



Forschungsdaten-Managementsystem

Archivsystem für Forschungsdaten

**Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie
im Forschungsverbund Berlin e.V.
(Leibniz-Institut)**

26. November 2019

**Dr. Thomas-Martin Kruel
Leiter EDV**



- Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie (<http://www.mbi-berlin.de>)
- Mitglied der Leibniz-Gemeinschaft (<http://www.leibniz-gemeinschaft.de>)
- Forschungsprofil:
Grundlagenforschung bei der Wechselwirkung von Laserlicht mit Materie; Entwicklung ultrakurzer und ultraintensiver Laser; Untersuchungen mit Röntgenlasern, freien Elektronen-Lasern und Synchrotronstrahlungsquellen.
- Mitarbeiter: ca. 185
 - Wissenschaftler: 81
 - 30 Principal Investigators (PI)
 - 22 Projektkoordinatoren
 - Doktoranden: 28
 - Techniker und nicht-wissenschaftliches Personal: ca. 75
- Wissenschaftliche Bereiche: 3
- Abteilungen: 10
- Forschungsgruppen: 6
- Projekte: 10
- 8500 qm Nutzfläche, darin 65 Labore



Am Anfang dachten wir:

„Archivspeicher ist leicht zu beschaffen“

und

„Archivierungssoftware muss es geben wie Sand am Meer:“

- Bibliotheken und Museen nutzen entsprechende Software...
- Redaktionen nutzen Content-Management-Software...
- Andere Forschungsinstitute haben doch die gleiche Problemstellung...
- Die Wissenschaftsorganisationen müssten doch Projekte fördern...
- Auf dem Markt gibt es sicherlich schon kommerzielle Lösungen...

... aber: so einfach war es nicht!



Archivspeicher ist in der Tat relativ leicht zu beschaffen:
Online-Speicher, HSM-Systeme, Objektspeicher, ...

Das Nutzerinterface ist das Problem (!)

- **Bibliotheksoftware** ist gut geeignet zum Archivieren von Objekten (Bücher, Ausstellungsstücke). Bibliotheken verstehen jede Menge von Metadaten. Die Anbieter von Bibliothekssoftware, die wir evaluiert hatten, können ganz viele Metadaten, teilweise auch recht flexibel, an Objekte binden. Aber: sie sind nicht für die Archivierung von Datenbergen gedacht. Sie referenzieren Objekte. Mit großen Datenmengen können sie nicht umgehen.
- **Content-Management-Software** kann mit großen Mengen an Dateien umgehen, aber die Betonung liegt auf Einzeldateien. Diese können einzeln verschlagwortet, in Katalog einsortiert werden, und das auch in großer Stückzahl. Aber: sie sind für Einzeldateien mit spezifischem Inhalt ausgerichtet (z.B. Bildarchive von Redaktionen). Mit großen Datenmengen im TByte-Bereich können sie nicht umgehen. Sie verstehen nichts von Container-Bildung. Die Anpassung der Metadaten-Eingabe ist machbar, die Container-Bildung ist integrierbar, aber erfordert teure Anpassungen. Eine öffentliche Ausschreibung ergab Ergebnisse ab 250 k€ aufwärts nur für die GUI, und wir wären der Prototyp gewesen.



- Andere **Forschungsinstitute** haben gute Lösungen, aber...:
 - Astrophysiker am AIP haben sich eine spezielle Bilddatenbank geschrieben (5+ Jahre Entwicklungsarbeit) und lösen damit ihre fachspezifische Problemstellung.
 - Geophysiker (AWI, GFZ) haben ein eigenes System zur Archivierung von Daten der Erderkundung entwickelt (<https://www.pangaea.de>). Sie archivieren (und publizieren) damit ihre fachspezifischen Daten. Ein sehr reifes Projekt - leider zu fachspezifisch und nicht generisch adaptierbar.
 - Hochenergiephysiker und Betreiber von Beamlines (CERN, SLAC, HZB) haben spezielle Software geschrieben, die exakt an die Experimente angepasst ist, d.h. die Metadaten werden z.T. ganz experimentspezifisch abgefragt.
Das HZB (vorm. BESSY) benutzt ICAT (<https://icatproject.org>) und viele Jahre Entwicklungsarbeit und löst damit seine fachspezifische Aufgabenstellung.
 - Das ZIB benutzt SAM-FS, die Anwenderschnittstelle sind CLI-Kommandos wie *archive*, *stage*, *sfind*. Es fehlt ein Metadaten-Management sowie eine GUI, die für Experimentalphysiker unabdingbar ist.
- Die DFG förderte am FIZ Karlsruhe von 2013-2016 das **RADAR-Projekt** für eine generische Forschungsdateninfrastruktur (<https://www.radar-service.eu/de>). Das Projekt ist ein Service, der über das DFN-Netz erreichbar ist und im Backend Speicher am KIT und an der TU Dresden nutzt. Das Problem für uns, daß es nicht für große Datenmengen im TByte gedacht ist (für „Anwender mit kleineren Datenmengen“) und es keine On-Premise-Lösung gibt.
- Am Markt haben wir keine **kommerzielle Lösung** gefunden.



Was braucht man, um ein Archiv aufzubauen und zu betreiben ?

In der analogen Welt

- Einen geeigneten Lagerraum (sicher, trocken, ...)
- Regale
- Kisten
- Aufkleber auf den Kisten (Inhalte, Eigentümer, ...)
- Eine Eingabeklappe
- Eine Ausgabeklappe
- Leute, die Dinge zum Archivieren anliefern
- Leute, die Dinge aus dem Archiv holen (Kopien)
- Transportarbeiter
- Einen technischen Archivverantwortlichen
- Einen Archivkatalog
- Zugangsberechtigungen (wer darf was?)
- Handlungsanweisungen
- Aktenvernichter

In der digitalen Welt

- = Speicherplatz
- = Verzeichnisse
- = Container
- = Metadaten
- = Ingest-Area
- = Egress-Area
- = Facharchivare
- = Facharchivare
- = Data-Mover
- = Archivadministrator
- = Metadaten-Datenbank
- = Authentifizierung und Autorisierung
- = Prozessbeschreibungen
- = Datenschredder



Folgende Fachprozesse haben wir als wesentlich identifiziert:

1. Gute Wissenschaftliche Praxis (Good Scientific Practice, **GSP**)

- Archivierung der Primärdaten für eine Veröffentlichung (incl. aller experimenteller Parameter, verwendetem Rechenweg, Programme, Parameter, Algorithmen, etc.)
- Facharchivar: Bibliothek
- Aufbewahrungsdauer: 10 Jahre
- Vorgänge / a: 120-150
- Volumen < 1 TByte
- Bisherige Technik:
 - DVD-R (4,7 bzw. 8,5 Gbyte/Medium)
 - Ablage in der Bibliothek
 - Katalog als Excel-Datei (strukturiert)
- Herausforderungen
 - Langlebigkeit der Medien (<< 10 Jahre)
 - Umsetzungsgrad durch die Forschungsgruppen teils unbefriedigend
 - Unzureichende Kapazität der DVD-R



