

# In silico aided design of CO<sub>2</sub> trapping substrates for catalyzed formation of carbonates and carbamates (IP-2019-04)

---

**Marković, Dean**

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

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

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:193:088485>

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

*Download date / Datum preuzimanja:* **2025-03-31**

*Repository / Repozitorij:*



[Repository of the University of Rijeka, Faculty of Biotechnology and Drug Development - BIOTECHRI Repository](#)



Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Dean Marković
	Matična organizacija	Sveučilište u Rijeci, Odjel za biotehnologiju
	Naziv projekta	In silico aided design of CO2 trapping substrates for catalyzed formation of carbonates and carbamates (IP-2019-04)
	Upravitelj podacima	Dean Marković, <a href="mailto:dean.markvic@biotech.uniir.hr">dean.markvic@biotech.uniir.hr</a>
1. Prikupljanje podataka i dokumentacija		
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka)	<p>Prikupljaju se podaci vezani uz projekt i to:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) <i>in silico</i> studije: računaju se mogući supstrati za Pd-katalizirane intra- i inermolekulske karbamacije i karbonacije uz upotrebu CO<sub>2</sub>; provode se kemijski računi o stabilnosti i geometriji reaktanata, međuprodukata i produkata u navedenim reakcijama. Računati će se i PES plohe kao i mogući mehanistički putevi. Računi će se provoditi u računalnim programima Gaussian i ORCA</li> <li>2) eksperimentalni kemijski podaci: <ol style="list-style-type: none"> <li>a) sinteza supstrata na temelju in silico podataka</li> <li>b) podaci o uvjetima reakcije (soli metala, ligandi, otapala, temperatura reakcija, CO<sub>2</sub> pritisak, itd)</li> <li>c) podaci o opsegu reakcija i iskorištenja (ispitivanje reakcija s različitim supstratima te reakcijska iskorištenja)</li> <li>d) karakterizacija spojeva (R<sub>f</sub> vrijednosti, boja spoja te kristalinična svojstva, NMR podaci, maseni spektri (HRMS i fragmentacija), IR, UV/VIS, elementarna analiza, temperature tališta i vrelišta)</li> <li>e) kemijske kinetike (NMR podaci)</li> </ol> </li> <li>3) eksperimentalni biološki <i>in vitro</i> podaci: <ol style="list-style-type: none"> <li>a) određivati će se biološka aktivnost sintetiziranih spojeva</li> </ol> </li> </ol> <p>Svaka osoba koja radi na projektu voditi će dnevnik rada u kojima će prema datumu i prema eksperimentalnom broju biti navedeni svi prikupljeni podaci za određeni eksperiment. Kompjuterski podaci čuvati će se na vanjskom HD disku pod identifikacijskom broju eksperimenta. Ovi sirovi podaci će se obrađivati pri pisanju izvješća, publikacija te prezentacija. Poštovati će se svi FAIR principi. Pronalazljivost, dostupnost, interoperabilnost te ponovna upotreba će biti osigurana kroz uvođenje članaka i popratnih informacija (Supporting information) u hrvatske (CROSBI, DABAR, HRČAK) i međunarodne baze podataka (Researchgate, PubMed, Google scolar, ORCID, Scopus, Scifinder, Reaxis, Web of Science, itd) koje će se mjesečno ažurirati.</p>

	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	Ovisno o eksperimentu podaci će se prikupljati računski (in silico studije, karakterizacija spojeva (NMR, maseni spektri (HRMS i fragmentacija), IR, UV/VIS, elementarna analiza i kemijske kinetike) te ručno (podaci o uvjetima reakcije, podaci o opsegu reakcija i iskorištenja, temperature tališta i vrelišta, eksperimentalni biološki <i>in vitro</i> podaci). Obrada i prikupljane podataka će se provoditi od provoditelja eksperimenta te će biti zavedene pod eksperimentalnim brojem u dnevnicima rada. Kako bi se osigurala kvaliteta podaci će biti provjereni (npr reakcije će biti ponovljene 3 puta). Svi pisani podaci će biti navedeni u dnevnicima rada te će biti kopirani i pohranjeni u digitalnom obliku na internom HD disku grupe kao i kompjuterski podaci. Sirovi podaci će biti sumirani u izvješćima, radovima i prezentacijama.
	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)	Za objavljivanje radova u časopisima biti će ustupljeni svi potrebni sirovi, očišćeni i obrađeni podaci prema potrebi i ustaljenim praksama: <ul style="list-style-type: none"> <li>a) opisi eksperimenata i eksperimentalnih procedura</li> <li>b) karakterizacija spojeva (Rf vrijednosti, boja spoja te kristalinična svojstva, NMR podaci, maseni spektri (HRMS i fragmentacija), IR, UV/VIS, elementarna analiza, temperature tališta i vrelišta)</li> <li>c) računski podaci</li> <li>d) podaci vezani uz sintezu produkata</li> <li>e) podaci o uvjetima reakcije (soli metala, ligandi, otapala, temperatura reakcija, CO2 pritisak, itd)</li> <li>f) podaci o opsegu reakcija i iskorištenja (ispitivanje reakcija s različitim supstratima te reakcijska iskorištenja)</li> <li>g) kemijske kinetike (NMR podaci)</li> <li>h) određivati će se biološka aktivnost sintetiziranih spojeva</li> </ul>
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)?	Nismo ograničeni sporazumom o povjerljivosti. Osobe čiji se podaci pohranjuju su informirani o tome te su dali privolu. U ovom istraživanju se ne koriste GDPR podaci.
	Kako će se regulirati pristup podacima i njihova sigurnost? Koji su potencijalni rizici koje treba uzeti	Opis eksperimenta i analizu podataka provodi član istraživačkog tima koji je proveo eksperiment i koji provodi daljnju obradu sirovih podataka. Svi članovi grupe imaju pristup internim sirovim, očišćenim, obrađenim, prezentacijskim i objavljenim podacima. Svi podaci se dijele i diskutiraju i na sastancima među članovima kako bi najbolje planirali novi

