



Usnesení k podnětu zaslanému Etické komisi Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého dne 2. 6. 2020

Etická komise Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého (dále EtK PŘF UP) obdržela od děkana Přírodovědecké fakulty dne 2. 6. 2020 podnět (Příloha 1) týkající se podezření na fabrikaci dat:

Letter of Concern regarding the validity of data in [REDACTED].

Spectabilis, dear Dr. Kubala,
Hereby, I raise a concern regarding the validity of data published in [REDACTED]; most authors affiliated to the Faculty of Science, Palacký University Olomouc.

More specifically, I am concerned about the validity of data for photocurrent measurements reported in [REDACTED]. A close inspection reveals that the three photocurrent transients ([REDACTED] curves) recorded for three different samples ([REDACTED]) show identical noise and identical shape. This is practically impossible since: i) the noise of photocurrent measurements typically depends on fluctuations of the light source, fluctuations due to the potentiostat, and fluctuations due to redox chemical reactions (e.g., gas evolution) at the electrode/electrolyte interface; ii) the shape of photocurrent transients depends on the kinetics of interfacial charge transfer processes, which are unlikely to be identical during measurements at three different photoelectrodes.

Based on my long-standing experience in the field of photoelectrochemistry, I dare to raise a hypothesis that, most likely, only one of the reported curves has been obtained in a real measurement, while the other two have been fabricated, most probably by multiplication of data values from the first (real) measurement. I do not see any other plausible explanation for the identical noise and shape of all three curves. My data analysis and the original paper are enclosed below.

As I am well aware of the fact that this is not for the first time that research data published by the [REDACTED] raise suspicion of scientific misconduct, I suggest to you and the governing bodies of your faculty to investigate this matter, in collaboration with the corresponding authors, more closely.

Please feel free to forward this letter of concern to the corresponding authors of the paper, and to the members of your faculty's governing bodies responsible for these matters. However, please instruct clearly all recipients that this letter of concern is strictly confidential, and should not be publicized by any means.

Sincerely,

Prof. Dr. Radim Beránek

Enclosed:

- 1. Analysis of photocurrent transients*
- 2. PDF of the publication [REDACTED]*

Podstatou podání je shodnost šumu ve všech třech křivkách časové závislosti proudu na obrázku [REDAKCE], zatímco tyto by měly odpovídat měřením na odlišných vzorcích. Shodný vzor šumu je pozorován dále v Supplementary Information (SI) v obrázku [REDAKCE] a [REDAKCE] u vzorků, které měly být podle popisu měřeny z druhé strany. Celkem jde tedy o pět podezřelých křivek s různými hodnotami, které by měly pocházet z různých měření. Dále je zjevně shodný šum u voltamperometrických křivek v obrázku [REDAKCE] ([REDAKCE], vzorek [REDAKCE]) a obrázku [REDAKCE] v SI ([REDAKCE], vzorek [REDAKCE]). Etická komise se shoduje s názorem podavatele podnětu, že je nemožné, aby křivky z různých měření vykazovaly shodný vzorec šumu.

Etická komise PŘF UP oslovila všechny autory dané publikace. Korespondenční autoři [REDAKCE], [REDAKCE] a [REDAKCE], stejně jako další autoři [REDAKCE] a [REDAKCE] shodně uvedli, že příslušná měření prováděla [REDAKCE]. [REDAKCE] uvedl, že shoda existujících zdrojových souborů s publikovanými závěry ho utvrzují v přesvědčení, že šlo „ze strany [REDAKCE] o neúmyslné pochybení technického rázu“ (Příloha 2). [REDAKCE] uznali pochybení technického rázu a uvedli, že nadále bude s EtK PŘF UP komunikovat [REDAKCE] písemnou formou. [REDAKCE] uvedl: „Po důkladném prostudování dotčené publikace, jsme s kolegy bohužel nesprávnost použitých dat museli potvrdit. Nicméně jsme identifikovali data správná a ta byla podrobně analyzována. Naše analýza potvrdila správnost tvrzení a závěrů uvedených v článku.“ [REDAKCE] využil možnosti a dostavil se na jednání EtK PŘF UP.