2. Wissenschaftliche Massendaten (Scientific Mass Data, **SMD**)

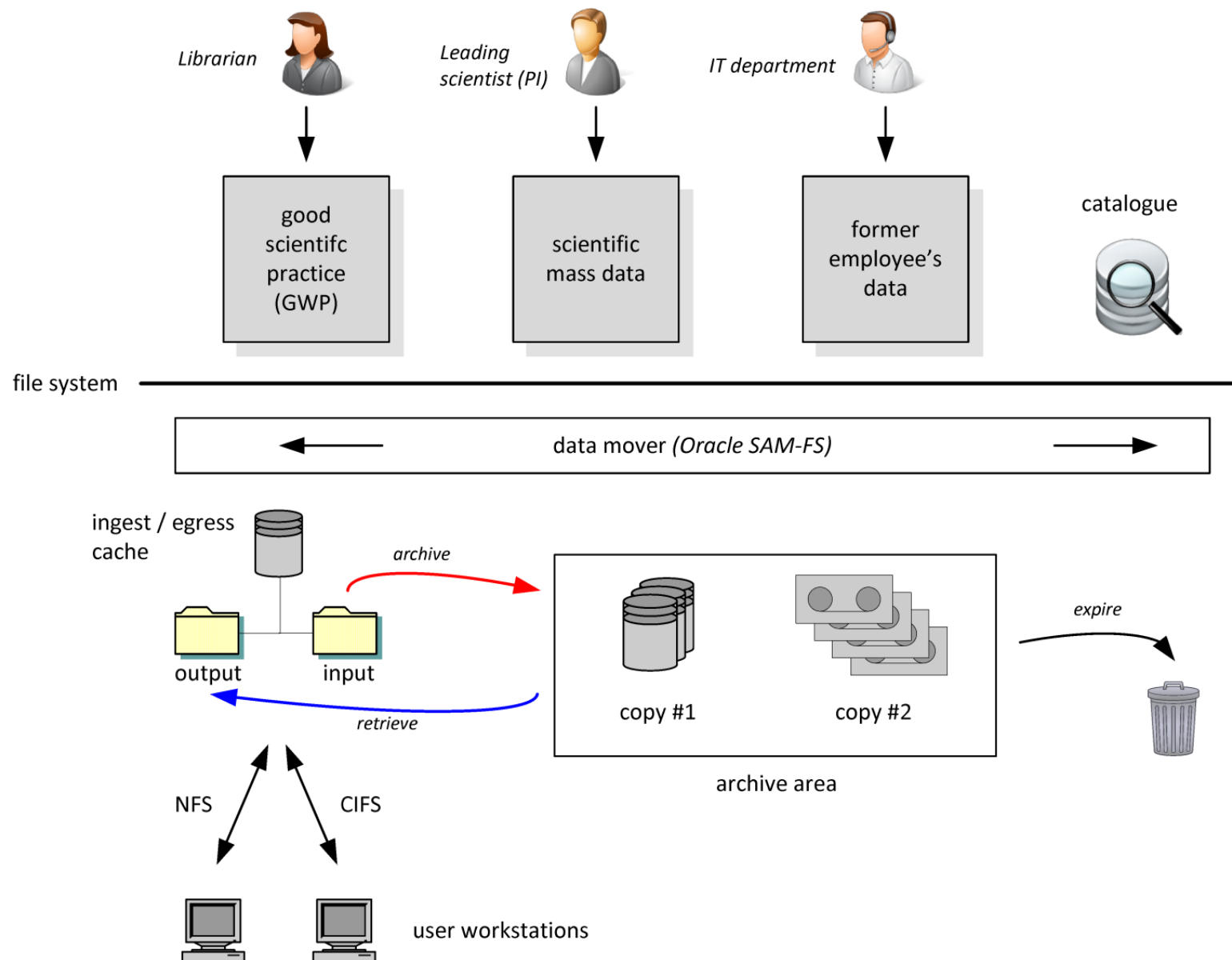
- Archivierung von Rohdaten aus Experimenten oder Simulationen
- Facharchivare: Principal Investigators
- Experimente mit teuren Laboraufbauten, teils einmalig und nur mit hohem Aufwand wiederholbar, teils hohes Datenaufkommen (GByte bis TByte)
- Messkampagnen an externen Facilities (z.B. Beamlines wie *DESY*, *FERMI*, *SLAC*, *XFEL*) mit kurzen Zeitfenstern und hohem Datenaufkommen (im TByte-Bereich)
- Auswertung erfolgt lange nach der Messung, teilweise über Jahre später, teils werden alte Messdaten mit neuen Methoden betrachtet
- Bisherige Technik:
 - Lokale Datenspeicher (mobile Festplatten)
 - Lokale Archivsysteme an den externen Facilities
 - Ablage auf dem Online-Speicher
- Herausforderungen:
 - Hochgradig unterschiedliche Datenformate
 - Große Datenmengen, hohes Mengenwachstum (CCD-Kamera-Auflösung, Wiederholrate)
 - Hoher Prozentsatz an wertlosen Daten (=> erfordert Vorauswahl)
- Aufbewahrungsdauer: 1-10 Jahre (max. 99 Jahre)
- Vorgänge / a: noch unbekannt
- Volumen: vsl. > 100 TByte /a



3. Daten ausgeschiedener Nutzer (User Account Data, **UAD**)

- Daten auf zentralen Homeverzeichnissen (+ dort eingesammelte Daten von lokalen Datenträgern)
- Daten, die nicht in strukturierter Form übergeben wurden oder bereits archiviert wurden („der unaufgeräumte Schreibtisch der Wissenschaftler beim Verlassen des Institutes“)
- Abteilungsleiter/Projektkoordinatoren benötigen manchmal noch Zugang
- Bisherige Technik:
 - Kopie auf lokalem Datenspeicher (DVDs, mobile Festplatten)
 - manueller Prozess, daher geringer Umsetzungsgrad
- Herausforderungen:
 - hohe Mitarbeiterfluktuation
 - geringe Disziplin der Wissenschaftler (vor allem: Doktoranden) beim Aufräumen
 - wiederkehrende Gast-Wissenschaftler
 - ungenutzte Daten verstopfen den Online-Speicher
- Facharchivar: EDV-Abteilung
- Aufbewahrungsdauer: 3 Jahre
- Vorgänge / a: ca. 100-120
- Volumen: vsl. < 20 TByte /a

Schematische Prozessdarstellung



Workflow: Gute Wissenschaftliche Praxis (1)

Jeder Wissenschaftler des MBI ist an die Regeln der DFG durch eine Dienstanweisung gebunden. Drittmittelanträge werden nur bewilligt, wenn diese Regeln als bindend anerkannt werden. Verantwortlich für die Durchführung der Verfahren sind die sog. *principal investigators*, kurz: PI. Der PI ist bei Veröffentlichungen in aller Regel identisch mit dem *corresponding author* des Papers. Die technische Durchführung der Archivierung selbst obliegt der Bibliothek (Rolle: Archivar).

Sobald eine Veröffentlichung zur Erscheinung im Peer-Review-Verfahren angenommen worden ist, d.h., wenn die beiden Reviewer ein positives Gutachten gegeben haben und der Editor der Zeitschrift entschieden hat, das Paper zu akzeptieren, dann läuft das folgende Verfahren ab:

- (1) Die Veröffentlichung geht bei der Zeitschrift in den Druck. Die Page-Proofs sind da und die Zeitschrift hat für die Veröffentlichung einen eindeutigen Kennzeichner (digital object identifier, DOI) vergeben.
- (2) Das zuständige Bereichssekretariat vergibt einen eindeutigen, internen Handle. Dieser Handle hat eine selbstgebaute, aber fest definierte Syntax:

Beispiel: *T4-P-2016.02*

Der Handle ist über die Veröffentlichung mit dem eindeutigen DOI verknüpft.

Der Handle wird zusammen mit den Daten der Veröffentlichung (Titel, Autoren, Journal, DOI) vom zuständigen Bereichssekretariat in die Literaturdatenbank (EndNote) eingegeben und von dort durch die Archivarin für die GWP ausgelesen. Die Archivarin für die Gute Wissenschaftliche Praxis am MBI ist immer die Bibliothekarin.

- (3) Der primäre Kontakt (*corresponding author*) nennt der Archivarin einen oder mehrere Datenlieferanten. Dies sind alle Mitarbeiter, die Daten für dieses Archiv anliefern dürfen. Dies können er selbst oder ein oder mehrere von ihm beauftragte Mitarbeiter sein.
- (4) Die Archivarin geht und die GUI und bereitet das Anlegen des Archivdatensatzes vor. Dazu übernimmt sie den Handle aus der EndNote-Datenbank und gibt ihn in die GUI ein. Damit wird ein Metadatensatz angelegt.

Als nächstes legt sie in der GUI das Verzeichnis für die Anlieferung der Daten an. Dabei wird automatisch im Eingabebereich des Archivspeichers ein Verzeichnis angelegt, das den Namen/Handle des Projektes trägt.

Syntax: */ingest/gsp/<project-handle>*

Workflow: Gute Wissenschaftliche Praxis (2)

Die Archivarin benennt. Die Datenlieferanten werden mit Hilfe der GUI aus der Liste der aktiven MBI-Mitarbeiter ausgewählt. Das System erteilt den ausgewählten Datenlieferanten Schreibrechte auf diesem Verzeichnis.