	u obzir? Kako ćete osigurati sigurnost pohrane osjetljivih podataka?	eksperimenti. Sigurnost podataka se rješava preko backup tvrdog diska na kojem su pohranjeni podaci grupe. Da bi se pristupilo HD grupe potrebna je lozinka. Radni dnevnicima se kopiraju i čuvaju se na tvrdom disku i kod voditelja projekta.
	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?	Autori imaju isključivo pravo korištenja svojeg djela te će dati specijalna odobrenja časopisima za objavu podataka. Vlasnici podataka su autori i voditelj projekta. U ovom istraživanju se ne koriste osobni podaci.
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? Kojim se procedurama koristite za sigurnosnu kopiju ( <i>backup</i> )?	Sigurnost podataka se rješava preko backup tvrdog diska na kojem su pohranjeni podaci grupe. Radni dnevnicima se kopiraju u digitalnom obliku i čuvaju na HDu i kod voditelja projekta. Tvrdi disk je kapaciteta 1 terabajta dok se backup provodi na 3 mjesečnoj bazi na drugi disk kapaciteta 500 GB. Za pristup disku postoji lozinka koju posjeduju svi članovi tima. Ne postoje ograničenja pristupu tvrdom disku na kojem su pohranjeni podaci od strane članova tima.
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?	Sve vrste podataka (sirovi, očišćeni, obrađeni, prezentacijski i objavljeni) će biti pohranjeni u originalnim prikupljenim formatima na tvrdom disku te na njegovom backupu.
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?	Svi članovi grupe imaju pristup internim prikupljenim podacima. Svi podaci, informacije i ideja se dijele i diskutiraju na sastancima među članovima kako bi se najbolje planirali novi eksperimenti. Sigurnost podataka se rješava kroz backup tvrdog diska na kojem su pohranjeni podaci grupe. Da bi se pristupilo HDu grupe potrebna je lozinka. Radni dnevnicima se kopiraju i čuvaju se na tvrdom disku i kod voditelja projekta. Objavljeni podaci su dostupni u časopisima, nacionalnim (CROSB, DABAR, HRČAK) i međunarodnim bazama podataka (Researchgate, PubMed, Google scholar, ORCID, itd) te tražilicama (Scifinder, Web of Science, Scopus, Reaxis itd.) te su tako dostupni svima zainteresiranima.
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila,	Današnja civilizacija je zasnovana na fosilnim gorivima dok je ugljik dioksid konačni produkt njihovog sagorijevanja. Pošto je CO <sub>2</sub> ujedno i jedan od najvažnijih uzročnika globalnog zagrijavanja i efekta staklenika, znanstvena istraživanja u CO <sub>2</sub> kemiji su vrlo intenzivna te mnogo grupa rade na sličnim istraživanjima. Kako bi se spriječila eventualna

	povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	zloupotreba podataka i krađa ideja neobjavljeni sirovi podaci se ne djela izvan grupe. Objavljeni članci i svi eksperimentalni podaci vezani uz članak kao i prezentacije će biti lako dostupne kroz nacionalne (CROSBI, DABAR, HRČAK) i međunarodne baze podataka (Researchgate, PubMed, Google scholar, ORCID, itd) te tražilicama (Scifinder, Web of Science, Scopus, Reaxis itd.).
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i> .	Kao što je već navedeno poštovati će se svi FAIR principi. Pronalazljivost, dostupnost, interoperabilnost te ponovna upotreba će biti osigurana kroz uvođenje članaka i popratnih informacija (Supporting information) u hrvatske (CROSBI, DABAR, HRČAK) i međunarodne baze podataka (Researchgate, PubMed, Google scholar, ORCID, Scopus, Scifinder, Reaxis, Web of Science, itd) koje će se mjesečno ažurirati.
	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).	Potvrđujem da ću koristiti nacionalne digitalne repozitorije (DABAR i Puh) za pohranu i čuvanje istraživačkih podataka.

Ref: 111

[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 \(unizg.hr\)](#)