Informace získané od jednotlivých autorů lze shrnout do následujících bodů:

- I. Z výpovědi [REDAKCE] se EtK PŘF UP dozvěděla, že se cítil dotčen, když nebyl [REDAKCE], [REDAKCE], okamžitě informován o zásadních pochybeních nalezených v publikaci, jíž byl spoluautorem (byl informován 22. 5., tj. pět dní po předání podnětu [REDAKCE], která [REDAKCE] informovala děkana o oprávněnosti podnětu). Rukopis byl zaslán do redakce časopisu [REDAKCE] den poté, co jej dostal k přečtení s žádostí o spoluautorství (s ohledem na použitou metodu úpravy vzorku, tzv. [REDAKCE]), rukopis bez příloh četl na zahraniční rodinné dovolené a se spoluautorstvím souhlasil. Termín urychleného odeslání rukopisu určovala lhůta pro zaslání rukopisů do sborníku z konference [REDAKCE]. Poté již o osudu rukopisu nebyl informován, o jeho vydání nevěděl, do výkazu publikační činnosti ani do závěrečné zprávy řešeného grantu jej neuvedl. Když [REDAKCE] zjistil, jaké nesrovnalosti se v článku nacházejí, požádal redakci časopisu o vyškrtnutí svého jména a informoval o celé situaci vedení [REDAKCE]. [REDAKCE] erudovaně podpořil svůj názor, že prezentované křivky neodpovídají reálným měřením, ale byly fabrikovány.
- II. [REDAKCE] byla komisí oslovena opakovaně stejnými otázkami a poskytla komisí několik reakcí (Příloha 3). Zásadní otázkou bylo, jak mohlo k dané „chybě technického rázu“ dojít, neboli jak se mohla stejná datová řada s konkrétním vzorem šumu dostat do tolika různých grafů, a to v různých škálách hodnot na ose y. Z pěti odpovědí [REDAKCE] lze vybrat následující relevantní informace (zvýrazněno Etickou komisí):
 1. „...že v uvedeném článku jsou vlivem technické chyby při analýze a zpracování dat vložena chybná data. ... Po důkladném překontrolování materiálů souvisejících s touto studií, byla identifikována chyba, kdy došlo k záměně datasetů. Pro vytvoření grafů v

předmětné publikaci, byla použita nesprávná data, která měla posloužit pro srovnávací analýzu, kterou při vyhodnocování dat běžně používám..."

2. „...správná zdrojová data, která byla poskytnuta redakci časopisu. ... Došlo k chybě technického ráze při práci s daty díky velké podobnosti obrázků... Chyba v ostatních grafech [REDAKCE], pozn. EtK PŘF UP] vznikla při odečtu koeficientu nárůstu/poklesu fotoelektrochemické aktivity mezi vzorky, kdy byly do publikace chybně použity křivky z těchto analýz. Bohužel, jak už jsem se jednou vyjádřila, došlo k neúmyslné chybě při vkládání správných dat do obrázku/článku..."
3. „Nechci se otázkám vyhýbat, ale dovolím si namítnout, že tyto dotazy mohou být irelevantní a svým způsobem i zavádějící.“
4. „Pro snadné a rychlé fotoelektrochemické srovnání vzorků jsem používala hrubé simulace nárůstu proudové hustoty připravených vzorků oproti standardu [REDAKCE] při zanedbání kvalitativního průběhu křivek (jednoduchým hrubým vynásobením proudové hustoty standardu dle získaných experimentálních hodnot proudových hustot studovaných materiálů). ... Bohužel při vkládání křivek do manuskriptu jsem se dopustila chybného vložení těchto pracovních simulací namísto měřených dat vyvinutých hybridních materiálů. ... Ke všem křivkám navíc existují zdrojová data a křivky z nich vytvořené dávají shodnou fyzikálně chemickou interpretaci...“
5. „Nejprve bych ráda upravila termín simulace.... Já jsem simulací osobně myslela/popisovala osobní, poměrně rychlou operaci, kdy jsem dokázala rychle stanovit a graficky porovnat aktivitu studovaného vzorku se standardem. ... Uvedený postup tak nebyl v žádném případě „simulací“ v matematickém slova smyslu, ale spíše jednoduchou formou mého osobního grafického znázornění pro účely posouzení nárůstu aktivity tak, aby mohla být poskytnuta zpětná informace pro materiálovou optimalizaci.“

Etická komise konstatuje, že u grafů voltamperometrických (VA) charakteristik ([REDAKCE]) lze pochopit chybu technického rázu, kdy do publikace mohla být omylem vložena místo dvou podobně vypadajících grafů jedna křivka, neboť v těchto grafech se jedná o stejnou datovou řadu se stejným šumem bez dalších zjevných odlišností či úprav. „Správná“ data k těmto dvěma křivkám však autoři nedodali.