Dann wird der Metadatensatz von der Archivarin mit den bereits verfügbaren Attributen befüllt. Die in der Literaturdatenbank verfügbaren Attribute werden dabei in der ersten Version der Software manuell (d.h. mit Copy&Paste übernommen).

Der so angefangene Metadatensatz wird zwischengespeichert.

- (4) Das so eingerichtete Verzeichnis wird automatisch von System über die Protokolle NFS und CIFS zugänglich gemacht.
- (5) Der oder die beteiligten Wissenschaftler sammeln die relevanten Daten, Zwischenergebnisse, Laborbücher, Auswerte- und Rechenverfahren etc., die zu den veröffentlichten Ergebnissen geführt haben und liegen die Daten in dem Anlieferungsverzeichnis ab.
- (6) Der primäre Kontakt (*corresponding author*) prüft die Vollständigkeit der Daten.
- (7) Der primäre Kontakt (*corresponding author*) erteilt gegenüber der Bibliothek die Freigabe zum Archivieren.
- (8) Die Archivarin vervollständigt den Metadatensatz.
- (9) Nachdem die Daten und Metadaten vollständig und korrekt sind, stößt die Archivarin die Archivoperation an. Dabei wird das GWP-Verzeichnis automatisch in den read-only-Modus versetzt. Die Daten werden im Hintergrund in den Archiv-Bereich verschoben. Die Metadaten werden in der Metadaten-Datenbank gespeichert.
- (10) Nach erfolgreichem Abschluss der Archivoperation wird das GWP-Verzeichnis gelöscht. Die Daten selber liegen jetzt im Archivbereich des Archivspeichers. Die Archivarin wird über das Ende der Archivoperation per E-Mail benachrichtigt.
- (11) Der primäre Kontakt (*corresponding author*) erhält eine Quittung für die Archivierung. Eine Kopie der Quittung verbleibt in der Bibliothek.

Metadaten: Gute Wissenschaftliche Praxis (1)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
1	archive_handle	unique in-house identifier, taken from the EndNote database when the paper is accepted for publication	mandatory	string [department]-P-[year].[running number]	C2-P-2016.02
2	archive_creator	MBI person who created this archive (=the archivist) usually identical to the archivist for GSP; has implicit read access to the archive set	auto-generated	fixed string the name is taken from the person logged in the system at the time of creation of the archive	Jeannine Rehse
3	archive_primary_contact	primary MBI contact this is always an MBI person. The person who authorizes the collected data for archiving. This is usually the corresponding author. If the corresponding author is not a member of the MBI, this contact is representative for the corresponding author.	mandatory	fixed string selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Jens Tomm
4	archive_secondary_contact	secondary MBI contact this is an MBI person. This may be a principal investigator, project coordinator or department head.	optional	fixed string selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Thomas Elsaesser
5	archive_project_coordinator	MBI contact this is the project coordinator of the project under which this publication was created; this serves as a tertiary contact in case the primary and secondary are no longer available	mandatory	fixed string selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Uwe Griebner

Metadaten: Gute Wissenschaftliche Praxis (2)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
6	content_title	publication title	mandatory	text UTF-8	Rapid stress-testing vs. long-term aging: a case study of 980-nm emitting single-spatial mode lasers
7	content_authors	authors of the publication	mandatory	text UTF-8	J. W. Tomm, M. Hempel, D. Venables, V. Rossin, E. Zucker and T. Elsaesser
8	content_journal	journal of the publication	mandatory	text UTF-8	SPIE Proceedings Series 9733 (2016) 973303/1-6
9	content_identifier	bibliographic identifier	mandatory	multivalued attribute with seven allowed types: - DOI - URN - ISBN - eISBN - ISSN - eISSN - URL text ASCII, at least one field	- DOI: 10.1117/12.2208256 - URN: urn:nbn:de:tuda-tuprints-3462 - ISBN: 978-3-86680-192-9 - eISBN: 978-0-12-814982-9 - ISSN: 0031-9007 - eISSN: 1079-7114 - URL: http://edoc.hu-berlin.de/18452/19208
10	content_annotation	free text description of the archive, remarks, keywords, ...	optional	text UTF-8	The raw data of this collaborative work are available through the authors
11	archive_read_access	persons with read access to the archive data set (i.e. the right to create copies from the archived data set. read access is by default granted to: archive_creator, primary and secondary MBI contact, ombudspersons for GSP, directors. The read access for these default persons is irrevocable by the archivist; the default list of persons can be	mandatory pre-filled	multivalued attribute selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Jeannine Rehse, Jens Tomm, Thomas Elsaesser, Claus-Peter Schulz, Wilhem Becker

Metadaten: Gute Wissenschaftliche Praxis (3)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
12	archive_deposit_time	deposit time this is the time stamp when the archive data set has been stored successfully to the archive storage	auto-generated	according to ISO 8601 in UTC format: yyyy-mm-ddThh:mm:ssZ	2018-09-11T08:25:27Z
13	content_file_list	list of files in the archive (protected by checksum) (file name, attributes, last modification time)	auto-generated	text UTF-8	
14	archive_initial_retention_period	retention period [years] default: 10	mandatory	integer valid values: 1-99	10
15	archive_extended_retention_period	extended retention period [years] reserved for later extension of the retention period not included in the XML file generated and added to the archive data	optional	integer valid values: 1-99	20
16	archive_size	The size of the data contained in the archive data set in ingest before compression only used for informational purposes	auto-generated	string kByte, MByte, GByte, TByte, ... (like du -sh)	6.6T
17	checksum_metadata	the SHA256 checksum for the metadata computed from fields above (excluding all of the attributes that may change: archive_deposit_time, archive_read_access, archive_extended_retention_period)	auto-generated	string	244b2b425d666d4b9b7b72269696cb2e2604fe57ffbf9895900fb5f73abf15cc
18	checksum_data	the SHA256 checksum for the data is computed over the data (excluding the extra XML file, excluding the content file list)	auto-generated	string	e6e1c5c622bae4f2b5c1139307e58dbaeff26b6d11a118d2e8adb461ee924607

Workflow: Wissenschaftliche Massendaten (1)



Der Prozess der Archiverstellung wird in die Verantwortung des leitenden Wissenschaftlers (*principal investigator*, PI) gelegt. Diese Gruppe der leitenden Wissenschaftler am MBI umfasst ca. 30 Personen. Nur diese Personen erhalten direkten Zugang zum Archiv.

Wenn die Daten zur Auswertung benötigt werden, dann müssen sie aus dem Archiv auf den Online-Speicher kopiert werden.

Nach Ablauf der vordefinierten Aufbewahrungszeit (*retention period*) werden die Daten im Archiv automatisch gelöscht, es sei denn, der Wissenschaftler hat zuvor die Aufbewahrungszeit verlängert.

Eingabe der Daten

- (1) Der Wissenschaftler (typischerweise der PI oder Projektleiter) benennt einen Archivverantwortlichen für ein Projekt. Dies kann er selbst oder ein von ihm beauftragter Mitarbeiter sein.
Der Archivverantwortliche meldet sich mit den entsprechenden Rechten in der Rolle „Archivar“ an der GUI an.
- (2) Der Archivverantwortliche generiert per GUI automatisch einen eindeutigen Handle für das Projekt.
- (3) Der Archivverantwortliche gibt die Namen derjenigen Mitarbeiter an, die Daten für dieses Archiv anliefern dürfen („Datenlieferanten“). Dieses Verzeichnis bleibt 2 Wochen lang zum Schreiben geöffnet (fester globaler Wert; dieser Wert von 2 Wochen kann auf Anfrage vom Archivadministrator verlängert werden).

Damit wird automatisch im Eingabebereich des Archivspeicher ein Verzeichnis angelegt, das den Namen/Handle des Projektes trägt.

Syntax: `/ingest/massdata/<project-handle>`

Die in diesem Projekt mit der Datenanlieferung befassten Mitarbeiter erhalten Lese- und Schreibrechte auf dieses Anlieferverzeichnis.

Der angefangene Metadatensatz wird zwischengespeichert.

- (4) Das so eingerichtete Anlieferverzeichnis ist als Share über die Protokolle NFS, CIFS und SCP im Netzwerk für den Zugriff von Nutzer-Workstations (PCs) aus zugänglich.

