strukture spoja.</p> <p>Podaci za difrakciju u prahu prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnom programu <i>Data Collector</i>, u formatu [.xrdml].</p> <p>Podaci impedancijske spektroskopije prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnom programu <i>WinDETA</i>, u formatu [.eps], te feroelektričnog testiranja u programu <i>aixPlover</i>, u formatu [.tfh] i [.tfp].</p> <p>Svaka započeta eksperimentalna procedura, odnosno sinteza biti 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.: TMPD_Br4Q, DDQ_2-pic itd.</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 mjerenja te zapisa iz laboratorijskih dnevnika, pohranit će se publikacije (u PDF formatu, 12 mjeseci nakon objave u časopisu) i diseminacije (predavanja, posteru u PDF formatu) proizašle iz istraživanja. Podatci korišteni za grafove i slike u publikaciji, ustupit će se u mapi nazvanoj prema referenci publikacije (npr. mapa IUCrJ_9_(2022)_449-467 za rad objavljen u <i>IUCrJ</i> , <b>9</b> , 2022, 449-467), gdje će biti sortirani u podmape nazvane prema metodi na koju se odnose (npr. cifovi, magnetizam, vodljivosti itd.). Ako postoji više datoteka u pojedinoj podmapi nazvat će se prema oznaci spoja koja je korištena u toj publikaciji (npr. 1, 2 itd.) ili će im u nazivu biti dodan opisni komentar kako bi se nedvosmisleno znalo na što se podatak odnosi (npr.1-298 K za mjerenja na 298 K).
2.	Pravna i sigurnosna pitanja	
	Jeste li ograničeni sporazumom o povjerljivosti? Imate li potrebna dopuštenja za prikupljanje, obradu, čuvanje i dijeljenje podataka? Jesu li	Pri izvedbi ovog projekta neće se kršiti etička načela. U projektu nema prikupljanja ni obrade osjetljivih ili osobnih podataka. Podatke (sinteze i eksperimentalna mjerenja) stvaraju i obrađuju istraživači uključeni u projekt, što i jest svrha istraživanja.

	<p>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>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 za pohranu MojOblak 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 podatci zaštićena su lozinkom.</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 očekuje se da će rezultat istraživanja dovesti do patenta. Ostali problemi intelektualnog vlasništva će se u rješavati prema preporukama Instituta Ruđer Bošković.</p>
3.	<p>Pohrana i čuvanje podataka</p>	
	<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 koristite za sigurnosnu kopiju (<i>backup</i>)?</p>	<p>Laboratorijski dnevnicu se čuvaju u laboratoriju glavnog istraživača. Elektronički podaci pohranit će se na računalo glavnog istraživača, koji mjesečno izrađuje sigurnosne kopije. Osim toga, istraživači će se koristiti laboratorijskim prostorom na institucijskom repozitoriju za sekundarnu pohranu podataka. Laboratorij glavnog istražitelja ima na raspolaganju 1 GB prostora za mrežnu pohranu podataka koji se može i dodatno proširiti, te preko 10 TB prostora na tvrdom disku. Sirovi difrakcijski podaci bit će pohranjeni na računalima koja upravljaju rendgenskim difraktometrima te će zbog sigurnosti biti kopirani na prijenosne tvrde diskove. Rezultati projekta pohranit će se na institucionalnom repozitoriju koji redovito izrađuje sigurnosne kopije.</p>

	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. Kristalografske podatke čuvat ćemo u obliku CIF, FCF i PAR te će biti dodatno pohranjeni u međunarodnoj bazi podataka <i>Cambridge Structural Database</i> . Tablične podatke čuvat ćemo u OPj, XLS ili TXT obliku, a tekstualne u DOCX (Office Open XML) te PDF 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?	Konačnu verziju skupa podataka voditelj projekta podijelit će putem institucijskog repozitorija Instituta Ruđer Bošković uspostavljenog u sustavu FULIR Data gdje će biti pohranjene i publikacije i ostala projektna dokumentacija. Institucijski repozitorij u sustavu FULIR Data odabrali smo jer podržava FAIR principe: skupovima dodjeljuje trajni identifikator URN:NBN, osigurava vidljivost podataka putem OpenAIRE portala i Google Scholar a te tražilice <a href="https://data.fulir.irb.hr/">https://data.fulir.irb.hr/</a> , a ujedno doprinosi vidljivosti i transparentnosti rada Instituta Ruđer Bošković.
	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 <i>FAIR-a</i> .	Potvrđujemo. Koristi će se digitalni repozitorij Instituta Ruđer Bošković uspostavljen u sustavu FULIR Data.
	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).	Potvrđujemo. Digitalni repozitorij FULIR Data kreiran je u sklopu sustava Digitalnih akademskih arhiva i repozitorija Dabar, koji održava Sveučilišni računski centar u Zagrebu (SRCE).

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 \(unizg.hr\)](#)