U [REDAKCE] jde o křivky se stejným šumem lišící se multiplikativní konstantou. V citovaných reakcích se uvedená chyba prezentuje jako technického rázu a měla vzniknout chybným vložení křivek, které byly fabrikovány násobením datové řady změřené u srovnávacího standardního vzorku konstantou, pomocí které měl být odhadnut nárůst či pokles fotokatalytické aktivity vyšetřovaného [REDAKCE] materiálu. Etická komise PŘF UP je toho názoru, že fabrikace žádoucí křivky a snaha najít její obdobu v reálných datech není vhodný vědecký postup.

- III. Profesor Beránek zaslal EtK PŘF UP také dodatečný rozbor (Příloha 4), určený primárně pro [REDAKCE], ve kterém se vyjadřuje k vysvětlení [REDAKCE] prezentovanému na [REDAKCE] dne [REDAKCE]. Ve shodě s [REDAKCE] uvádí, že „hrubé simulace nárůstu proudové hustoty“ nedávají z vědeckého hlediska žádný smysl, jelikož pouhým vynásobením datasetu a jeho vynesení do grafu není možné získat žádnou užitečnou informaci. Za naprosto absurdní považuje simulovat porovnání proudových hustot při měření frontside vs. backside ([REDAKCE]), jelikož přesný poměr fotoproudů při backside vs. frontside ozařování je těžko předvídatelný, neboť závisí na morfologii a porositě fotoelektrody.

Součástí rozboru prof. Beránka je také posouzení „správných“ dat, dodaných do redakce časopisu v červnu [REDAKCE]. Zdrojové datové soubory příslušné k těmto nově dodaným křivkám fotoproudů byly dodány spolu s obrazovým srovnáním starých a nových grafů (viz Příloha 1). Podle časového záznamu v souborech pojmenovaných [REDAKCE] se jedná o vzorky analyzované v časovém rozpětí od 17. 10. 2016 do 3. 4. 2017 (výsledky pak byly prezentovány na konferenci v roce 2018 a publikovány v roce [REDAKCE]). Profesor Beránek upozorňuje na nedůvěryhodnou skutečnost, že tři křivky porovnávané ve [REDAKCE] byly dle dodaných datasetů měřeny ve dnech 17. 10. 2016, 16. 2. 2017 a 3. 4. 2017, navíc na elektrodách lišících se velikostí (jakkoli autoři následně argumentují tím, že plocha elektrody je ad hoc záznamem v datovém souboru a je v tomto souboru uvedena mylně).

Etická komise PŘF UP dále konstatuje, že křivka fotoproudu vzorku standardu [REDAKCE] v nově dodaných datech je jiná než původní křivka standardu, a že jí není známo, že by byla komisi, redakci časopisu či vedení PŘF dodána opravená data k [REDAKCE] křivkám na [REDAKCE] a [REDAKCE].

IV. Na opakovaný apel [REDAKCE] souhlasila s nahlédnutím do svého laboratorního deníku, setkání [REDAKCE] a [REDAKCE] se zástupci EtK PŘF UP se uskutečnilo 21. 9. 2020. Podle čísel vzorků je lze přiřadit k nově dodaným křivkám (viz Příloha 1) následovně:

- Soubor [REDAKCE] ze 17. 10. 2016. Dle nových dat a grafů autorů z června 2020 jde o vzorek [REDAKCE], front side illumination, new [REDAKCE] a také [REDAKCE].
- Soubor [REDAKCE] ze 7. 11. 2016. Dle nových dat [REDAKCE], back side illumination (ale jiný vzorek), [REDAKCE].
- Soubor [REDAKCE] z 16. 2. 2017. V nových datech [REDAKCE], vzorek standardu.
- Soubor [REDAKCE] ze 3. 4. 2017. Dle nových dat back side [REDAKCE], [REDAKCE] – šum i v neosvitové fázi, ale může zřejmě jít o artefakt režimu přístroje.
- Soubor [REDAKCE] ze 3. 4. 2017. Dle nových dat jde o front side illumination [REDAKCE], [REDAKCE], [REDAKCE].