Workflow: Wissenschaftliche Massendaten (2)



- (5) Das Verzeichnis bleibt für den festgelegten Zeitraum (2 Wochen) zum Beschreiben geöffnet. Die zu archivierenden Daten werden von den Datenlieferanten dort abgelegt. Bei der Ausgestaltung der Unterverzeichnisstruktur und des Datenformates sind die Mitarbeiter frei.
- (6) Nach Abschluss der Datensammlung geht der Archivverantwortliche erneut in die GUI und ruft den begonnenen Metadatensatz wieder auf. Er füllt dann den vorgegebenen Satz an Metadaten vollständig aus. Dabei legt er auch die Aufbewahrungsfrist für diesen Archivdatensatz fest.
- (7) Anschließend stößt der Archivverantwortliche die eigentliche Archivoperation an. Dabei wird das Anlieferverzeichnis im Eingangsbereich des Archiv-Speichers in den read-only-Modus versetzt, so dass keine Daten mehr hinzugefügt werden können.
- (8) Die Metadaten werden vor dem Verschieben der Daten ins Archiv als XML-Datei zusätzlich automatisch als XML-Datei gespeichert. Diese Datei wird den zu archivierenden Daten beigelegt. (Diese XML-Datei dient dem Disaster-Recovery).
- (9) Die Daten werden im Hintergrund in den Archiv-Bereich des Archivsystems verschoben. Dazu wird ein Prozess gestartet, der länger dauern kann. Der Status des Prozesses wird über die GUI sichtbar gemacht (in Arbeit, erfolgreich oder fehlgeschlagen).
- (10) Über den Abschluss der Operation wird der Archivverantwortliche per E-Mail informiert.
- (11) Wenn die Operation erfolgreich ist, wird das Anlieferverzeichnis im Eingangsbereich des Archivspeichers gelöscht. Der Archivstatus des Archives wird in den Metadaten als "erfolgreich archiviert" (OK) gekennzeichnet. Das Datum der erfolgreichen Archivierung wird als Attribut *archive_deposit_time* aufgezeichnet.
- (12) Wenn die Operation fehlgeschlagen ist, wird der Archivverantwortliche darüber per E-mail informiert. Das Anlieferverzeichnis im Eingangsbereich des Archivspeichers bleibt unverändert.

Der Archivstatus des Archives wird in den Metadaten als "fehlgeschlagen" (FAILED) gekennzeichnet.

Der Archivverantwortliche muss dann den Archivadministrator bemühen, den Fehler zu suchen (Offline-Prozess).

Der Archivverantwortliche hat dann die Möglichkeit, den Prozess von einem der o.g. Schritte neu zu starten.



Ausgabe der Daten

- (1) Die Zugriffsberechtigten, die beim Anlegen des Archivs als leseberechtigt (im Attribut *archive_read_access*) definiert wurden, können die Archivdaten in umgekehrter Reihenfolge zurückholen.
- (2) Jeder Zugriffsberechtigte kann per GUI den Katalog der Archive nach dem Handle oder nach bestimmten Metadaten durchsuchen. Das Suchergebnis enthält dabei nur diejenigen Archivdatensätze, auf die er Lesezugriff hat.
- (3) Unter Angabe des Handles können die Zugriffsberechtigten das Kopieren der Daten aus dem Archiv-Bereich des Systems in den Ausgabe-Bereich anstoßen. Die Archiv-GUI erteilt dem Archivsystem den entsprechenden Befehl.
- (4) Den Status des Kopiervorgangs kann der Nutzer in der GUI einsehen: Es gibt folgende Status: WAITING , IN PROGRESS, SUCCESSFUL, FAILED
- (5) Nach Abschluss wird der Zugriffsberechtigte, der den Kopiervorgang angestoßen hat, per E-Mail benachrichtigt. In der E-Mail ist der Ausgabepfad enthalten (in NFS und CIFS-Syntax).
- (6) Die Daten aus dem Archiv stehen auf dem Ausgabebereich des Archivspeichers

/egress/massdata/[handle]

d.h. in einem Verzeichnis, das den Namen/Handle des Archivs trägt, für 7 Tage zur Abholung zur Verfügung (über die Filesystemprotokolle NFS, CIFS und SCP).

- (7) Der Archivverantwortliche kann dann per GUI das Ausgabeverzeichnis löschen. Ansonsten wird das Ausgabeverzeichnis automatisch nach 7 Tagen gelöscht. Dieser Vorgang wird per E-Mail an den Archivverantwortlichen gemeldet.

Metadaten: Wissenschaftliche Massendaten (1)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
1	archive_handle	unique in-house identifier	auto-generated	[archive type]-[[sequential number] smd : scientific mass data (the archive type) sequential number : ascending number of archives, beginning with 1000; equal to the database internal primary key of the archive	smd-1071
2	archive_creator	MBI person who created this archive (=the archivist) usually identical to the primary contact; may be a named representative of the primary contact; has implicit read access to the archive set	auto-generated	this is the person who has created the archive; the name is taken from the person logged in the system at the time of creation of the archive	Ulli Eichmann
3	archive_primary_contact	primary MBI contact person responsible for the collection of the data and generation of the archive; usually also the archive_creator; has implicit read access to the archive set	mandatory	fixed string: dynamic drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Holger Stiel
4	archive_secondary_contact	secondary MBI contact typically the project coordinator or the department head; has implicit read access to the archive set	mandatory	fixed string: dynamic drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Matthias Schnuerer
5	department_id	MBI department to which this data belongs to (the contact may choose this, i.e. the senior scientist (PI) S.Patchkovskii, belonging to T1 may choose to produce data for T2)	mandatory	fixed string: dynamic drop-down list with (currently 14 departments from the stem database (A1...T5)	B2
6	content_title	title of the archive	mandatory	text UTF-8	Measurement campaign at FermiLab in spring 2012

Metadaten: Wissenschaftliche Massendaten (2)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
7	content_annotation	free text description of the archive, remarks, keywords, ...	optional	text UTF-8	
8	archive_read_access	persons with read access to the archive read access is by default granted to: archive_creator, archive_primary_contact, archive_secondary_contact, and directors the read access for these default persons is irrevocable by the archivist the default list of persons may be augmented by the archivist this attribute may be overridden later by the archive administrator upon request of the responsible person	mandatory, prefilled	multivalued attribute selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	<i>Ulli Eichmann, Holger Stiel, Matthias Schnuerer, Marc Vrakking, Stefan Eisebitt, Thomas Elsaesser, Bastian Pfau, Clemens von Korff Schmising</i>
9	archive_deposit_time	deposit time this is the time stamp when the archive data set has been stored successfully to the archive storage	auto-generated	according to ISO 8601 in UTC format: yyyy-mm-ddThh:mm:ssZ	2018-09-11T08:25:27Z
10	content_file_list	list of files in the archive (protected by checksum) (file name, attributes, last modification time)	auto-generated	text UTF-8	<i>output from ls -lR, find or similar (may be very long)</i>
11	content_period_start	start date for the period of data generation	optional	[date] according to ISO 8601 in format: yyyy-mm-dd	2012-03-01
12	content_period_end	end date for the period of data generation	optional	[date] according to ISO 8601 in format: yyyy-mm-dd	2012-05-15

Metadaten: Wissenschaftliche Massendaten (3)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
13	archive_initial_retention_period	retention period [years] default: 10 more than 10 years requires director's approval	mandatory	integer valid values: 1-99	10
14	archive_extended_retention_period	extended retention period [years] reserved for later extension of the retention period not included in the XML file generated and added to the archive data	optional	integer valid values: 1-99	20
15	extra_attributes	additional user defined attributes format: XML-file	optional	XML format according to W3C standard	
16	archive_size	The size of the data contained in the archive data set in ingest before compression only used for informational purposes	auto-generated	string kByte, MByte, GByte, TByte, ... (e.g. output from du -sh)	6.2T
17	checksum_metadata	the SHA256 checksum for the metadata computed from fields above (excluding all of the attributes that may change: archive_deposit_time, archive_read_access, archive_extended_retention_period)	auto-generated	string	244b2b425d666d4b9b7b72269696cb2e2604fe57ffbf9895900fb5f73abf15cc
18	checksum_data	the SHA256 checksum for the data is computed over the data (excluding the extra XML file, excluding the content file list)	auto-generated	string	e6e1c5c622bae4f2b5c1139307e58dbaeff26b6d11a118d2e8adb461ee924607

Workflow: Daten ausgeschiedener Nutzer (1)

Das MBI stellt den Mitarbeitern als Dateiablage für die im persönlichen Kontext erzeugten Daten einen definierten Ablagebereich zur Verfügung. Dies ist das sog. *user home directory*. Dieses auch „Home-Directory“ genannte Verzeichnis wird im MBI in einem globalen Namensraum über die Protokolle NFS für UNIX-Workstations und SMB/CIFS für Windows-PCs verfügbar gemacht.

