**PLAN UPRAVLJANJA ISTRAŽIVAČKIM PODACIMA (PUP)**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Opće informacije | | |
|  | Ime i prezime predlagatelja | Matija Gredičak |
|  | Matična organizacija | Institut Ruđer Bošković |
|  | Naziv projekta | Organokatalitičke dearomatizacijske strategije inspirirane prirodnim spojevima |
|  | Upravitelj podacima | Matija Gredičak |
| 1. | Prikupljanje podataka i dokumentacija | |
|  | Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite formate, vrste i opseg svih podataka s kojima ćete raditi, a ne samo krajnji skup podataka koji će biti rezultat istraživanja) | Sirovi podaci bit će generirani na instrumentima za strukturnu karakterizaciju spojeva. Analitičke tehnike uključuju NMR, MS, HRMS, FT-IR, HPLC, polarimetar, rendgenski difraktometar, itd. Neobrađeni podaci zatim će se pretvoriti u čitljive podatke za svakog istraživača s kemijskim iskustvom korištenjem komercijalno dostupnog (i često besplatnog) softvera. Podaci će opisivati strukturnu karakterizaciju sintetiziranih spojeva (NMR pomaci, molekularna masa, infracrveni spektri, tališta, HPLC retencijska vremena, optička rotacija za kiralne spojeve, podaci X-zraka, itd.), kao i protokole DFT izračuna. |
|  | Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete, načine organiziranja podataka te alate i instrumente kojima ćete se koristiti za prikupljanje i obradu) | Podaci za sintetizirane spojeve prikupljat će se na gore navedenim instrumentima. Svim instrumentima rukuje kvalificirano osoblje. Instrumenti imaju redovito održavanje kako bi se osigurala kvaliteta i ponovljivost mjerenja. Ako kemijska reakcija zahtijeva određenu specifičnu aparaturu, aparatura će se fotografirati. Podaci će se obrađivati u komercijalno dostupnom softveru kako bi bili lako čitljivi. Softver koji se koristi može samo obrađivati podatke i ne dopušta manipulaciju podacima. |
|  | Koju ćete dokumentaciju i metapodatke izraditi osim podataka? (dokumentacija mora sadržavati informacije i standarde potrebne korisnicima kako bi mogli samostalno čitati i interpretirati podatke u budućnosti, primjerice, kodne knjige, *ReadMe* datoteke i sl.) | Metapodaci, kao niti upute o tome kako čitati podatke nisu primjenjivi na podatke koji će se generirati u ovom projektu. |
| 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 obrađuju informirani o tome i jesu li dali privolu? Kojim ćete se metodama koristiti u svrhu zaštite osjetljivih podataka (GDPR - posebne  kategorije osobnih podataka, navesti metode anonimizacije podataka)? | Ovaj projekt se ne bavi ovakvom vrstom podataka. |
|  | 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? | Pristup podacima bit će omogućen svim članovima istraživačkog tima tijekom izvođenja projekta. Oni će biti pohranjeni u internom, lozinkom zaštićenom oblaku/poslužitelju/tvrdom disku. Članovi tima bit će obavezni da ne dijele lozinku s osobljem koje nije dio projekta. |
|  | Kako ćete upravljati zaštitom autorskih prava i drugog intelektualnog vlasništva? Tko će biti vlasnik podataka? Koje će se licencije primjenjivati na podatke? Koja će se ograničenja primjenjivati na ponovnu  uporabu osobnih podataka? | Projektom nije predviđeno korištenje podataka trećih strana. Svi prikupljeni podaci su pod pravom intelektualnog vlasništva i u vlasništvu matične institucije članova projektnog tima. Dobiveni podaci ne spadaju u kategoriju licenciranja. |
| 3. | Pohrana i čuvanje podataka | |
|  | Kako će radne verzije podataka biti pohranjene tijekom projekta?  Kako će se napraviti sigurnosne kopije tih podataka (*backup*)?  Koja je očekivana količina podataka koja će se prikupiti i čuvati tijekom projekta (izraženo u MB/GB/TB)? | Podaci će biti pohranjeni na oblaku/poslužitelju/tvrdom disku zaštićenom lozinkom, i nikada na samo jednom mediju. Podaci će se sigurnosno kopirati mjesečno na izvanmrežne medije (vanjski tvrdi diskovi, USB memorije, ispisani podaci, itd.) kako bi se osigurala njihova sigurnost. Očekujemo do ukupno 2 GB neobrađenih podataka. |
|  | Kako će se završne verzije podataka dugotrajno pohraniti i čuvati (i nakon završetka projekta)?  U kojim će se formatima čuvati podaci? Koja je očekivana količina podataka koja će se trajno pohraniti (izraženo u MB/GB/TB)? | Neobrađeni podaci bit će u formatima datoteka kakve generiraju pojedini instrumenti. Datotečne ekstenzije su jedinstvene za odabranu analitičku tehniku, bez obzira na vrstu instrumenta koji se koristi (NMR spektri .fid, X-ray .cif, FTIR .csv, HPLC.run, MS .ms itd.). Instrumenti koji ne generiraju datoteke, već samo broj na ekranu (npr. polarimetar, aparat za mjerenje točke taljenja) bit će zapisani i spremljeni kao .docx ili .pdf datoteka. Sve ove datoteke mogu se otvoriti standardnim i komercijalno dostupnim softverom, koji je često besplatan. Neobrađeni podaci bit će pretvoreni u čitljive i/ili vizualne prikaze podataka (npr. spektre) koji sadrže sve potrebne informacije.  Nakon završetka projekta neće biti prikupljanja podataka. Neobrađeni podaci će se čuvati na eksternim diskovima i poslužiteljima u oblaku najmanje pet godina nakon završetka projekta. Nakon tih pet godina podaci će trajno ostati na eksternim medijima. |
| 4. | Dijeljenje i ponovna uporaba podataka | |
|  | Kako i gdje će se podaci dijeliti? Koji repozitorij će se koristit za dijeljenje podataka? Kako će potencijalni korisnici doznati za podatke? | Vrhunski časopisi u kojima planiramo objaviti rezultate projekta (izdavači American Chemical Society, Royal Society of Chemistry i Wiley) zahtijevaju da se neobrađeni podaci učitaju kao popratne informacije (*Supporting information*) uz znanstveni rad. Stoga će svi neobrađeni i obrađeni podaci biti dostupni kao dio znanstvenih publikacija, a svi ovi izdavači podatke o pratećim informacijama stavljaju na raspolaganje besplatno bez obzira na pretplatu na časopis. Neobrađeni podaci također će se dijeliti na otvorenom pristupnom repozitoriju FULIR Instituta Ruđer Bošković. |
|  | Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja. | Postojat će ograničenja u dijeljenju podataka ako će rezultati projekta biti predmet prijave patenta. |
|  | Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima *FAIR-a*. | Repozitorij podataka FULIR Instituta Ruđer Bošković usklađen je s načelima FAIR-a. |
|  | 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). | Repozitorij FULIR održava Institut Ruđer Bošković, koji je neprofitna organizacija. |