Pravost deníku nešlo zběžným prohlédnutím dokázat ani vyloučit, deník ale neobsahoval, kolikrát se opakovaně na daném vzorku měřilo, a zejména neobsahoval detailnější popis charakteru vzorku, např. [REDAKCE] či [REDAKCE], pouze explicitně uvedenou informaci, že vzorky poskytl [REDAKCE]. Sama autorka deníku nedokázala zodpovědět tyto podrobnější dotazy k měřením, což vysvětlovala tím, že si to již nepamatuje. Deník tak není dobrým příkladem pečlivé vědecké práce se záznamy, ke kterým by se mohl v případě pochybností vracet sám výzkumník.

Z deníku je naopak patrné, že vzorek standardu byl časově měřen mezi analýzami vzorků [REDAKCE] a [REDAKCE]. S ohledem na strohost záznamu v laboratorním deníku je tudíž otázkou, jak by autorka mohla pomocí únorového měření posoudit správnost jakékoliv křivky naměřené na podzim předchozího roku.

V. Etická komise PŘF UP dále získala emailové vyjádření spoluautora publikace [REDAKCE], který již nepracuje na PŘF [REDAKCE] a který pro analýzu [REDAKCE] připravoval [REDAKCE] označené v článku jako [REDAKCE] a [REDAKCE], určené k modifikaci povrchů vzorků po [REDAKCE]. [REDAKCE] uvádí, že oba druhy vzorků předával [REDAKCE] ve stejný den. Z vyjádření tohoto autora (Příloha 5)

nicméně jednoznačně vyplývá, že na přípravě vzorků začal pracovat až v prosinci 2016. Svůj pracovní poměr na [REDAKCE] započal 7. listopadu 2016, což je v souladu s informacemi z Personálního a mzdového oddělení PŘF UP. [REDAKCE] tedy nemohl [REDAKCE] předat své vzorky v říjnu či začátkem listopadu 2016 a údaje v předloženém deníku je tudíž nutno hodnotit jako dodatečně účelově upravené.

VI. [REDAKCE] při setkání s EtK PŘF UP jasně nezodpověděl otázku, kdo a na jakém pracovišti provedl [REDAKCE] („mohl jsem to být i já“). Na přímou otázku také odpověděl, že nepovažuje za nutné, aby k modifikaci povrchů vzorku pomocí [REDAKCE] došlo bezprostředně po [REDAKCE], což je v rozporu s tvrzením [REDAKCE] (autora této technologie), podle kterého je nutné vzorky zpracovat v řádu desítek minut, maximálně hodin (proto [REDAKCE] vzorků nebylo možné provádět v Praze).

VII. Po opakovaných žádostech [REDAKCE] poslala Etické komisi původní publikovanou datovou řadu časové závislosti fotoproudu. Vykreslením dodané řady lze konstatovat velkou míru shody šumu i velikosti signálu se [REDAKCE] křivkou v původním [REDAKCE] pro vzorek standardu [REDAKCE]. Dodaná řada byla zapsána v souboru formátu MS Excel bez náležitých identifikačních informací a na vyžádání byla doplněna informací: „číslo vzorku [REDAKCE] standardu původní datové řady si bohužel nepamatuji, neměla jsem ho nikde poznamenané, nebylo to pro mne v danou chvíli podstatné. Jinými slovy, jak jsem již uvedla dříve, jednalo se o standard [REDAKCE], se kterým jsem pracovala dlouhodobě. Bohužel, z tohoto důvodu Vám ho ani nemohu poslat jako DTA soubor.“

Dle výše uvedeného autorka nedodala zdrojová data v originálním formátu ke křivce standardu v původní publikaci a není ani jasné, kdy byl vzorek měřen, přestože vydavatelství Elsevier uvádí ve svých pravidlech publikační etiky (www.elsevier.com/about/policies/publishing-ethics) zcela jednoznačně:

- „Authors may be asked to provide the research data supporting their paper for editorial review and/or to comply with the open data requirements of the journal. Authors should be prepared to provide public access to such data, if practicable, and should be prepared to retain such data for a reasonable number of years after publication.“

VIII. Osoba korespondenčního autora čerpá z impaktované publikace přijaté do časopisu prestiž. Už jen z tohoto důvodu EtK PŘF UP považuje sdílení pozice korespondenčního autora za nevhodnou praxi, jež navozuje pochyby o motivaci takového sdílení role. S příslušnou (prestižní) pozicí se však váže i zodpovědnost korespondenčního autora za správnost finální podoby publikace. Vyvazování se z této zodpovědnosti v případě problémů je proti smyslu vyzdvihování vybraných autorů jako korespondenčních. Pokud [REDAKCE] uvedl, že správná data „dohledali a analyzovali“, vyplývá z toho, že za tuto činnost přijímá jako korespondenční autor zodpovědnost. Pokud v pozdější komunikaci, poté, co se objeví pochybnosti o pravosti těchto dat, specifikuje své původní tvrzení: „Realita byla taková, že data v potenciostatu dohledala jen a pouze [REDAKCE] a vypracovala nové korektní grafy, protože pouze ona byla autorkou těchto měření a i přes největší snahu, bych této analýzy nebyl schopen.“, lze to považovat za účelové vyvazování se z této odpovědnosti.

Navíc, zasláním rukopisu do redakce časopisu autoři deklarují, že se seznámili s pravidly publikační etiky daného vydavatelství. V případě Elsevieru (www.elsevier.com/about/

policies/publishing-ethics) se konkrétně vyžaduje zcela jednoznačná zodpovědnost jednoho každého autora za přesnost a integritu celé publikace:

- „*Authors take collective responsibility for the work. Each individual author is accountable for ensuring that questions related to the accuracy or integrity of any part of the work are appropriately investigated and resolved.*“

IX. Poté, co byli korespondenční autoři seznámeni s návrhem tohoto usnesení, reagoval [REDAKCE] velmi pohoršeně a argumentoval tím, že má důkazy o své nevině (Příloha 6). Na výzvu EtK PŘF UP však důkazy nepředložil, což zdůvodňoval svou snahou nelegitimizovat postup EtK PŘF UP. Tento přístup není v souladu s jím deklarovanou součinností (Příloha 2). Ani [REDAKCE], ani [REDAKCE] nedokázali vysvětlit, jak se mohl vzorek označený jménem spolupracovníka, [REDAKCE], objevit v laboratorním deníku před nástupem tohoto kolegy na pracoviště. Etická komise PŘF UP souhlasí s tvrzením [REDAKCE], „že je výsostným právem operátora vést si své označení vzorků a činit si poznámky k nim, ať už v průběhu měření či zpětně.“ Zároveň však EtK PŘF UP konstatuje, že toto právo není neomezené a i v Etickém kodexu je výslovně specifikováno (část I, odst. 7): „*Zaměstnanec a student UP obhájí svobodu myšlení, bádání, vyjadřování, výměnu názorů a informací. Ve své tvůrčí činnosti, v pedagogické činnosti a v rámci studia nezastává neobjektivní ideologické či iracionální přístupy...*“ Na dodatečné doplňování nepravdivých či zavádějících informací v laboratorním deníku, bez přímé logické či reálné časové souslednosti s postupem analýzy vzorků, je tudíž možno nahlížet jako na chování neetické a nevědecké. [REDAKCE] v písemné komunikaci (Příloha 7) zdůrazňuje: „*Naposledy zde uvádím, že [REDAKCE] se mnou žádná správná data nedohledával. Data neměřil, nezpracovával, nezapisoval. Jeho obvinění je tak naprosto bezprecedentní manipulace s fakty.*“ Etická komise PŘF UP k tomu dodává, že předchází tvrzení [REDAKCE] o její výlučné osobní zodpovědnosti se týkala pouze její role při měření dat a tvorbě grafů (tj. problému fabrikace dat v publikaci), nikoliv následného dohledání „správných“ dat (tj. falzifikace dat při snaze fabrikaci vysvětlit).