In diesem Verzeichnis soll der ausscheidende Mitarbeiter vor seinem Ausscheiden alle relevanten Ergebnisdaten, Zwischenrechnungen, Aufzeichnungen, Veröffentlichungen, etc. zur Übergabe an den Vorgesetzten hinterlegen.

Vor dem Ende der vertraglichen Bindung an das Institut läuft im Vorfeld ein Offline-Prozess ab, der organisatorisch regelt, wie mit den Daten umgegangen werden soll (hier nicht dargestellt). Wenn der Mitarbeiter seine Daten zusammengesammelt hat und der Vorgesetzte die Daten gesichtet und ggf. aufgeräumt hat, gibt letzterer Nachricht an die EDV, ob die restlichen Daten im Home-Directory gelöscht oder archiviert werden sollen. Dann startet die EDV den Archiv-Prozess.

- (1) Der Archivverantwortliche (Archivar) ist ein mit dem Vorgang beauftragter Mitarbeiter der EDV.
- (2) Der Archivar meldet sich in der GUI an und gibt den Login-Namen des ausgeschiedenen Mitarbeiters ein. Die Anwendung identifiziert anhand des Login-Namens eindeutig den Mitarbeiter und erzeugt daraus automatisch einen Handle für den Archivdatensatz. Alle weiteren, mit dem Mitarbeiter zusammenhängenden Daten aus der Stammdatenbank (wie Mitarbeiter-Nr., Abteilung, Vertragsstart und –ende) werden in den Metadatensatz übernommen.

Der so angefangene Metadatensatz kann zwischengespeichert werden.

- (3) Der Archivar sammelt alle weiteren relevanten Informationen:
 - primärer Kontakt (das ist in aller Regel der Abteilungsleiter)
 - sekundärer Kontakt (optional)
 - Aufbewahrungszeit (per default 3 Jahre)
 - Verzeichnispfad zum Homedirectory (falls abweichend vom Default /home/[loginname])
 - Zusätzliche Leseberechtigungen für diesen Archivdatensatz
- (4) Abschließend geht der Archivverantwortliche erneut in die GUI und finalisiert den begonnenen Metadatensatz. Dann stößt er die eigentliche Archivoperation an.
- (5) Dabei wird das Homedirectory in den read-only-Modus versetzt, so dass keine Daten mehr hinzugefügt werden können.
- (6) Die Metadaten werden vor dem Verschieben der Daten ins Archiv als XML-Datei zusätzlich automatisch als XML-Datei gespeichert. Diese Datei wird den zu archivierenden Daten beigelegt. (Diese XML-Datei dient dem Disaster-Recovery).

Workflow: Daten ausgediegener Nutzer (2)



- (7) Die Daten werden im Hintergrund in den Archiv-Bereich des Archivsystems verschoben. Dazu wird ein Prozess gestartet, der länger dauern kann. Der Status des Prozesses wird über die GUI sichtbar gemacht (in Arbeit, erfolgreich oder fehlgeschlagen). Das Archivsystem hat dazu den entsprechenden Zugriff auf den Fileserver, auf dem das Home-Directory des Nutzers liegt (z.B. per NFS oder per SCP).
- (8) Über den Abschluss der Operation wird der Archivverantwortliche per E-Mail informiert.
- (9) Nach erfolgreichem Abschluss des Archivvorgangs wird das Home-Directory nicht gelöscht und im Zustand „read-only“ belassen. Der Archivstatus des Archivdatensatzes wird in den Metadaten als "erfolgreich archiviert" (OK) gekennzeichnet.

Das Datum der erfolgreichen Archivierung wird als Attribut *archive_deposit_time* aufgezeichnet.

Ausgabe der Daten

- (1) Der Archivar, der primäre und sekundäre Kontakt und alle weiteren Zugriffsberechtigten, die beim Anlegen des Archivs als leseberechtigt (im Attribut *archive_read_access*) definiert wurden, können den Archivdatensatz aus dem Archivspeicher anfordern.
- (2) Auch auf Anforderung eines Wissenschaftlers (des Abteilungsleiters/des Projektleiters/ des PI) kann die EDV die Daten eines ausgeschiedenen Mitarbeiters aus dem Archiv in den Ausgabe-Bereich kopieren.
- (3) Den Status des Kopiervorgangs kann der Archivnutzer in der GUI einsehen: Es gibt folgende Status: *WAITING* , *IN PROGRESS*, *SUCCESSFUL*, *FAILED*
- (4) Nach Abschluss wird der Zugriffsberechtigte, der den Kopiervorgang angestoßen hat, per E-Mail benachrichtigt. In der E-Mail ist der Ausgabepfad enthalten (in NFS und CIFS-Syntax).
- (5) Die Daten aus dem Archiv stehen auf dem Ausgabebereich des Archivspeichers

/egress/UAD/[handle]

d.h. in einem Verzeichnis, das den Namen/Handle des Archivs trägt, für 7 Tage zur Abholung zur Verfügung (über die Filesystemprotokolle NFS, CIFS und SCP).

- (6) Der Archivverantwortliche kann dann per GUI das Ausgabeverzeichnis löschen. Ansonsten wird das Ausgabeverzeichnis automatisch nach 7 Tagen gelöscht. Dieser Vorgang wird per E-Mail an den Archivverantwortlichen gemeldet.

Metadaten: Daten ausgediesener Nutzer (1)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
1	archive_handle	unique in-house identifier (we do not simply take the login name because a user may appear, disappear and reappear under different department id's and they may work at the MBI during different years. Thus, there might be more than one archive per user)	auto-generated	[archive type]-[[sequential number] uad: user account data (the archive type) sequential number : ascending number of archives, beginning with 1000; equal to the database internal primary key of the archive	uad-471134
2	archive_creator	MBI person who created this archive (=the archivist) (person in the IT department)	auto-generated	fixed string the name is taken from the person logged in the system at the time of creation of the archive	Michael Dose
3	login_name	unique IT account linked to the user within the stem database	mandatory	fixed string selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	werncke
4	archive_primary_contact	primary MBI contact person responsible for the collection of the users' data, this is usual the department head	mandatory	fixed string selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Erik Nibbering
5	archive_secondary_contact	secondary MBI contact typically the supervisor, such as the senior scientist, project coordinator or director	optional	fixed string selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Thomas Elsaesser
6	employee_nr_mbi	MBI personell number of employee (linked to the user within the stem database)	auto-filled, non-editable	integer	97
7	department_id	MBI department to which the user belongs to	auto-filled, non-editable	fixed string one of currently 14 departments from the stem database (A1...T5)	C1

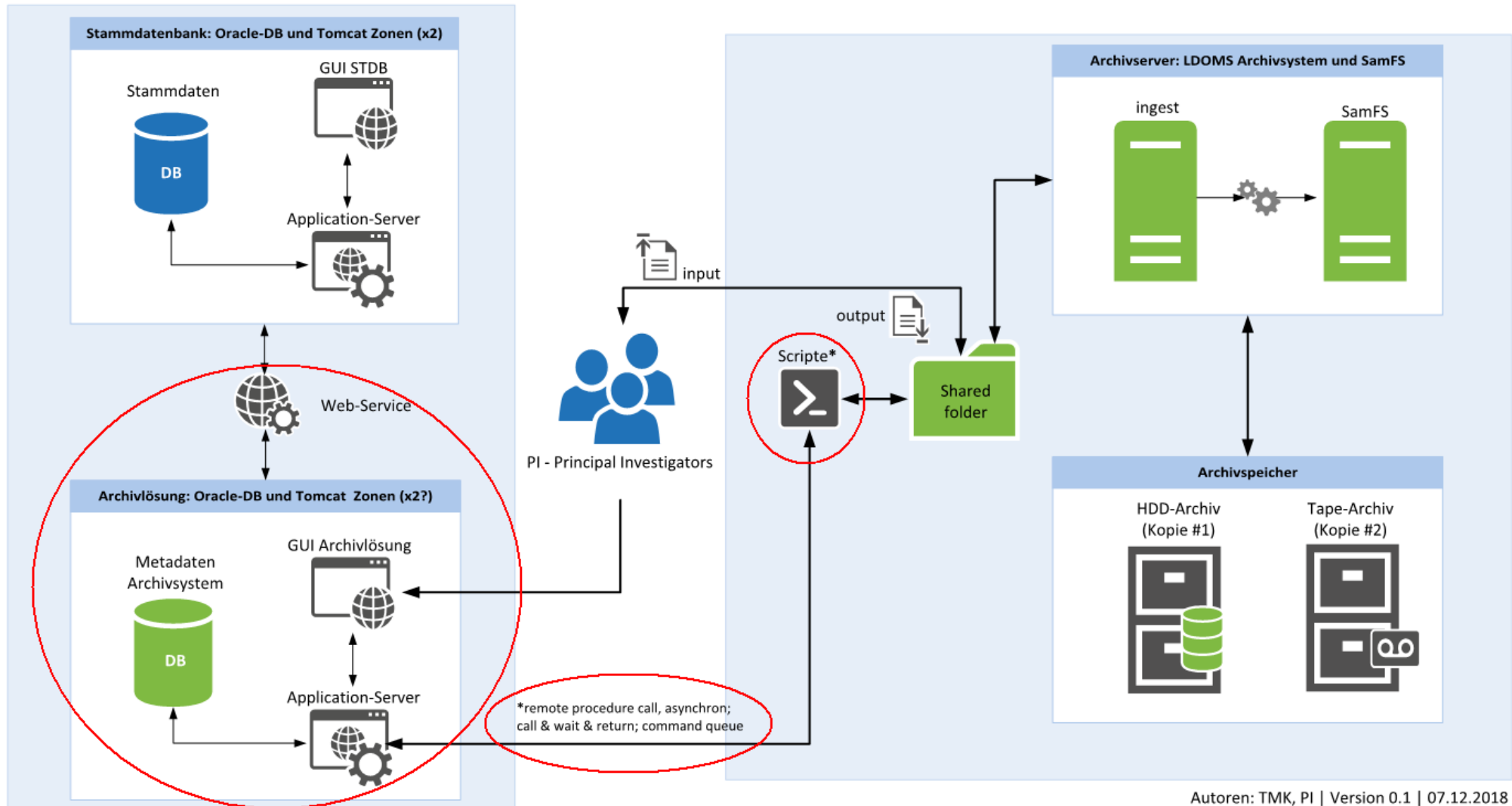
Metadaten: Daten ausgediesedener Nutzer (2)

#	Attribute	Description	Type	Format	Example
8	project_ids	MBI project number(s) the user was affiliated with (in more detail: scientists work for projects. Projects are defined in a research plan. The research plan and the corresponding project ids are stored in the stem database)	auto-filled, non-editable	fixed string, multivalued attribute list with ids from the stem database (project ids)	2.2 3.1
9	contract_data_start	start date of the first contract (from the stem database)	auto-filled, non-editable	[date] according to ISO 8601 in format: dd.mm.yyyy	01.01.1992
10	contract_end_date	end date of the last contract (this includes guest contracts without payment as well, i.e. any contract under which the user had access to the MBI resources) (from the stem database)	auto-filled, non-editable	[date] according to ISO 8601 in format: dd.mm.yyyy	31.12.2018
11	home_directory	path to home directory (required for collection of data; in most cases this is equivalent to /home/[login_name], but not in all cases; this attribute is editable)	mandatory, prefilled, editable	string	/home/werncke
12	uid	UNIX uid	auto-filled, non-editable	integer	1908
13	archive_read_access	persons with read access to the archive read access is by default granted to: archive_creator, archive_primary_contact, archive_secondary_contact, directors; the read access for these default persons is irrevocable by the archivist the default list of persons may be augmented by the archivist this attribute may be overridden later by the archive administrator upon request of the responsible person	mandatory, prefilled	multivalued attribute selected from a drop-down list with names from the stem database (MBI persons)	Michael Dose, Erik Nibbering, Thomas Elsaesser, [+ list of directors]

Metadaten: Daten ausgediesedener Nutzer (3)



#	Attribute	Description	Type	Format	Example
14	archive_deposit_time	deposit time this is the time stamp when the archive data set has been stored successfully to the archive storage	auto-generated	according to ISO 8601 in UTC format: yyyy-mm-ddThh:mm:ssZ	2018-09-11T08:25:27Z
15	content_file_list	list of files in the archive (protected by checksum) (file name, attributes, last modification time)	auto-generated	text UTF-8	<i>output from ls -lR, find or similar (may be very long)</i>
16	archive_initial_retention_period	retention period [years] default: 10 more than 10 years requires director's approval	mandatory	integer valid values: 1-99	3
17	archive_extended_retention_period	extended retention period [years] reserved for later extension of the retention period not included in the XML file generated and added to the archive data	optional	integer valid values: 1-99	5
18	archive_size	The size of the data contained in the archive data set in ingest before compression only used for informational purposes	auto-generated	string kByte, MByte, GByte, TByte, ... (e.g. output from du -sh)	317G
19	checksum_metadata	the SHA256 checksum for the metadata computed from fields above (excluding all of the attributes that may change: archive_deposit_time, archive_read_access, archive_extended_retention_period)	auto-generated	string	244b2b425d666d4b9b7b72269696cb2e2604fe57ffbf9895900fb5f73abf15cc
20	checksum_data	the SHA256 checksum for the data is computed over the data (excluding the extra XML file, excluding the content file list)	auto-generated	string	e6e1c5c622bae4f2b5c1139307e58dbaeff26b6d11a118d2e8adb461ee924607



Verwendete Technologien im Projekt



Nr.	Baustein	Technologie	Hersteller	Aufbau
1	Archivserver	Oracle Server SPARC S7-2L, Solaris 11.4, LDom	<i>Oracle</i>	contac
2	Fileserver (ingest/egress)	Oracle Server SPARC S7-2L, Solaris 11.4, LDom	<i>Oracle</i>	contac
3	HSM	SAM-FS 6.1	<i>Oracle</i>	contac
4a	Archivspeicher, Kopie 1	E2812 DiskArray (SAN-Anschluss)	<i>NetApp</i>	contac
4b	Archivspeicher, Kopie 2	SL150 TapeLibrary (SAN-Anschluss)	<i>Oracle</i>	contac
5	Metadaten-Datenbank	Oracle Datenbank 18c	<i>Oracle</i>	Scopeland
6	Stammdatenbank	Oracle Datenbank 18c	<i>Oracle</i>	Scopeland
7	Applikationscontainer	Tomcat 8.5	<i>Apache</i>	Scopeland
8	Anwendungsserver	Oracle Server SPARC S7-2, Solaris 11.4, Zonen	<i>Oracle</i>	MBI
9	Hochverfügbarkeit (HA) (Applikationen und Datenbanken)	Oracle Solaris Cluster	<i>Oracle</i>	MBI
10	Archivapplikation	Java EE, entwickelt mit Codegenerator <i>DirectDesk</i>	<i>Scopeland</i>	Scopeland
11	Command Queuing System (synchron und asynchron)	RabbitMQ 3.7	<i>Rabbit Technologies</i>	contac



MAX BORN INSTITUTE

for Nonlinear Optics and
Short Pulse Spectroscopy

ARCHIVE

logged in as:

**Facharchivar GSP, Facharchivar SMD,
Facharchivar UAD**

Please choose the archive area you want to enter

Good Scientific Practice ▼

Open



New archive entry

Archive Entries in Preparation

Handle	Content title	Corresponding author	Entry created at ▲	Entry created by	

Edit

Delete

Options

Search archive

Request copies

Extend retention times

Delete archive entries

Job Summary

Show only

All

Job type	Job status	Handle	Title	Job owner	Job ID	Job start date ▼	
Archive Creation	Success	T4-P-2018.02	Electron transfer pathways and dynamics in drosophila cryptochrome - the role of protein electrostatics	Thomas-Martin Kruel	1177	Mon, 25.11.2019 16:20	▲
Set Read only	Success	T4-P-2018.02	Electron transfer pathways and dynamics in drosophila cryptochrome - the role of protein electrostatics	Thomas-Martin Kruel	1176	Mon, 25.11.2019 16:20	
Synchronising Ingest Write Access	Success	T4-P-2018.02	Electron transfer pathways and dynamics in drosophila cryptochrome - the role of protein electrostatics	Thomas-Martin Kruel	1175	Mon, 25.11.2019 16:13	
Creating Ingest Directory	Success	T4-P-2018.02	Electron transfer pathways and dynamics in drosophila cryptochrome - the role of protein electrostatics	Thomas-Martin Kruel	1174	Mon, 25.11.2019 16:13	▼

GSP: Archive Handle anlegen



New archive entry

Archive handle

T4-P-2018.01

Save

Directory preparation

Archive metadata

Content metadata

?

i

A handle has to be entered to enable the directory preparation.