Zároveň oba autoři v tomto posledním emailu uvádějí, že nedůvěřují jednání EtK PŘF UP a její nezávislosti (viz Přílohy 6 a 7). Etická komise PŘF UP považuje tento postoj za neodůvodněný, neboť usnesení EtK PŘF UP bylo upraveno na základě některých námitek, které komise shledala jako oprávněné, či stavějící se konfrontačně k podružnostem, a také přihlédla k novým faktům v prohlášení [REDAKCE] o své roli při dohledání správných dat.

Závěr: Etická komise PŘF UP konstatuje, že se [REDAKCE] nepodařilo důvěryhodně vysvětlit, jak mohla vytvořit omylem tolik nesprávných grafů v jedné publikaci pouhou záměnou reálně naměřených dat za „pomocnou křivku predikující jednoduchou operací výsledek měření“. S přihlédnutím ke všem výše zmíněným informacím jsou dle názoru EtK PŘF UP původní data fabrikovaná (to ostatně konstatují i sami autoři) a data zaslaná v červnu 2020 do redakce falzifikovaná. Autoři publikace sice deklarují součinnost a upozorňují na možná svědectví, nicméně důkazy nepředkládají s odůvodněním, že považují jednání EtK PŘF UP za předpojaté.

Etická komise PŘF UP konstatuje, že došlo k porušení Etického kodexu zaměstnanců a studentů Univerzity Palackého v Olomouci (část III, odstavec 4 „Vědecký pracovník při zveřejňování svých poznatků a výsledků dbá na jejich úplnost, ověřitelnost a objektivní interpretaci.“ a odstavec 5 „Vědecký pracovník po zveřejnění svých výsledků uchovává primární data a dokumentaci po dobu obvyklou v příslušném oboru, pokud tomu nebrání jiné legitimní závazky nebo předpisy.“) i publikační etiky obecně. Už jen počet chyb v jednom článku a vágní způsob obhajoby by vedl komisi k závěru, že se nejednalo o nevědomou chybu technického rázu.

Důležitější je však způsob, jak se snažila [REDAKCE] následně postupovat. Nově dodaná data vydávala za správná, což zpochybňují zápisy v laboratorním deníku odpovídající sice kódům nově dodaných vzorků, ale se jménem spoluautora článku, který v laboratoři v té době ještě nepracoval. Jedná se pravděpodobně o pokus o cílenou manipulaci, jež mj. porušuje i Etický kodex (část III, odstavec 13 „Objeví-li vědecký pracovník ve svých publikacích omyl, podnikne všechny potřebné a možné kroky k jeho nápravě, nesnaží se jej tajit nebo maskovat.“).

Ať už ostatní autoři o fabrikaci a falzifikaci dat věděli, či nevěděli, část viny je i na jejich bedrech, jelikož souhlasem s publikováním rukopisu v časopisu vydávaném společností Elsevier se k této zodpovědnosti zavázali.

Doporučení Etické komise Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého pro děkana PŘF UP

Etická komise doporučuje děkanovi PŘF UP okamžitě ukončit habilitační řízení [REDAKCE].

Toto usnesení je jednomyslné, což členové komise stvrzují svým podpisem.

V Olomouci, 21. 12. 2020

prof. RNDr. Petr Jančar, CSc.

.....

Mgr. Jiří Kvita, Ph.D.

.....

doc. Ing. Ivo Machar, Ph.D.

.....

RNDr. Jana Skopalová, Ph.D.

.....

doc. RNDr. Mgr. Ivan Hadrián Tuf, Ph.D.
předseda EtK PŘF UP

.....

Seznam příloh

Příloha 1: Původní podnět prof. Beránka včetně příloh.

Příloha 2: Odpověď [REDACTED], [REDACTED], [REDACTED] a [REDACTED].

Příloha 3: Odpovědi [REDACTED].

Příloha 4: Doplnění podnětu prof. Beránkem.

Příloha 5: Odpověď [REDACTED].

Příloha 6: Ohrazení se [REDACTED] proti návrhu usnesení.

Příloha 7: Ohrazení se [REDACTED] proti návrhu usnesení.