Create directory for data collection

Write access configuration (optional)

Add data supplier

Add data supplier

Remove data supplier

Commit configuration

Close

Archiving



New archive entry

Archive handle

T4-P-2018.01

Save

Directory preparation

Archive metadata

Content metadata

Create directory for data collection

Directory created. Data delivery can start.

CIFS: \\ingest\ingest_GSP\T4-P-2018.01

NFS: ingest:/ingest/GSP/T4-P-2018.01

Write access configuration (optional)

Add data supplier

Add data supplier

Remove data supplier

Commit configuration

✓ Ingest directory successfully created.

Close

Archiving

GSP: Datenlieferanten hinzufügen



New archive entry

Archive handle

T4-P-2018.01

Save

Directory preparation

Archive metadata

Content metadata

Create directory for data collection

Directory created. Data delivery can start.

CIFS: \\ingest\ingest_GSP\T4-P-2018.01

NFS: ingest:/ingest/GSP/T4-P-2018.01

✓ Ingest directory successfully created.

Write access configuration (optional)

Add data supplier

Kern, Lisa-Marie

Kiel, Thomas

Kieschke, Robert H.

Kleine, Carlo

Klemz, Guido

Klose, Christopher

Kluwe, Eric

Koc, Azize

Kolatzki, Katharina

Koll, Lisa-Marie

Kommol, Gerd

Korff Schmising, von, Clemens

Kornilov, Oleg

Krause, Melanie

Kretschmar, Martin

Kruel, Thomas-Martin

Close

Dr.Thomas-Martin Kruel EDV Max-Born-Institut Berlin 26.November 2019

© Forschungverbund Berlin e.V.

33

GSP: Konfiguration bestätigen



New archive entry

Archive handle

T4-P-2018.01

Save

Directory preparation

Archive metadata

Content metadata

Create directory for data collection

Directory created. Data delivery can start.

CIFS: \\ingest\ingest_GSP\T4-P-2018.01

NFS: ingest/ingest/GSP/T4-P-2018.01

Write access configuration (optional)

Add data supplier

Add data supplier

Thomas-Martin Kruei

Remove data supplier

Commit configuration

✓ Write access successfully actualised.

Close

Archiving

GSP: Archive-Metadaten hinzufügen



New archive entry

Archive handle

T4-P-2018.01

Save

Directory preparation

Archive metadata

Content metadata

MBI primary contact

Fingerhut, Benjamin Philipp

MBI secondary contact (optional)

Richter, Maria

MBI project coordinator

Fingerhut, Benjamin Philipp

Retention

10 years

Save

Extended read access

Select person...

Grant

Janina Lebendig-Kuhla

Read Access is automatically granted to the following persons:

Revoke

- Directors
- MBI primary/secondary contact
- Administrators
- GSP-Archivists
- GSP-Ombudspersons
- MBI project coordinator

Close

Archiving

GSP: Content-Metadaten hinzufügen



New archive entry

Archive handle

Directory preparation **Archive metadata** **Content metadata**

Publication title

Journal

Annotations (optional)

Content authors

Bibliographic Identifiers
Select type ...

DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/C8FD0...>

GSP: Daten begutachten und Start der Archivierung



New archive entry

Check if metadata is correct and ensure that all relevant data is supplied

<u>Archive</u> Handle T4-P-2018.01 MBI primary contact Benjamin Philipp Fingerhut MBI secondary contact (optional) Maria Richter MBI project coordinator Benjamin Philipp Fingerhut Retention period 10 years Read access (optional) Janina Lebendig-Kuhla	<u>Publication</u> Title Coupled excitation energy and charge transfer dynamics in reaction centre inspired model systems Journal Faraday Discussions 216 (2019) 72-93 Author(s) M. Richter, B.P. Fingerhut Annotations (optional) excitation energy transfer (EET), charge transfer (CT), MACGIC-iQUAPI method Bibliographic Identifiers (minimum one assigned) DOI: http://dx.doi.org/10.1039/C8FD00189H
--	---

Back

By pressing "Archive now" metadata cannot be changed afterwards and the archiving process cannot be cancelled.

Archive now

Archivsystem für Forschungsdaten

GSP: Archivprozess gestartet





MAX BORN INSTITUTE
for Nonlinear Optics and
Short Pulse Spectroscopy

ARCHIVE

Good Scientific Practice

Change Archive Area

Good Scientific Practice

 Thomas-Martin Kruel

Logout

New archive entry

Archive Entries in Preparation

Handle	Content title	Corresponding author	Entry created at ▲	Entry created by
Attention The archive process is registered. You will be notified once the process has finished. OK				

Edit

Delete

Options

Search archive

Request copies

Extend retention times

Delete archive entries

Job Summary

Show only

All

Job type	Job status	Handle	Title	Job owner	Job ID	Job start date ▼
Archive Creation	Success	T4-P-2018.01	Coupled excitation energy and charge transfer dynamics in reaction centre inspired model systems	Thomas-Martin Kruel	1181	Mon, 25.11.2019 23:01
Set Read only	Success	T4-P-2018.01	Coupled excitation energy and charge transfer dynamics in reaction centre inspired model systems	Thomas-Martin Kruel	1180	Mon, 25.11.2019 23:01
Synchronising Ingest Write Access	Success	T4-P-2018.01	Coupled excitation energy and charge transfer dynamics in reaction centre inspired model systems	Thomas-Martin Kruel	1179	Mon, 25.11.2019 22:54
Creating Ingest Directory	Success	T4-P-2018.01	Coupled excitation energy and charge transfer dynamics in reaction centre inspired model systems	Thomas-Martin Kruel	1178	Mon, 25.11.2019 22:52



MAX BORN INSTITUTE
for Nonlinear Optics and
Short Pulse Spectroscopy

ARCHIVE
Good Scientific Practice

Change Archive
Area

Good Scientific Practice

Thomas-Martin Krueel

Logout

[Back to Overview](#)

Options

Search results

Publication Period
from

All to All

Handle ▲	Title	Corresponding author	Expiration date	Deposit time	Archive size	State
C1-P-2018.02	Cr L-edge X-ray absorption spectroscopy of CrIII(acac)3 in solution with measured and calculated absolute absorption cross sections	Erik T. J. Nibbering	Tue, 03.07.2029 11:35	Wed, 03.07.2019 11:35	44.17 MB	Archived
C1-P-2018.03	Soft x-ray spectroscopy of the amine group: hydrogen bond motifs in alkylamine/alkylammonium acid-base pairs	Erik T. J. Nibbering	Fri, 02.07.2032 10:37	Tue, 02.07.2019 10:37	0.45 GB	Archived
C1-P-2018.07	Ultrafast vibrational relaxation and energy dissipation of hydrated excess protons in polar solvents	Thomas Elsässer	Mon, 15.10.2029 12:14	Tue, 15.10.2019 12:14	53.23 MB	Archived
C1-P-2019.02	Ultrafast proton transport between a hydroxy acid and a nitrogen base along solvent bridges governed by hydroxide/methoxide transfer	Erik T. J. Nibbering				Archive error
C1-P-2019.03	Hydrated excess protons in acetonitrile/water mixtures: solvation species and ultrafast proton motions	Thomas Elsässer	Mon, 15.10.2029 14:10	Tue, 15.10.2019 14:10	0.46 GB	Archived
T4-P-2017.02	Simulating coherent multidimensional spectroscopy of nonadiabatic molecular processes: from the infrared to the X-ray regime	Benjamin Philipp Fingerhut	Wed, 27.06.2029 14:38	Thu, 27.06.2019 14:38	1.26 GB	Archived
T4-P-2018.01	Coupled excitation energy and charge transfer dynamics in reaction centre inspired model systems	Benjamin Philipp Fingerhut	Sun, 25.11.2029 23:01	Mon, 25.11.2019 23:01	0 Byte	Archived
T4-P-2018.02	Electron transfer pathways and dynamics in drosophila cryptochrome - the role of protein electrostatics	Benjamin Philipp Fingerhut	Sun, 25.11.2029 16:20	Mon, 25.11.2019 16:20	10.49 MB	Archived

[Show details](#)

[Download
content file list](#)

[Request copy](#)

[Extend retention
period](#)



Show details

Archive metadata Handle T4-P-2017.02 MBI primary contact Benjamin Philipp Fingerhut MBI secondary contact n/a MBI project coordinator Benjamin Philipp Fingerhut Retention Period 10 years Read access 	Publication Title Simulating coherent multidimensional spectroscopy of nonadiabatic molecular processes: from the infrared to the X-ray regime Journal Chemical Reviews 117 (2017) 12165–12226 Author(s) M. Kowalewski, B. P. Fingerhut, K. E. Dorfman, K. Bennett, S. Mukamel Annotations Identifier DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00081
---	---

Archive details <table> <tr> <td>Content file list</td> <td>Archive size</td> </tr> <tr> <td>Download</td> <td>1.26 GB</td> </tr> </table>	Content file list	Archive size	Download	1.26 GB	Checksum metadata 36b374f8b483c1deab482e827ea173b4e44c231d2b1ac9672d60624 Checksum data 0f3da10fa77457e06f6291be06ecb40e9a0ac7b8d125758179270c57
Content file list	Archive size				
Download	1.26 GB				

Close

GSP: Archiv: Inhaltverzeichnis anzeigen



ContentFileListToTxt-7.txt - WordPad									
Start Ansicht									
Einfügen Ausschneiden Kopieren Zwischenablage									
Schriftart: Courier New 9									
Absatz Einfügen Bearbeiten									
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28									
60	3	drwx-----	3	jrehse	c1	3 Oct 15 14:02	./Paper_Definitief		
61	3	drwx-----	6	jrehse	c1	8 Oct 15 14:02	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet		
79	3	drwx-----	2	jrehse	c1	6 Oct 15 14:02	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Submitted		
82	1807	-rwx-----	1	jrehse	c1	1747917 Apr 17 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Submitted/zundel_ac_water_SI_170419.pdf		
81	2447	-rwx-----	1	jrehse	c1	2438865 Apr 17 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Submitted/zundel_ac_water_JPCL_		
1704019.docx									
80	267	-rwx-----	1	jrehse	c1	170333 Apr 17 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Submitted/Response_170419.pdf		
83	906	-rwx-----	1	jrehse	c1	808535 Apr 17 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Submitted/_system_appendPDF_proof_hi-		
1.pdf									
66	3	drwx-----	2	jrehse	c1	8 Oct 15 14:02	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/EarlierVersions		
72	6172	-rwx-----	1	jrehse	c1	6173415 Apr 17 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/EarlierVersions/zundel_ac_water_SI_		
140419_BF.docx									
71	5655	-rwx-----	1	jrehse	c1	5647498 Apr 15 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/EarlierVersions/zundel_ac_water_SI_		
140419.docx									
69	3603	-rwx-----	1	jrehse	c1	3543151 Apr 15 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/EarlierVersions/zundel_ac_water_JPCL_		
1004019.docx									
67	18	-rwx-----	1	jrehse	c1	17165 Apr 15 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/EarlierVersions/Response_v1.docx		
68	19	-rwx-----	1	jrehse	c1	18874 Apr 17 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/EarlierVersions/Response_v1_BF.docx		
70	3603	-rwx-----	1	jrehse	c1	3545174 Apr 17 2019	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/EarlierVersions/zundel_ac_water_JPCL_		
1004019_BF.docx									
73	3	drwx-----	2	jrehse	c1	7 Oct 15 14:02	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Proofs		
78	4504	-rwx-----	1	jrehse	c1	4511559 Apr 22 16:12	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Proofs/proof_BF_ETJN.pdf		
75	1807	-rwx-----	1	jrehse	c1	1747821 Apr 21 07:36	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Proofs/jz9b00756_si_001.pdf		
76	4504	-rwx-----	1	jrehse	c1	4492326 Apr 21 07:36	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Proofs/proof.pdf		
74	1423	-rwx-----	1	jrehse	c1	1355261 Apr 21 07:36	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Proofs/edit_trace.pdf		
77	4504	-rwx-----	1	jrehse	c1	4470703 Apr 22 15:33	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/Proofs/proof_BF.pdf		
63	1807	-rwx-----	1	jrehse	c1	1747820 May 6 16:08	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/jz9b00756_si_001.pdf		
62	4504	-rwx-----	1	jrehse	c1	4518489 May 6 16:08	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/acs.jpcllett.9b00756.pdf		
64	3	drwx-----	2	jrehse	c1	3 Oct 15 14:02	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/ASAP		
65	1162	-rwx-----	1	jrehse	c1	1090582 Apr 23 21:00	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/ASAP/acs.jpcllett.9b00756.pdf		
59	1807	-rwx-----	1	jrehse	c1	1747917 Sep 4 13:10	./P133-Kundu_JPhysChemLett_2019_10_2287_SupplementalInfo.pdf		
57	45	-rwx-----	1	jrehse	c1	44507 May 15 14:02	./Paper_Definitief/Zundel-2DIR-JPCLet/ASAP/acs.jpcllett.9b00756.pdf		



Search results

Publication Period from to

Handle ▲	Title	Corresponding author	Expiration date	Deposit time	Archive size	State
C1-P-2018.02	Cr L-edge X-ray absorption spectroscopy of CrIII(acac)3 in solution with measured and calculated absolute absorption cross sections		11:35	Wed, 03.07.2019 11:35	44.17 MB	Archived
C1-P-2018.03	Soft x-ray spectroscopy of the amine group: hydrogen bond motifs in alkylamine/alkylammonium acid-base pairs		10:37	Tue, 02.07.2019 10:37	0.45 GB	Archived
C1-P-2018.07	Ultrafast vibrational relaxation and energy dissipation of hydrated excess protons in polar solvents		12:14	Tue, 15.10.2019 12:14	53.23 MB	Archived
C1-P-2019.02	Ultrafast proton transport between a hydroxy acid and a nitrogen base along solvent bridges governed by hydroxide/methoxide transfer					Archive error
C1-P-2019.03	Hydrated excess protons in acetonitrile/water mixtures: solvation species and ultrafast proton motions		14:10	Tue, 15.10.2019 14:10	0.46 GB	Archived
T4-P-2017.02	Simulating coherent multidimensional spectroscopy of nonadiabatic molecular processes: from the infrared to the X-ray regime		14:38	Thu, 27.06.2019 14:38	1.26 GB	Archived
T4-P-2018.01	Coupled excitation energy and charge transfer dynamics in reaction centre inspired model systems	Benjamin Philipp Fingerhut	Sun, 25.11.2029 23:01	Mon, 25.11.2019 23:01	0 Byte	Archived
T4-P-2018.02	Electron transfer pathways and dynamics in drosophila cryptochrome - the role of protein electrostatics	Benjamin Philipp Fingerhut	Sun, 25.11.2029 16:20	Mon, 25.11.2019 16:20	10.49 MB	Archived

Request copy

The copy size of your chosen archive entry **T4-P-2018.02** is about **10.49 MB**.

⚠ The copy process cannot be cancelled. Be sure you chose the right archive.

Cancel Request now

Show details Download content file list Request copy Extend retention period



|
Dear Thomas-Martin Kruel,

the copy job 1182 for good scientific practice archive

T4-P-2018.02

completed successfully.

SUCCESSFUL

The share for the archive copy

ingest:/egress/GSP/T4-P-2018.02
\\ingest\egress_GSP\T4-P-2018.02

has been created and is accessible.
The share will be deleted automatically 7 days from process start.