

NAČRT ZA RAVNANJE Z RAZISKOVALNIMI PODATKI

0	Splošne informacije	
0.1	Šifra projekta	N1-0483
0.2	Naziv projekta	Ionske tekočine in nano-gline pri odstranjevanju PFAS iz vodnih medijev
0.3	Šifra vodje projekta	21418
0.4	Ime in priimek vodje projekta	Matija Tomšič
0.5	Ime in priimek osebe, ki je v RO zadolžena za podporo pri ravnanju z raziskovalnimi podatki	Kontaktna oseba UL FKKT: Branko Škrinjar Splošni kontakt mreže UL: raziskovalni.podatki@uni-lj.si
0.6	Interna pravila RO za ravnanje z raziskovalnimi podatki	Pravila so objavljena na spletni strani: https://www.uni-lj.si/raziskovanje/odprta-znanost/politike
0.7	Verzija NRRP	1.0
1	Povzetek in opis raziskovalnih podatkov	
1.1	Ali boste pri projektu ponovno uporabili že obstoječe podatke predhodnih raziskav?	☒ Da ☐ Ne Ponovna uporaba: Uporabljeni bodo objavljeni podatki iz literature, parametri in dokumentacija polj sil, referenčni molekularni modeli, standardni postopki obdelave sipalnih podatkov ter po potrebi lastni podatki predhodnih raziskav. Namen ponovne uporabe je izbira in validacija modelov, primerjava novih meritev z referenčnimi rezultati ter preverjanje metod obdelave. Obseg NRRP: slovenski del N1-0483; Samostojni podatkovni sklopi madžarskega dela projekta, niso vključeni v ta NRRP.
1.2	Katere vrste podatkov boste ustvarili oz. ponovno uporabili in v katerih formatih bodo shranjeni?	SAXS: surovi 1D odčitki; profili primarnega žarka; reducirane sipalne krivulje z eksperimentalno negotovostjo na eksperimentalni ali absolutni skali. SWAXS: surovi 2D odčitki; profila primarnega žarka; reducirane sipalne krivulje z eksperimentalno negotovostjo na eksperimentalni ali absolutni skali. MD: topologije, začetne konfiguracije, parametri in polja sil; trajektorije; izhodne datoteke in dnevnik; porazdelitvene funkcije, konformacije, vodikove vezi, difuzija in viskoznost. Teoretično-računski: teoretične sipalne krivulje, delni prispevki, ključni vmesni rezultati absorpcijske korekcije; po potrebi gostota, viskoznost in površinska napetost. Formati: PDH formati, CSV/TSV, TXT; instrumentalni 2D formati in po potrebi TIFF; XTC/TRR/GRO/PDB ali ekvivalent; .py, .f90 in .f95.
1.3	Kakšen je namen ustvarjanja, zbiranja oz. ponovne uporabe podatkov in njihova povezava s cilji projekta?	Namen podatkov: Podatki bodo namenjeni kvalitativnemu in kvantitativnemu preučevanju vzorcev s strukturnega, dinamičnega, reološkega in širšega fizikalno-kemijskega vidika. Surovi, obdelani in izpeljani podatki bodo podlaga za preverjanje ponovljivosti, skupno interpretacijo, pripravo publikacij in podatkovnih objav. Podatki, ki podpirajo posamezno publikacijo, bodo z njo povezani s trajnim identifikatorjem. Povezava s cilji projekta: Eksperimentalni podatki bodo uporabljeni za karakterizacijo materialov, spremljanje interakcij in primerjavo učinkovitosti različnih sistemov. Podatki SWAXS bodo zagotovili strukturno informacijo in podlago za razvoj ter preverjanje absorpcijskih korekcij. Simulacije molekulske dinamike

		in teoretične sipalne krivulje bodo omogočile mikroskopsko interpretacijo eksperimentalnih rezultatov in kritično ovrednotenje uporabljenih modelov. Ponovno uporabljeni podatki bodo služili kot referenca, vhod v modele in podlaga za validacijo.
1.4	Kakšna je pričakovana velikost podatkov, ki jih nameravate ustvariti oz. ponovno uporabiti?	☐ 0–10 GB ☐ 10–100 GB ☒ 100–1000 GB ☐ >1000 GB
2	Shranjevanje in varnostno kopiranje podatkov	
2.1	Kje bodo podatki med izvajanjem projekta shranjeni in varnostno kopirani?	Hramba: ločeno raw, processed, analysis, figures, scripts in metadata; primarna hramba na institucionalnih računalniških virih UL FKKT oziroma skupine z nadzorom dostopa. Varnostne kopije: redno podvajanje na dodatno lokacijo (skupinski strežnik, institucionalna storitev ali zunanji disk). Dokumentiranje: dosledno poimenovanje datotek; ob meritvi ali simulaciji sestava, pogoji in parametri; jasno označene različice kode in dokumentirane bistvene spremembe.
2.2	Kako boste izbrali podatke za dolgoročno hrambo?	Dolgoročno bodo na institucionalnih računalniških virih UL FKKT shranjeni surovi podatki, na zaupanja vrednih repozitorijih pa tudi izbrani podatki, ki podpirajo rezultate: obdelane SWAXS krivulje z negotovostmi, teoretične sipalne krivulje, ključni vhodni podatki za MD, skripte za analizo in metapodatki.
2.3	Ali bodo podatki shranjeni v zaupanja vrednem repozitoriju?	☒ Da ☐ Ne Repozitorij: Repozitorij Univerze v Ljubljani (RUL) https://repozitorij.uni-lj.si/ ali drugi, zaupanja vreden področni repozitorij.
3.	Zagotovitev podatkov na način FAIR	
3.1	Zagotavljanje najdljivosti podatkov (F)	
3.1.1	Ali bodo podatki označeni s trajnim identifikatorjem (PID)?	☒ Da ☐ Ne PID, ki ga dodeli Repozitorij Univerze v Ljubljani (RUL) ali drugi zaupanja vreden področni repozitorij.
3.1.2	Kateri metapodatki bodo ustvarjeni in kateri metapodatkovni standardi bodo pri tem upoštevani?	Metapodatki: sestava vzorca, merilni pogoji in parametri; simulacijske topologije, konfiguracije, parametri in polja sil; opis obdelave in različice kode. Standardi: tisti, ki jih zahteva RUL oziroma izbrani repozitorij. Podatki bodo opisani v dokumentirani tekstovni datoteki README.
3.1.3	Ali bodo metapodatki vsebovali ključne besede za izboljšanje najdljivosti in možnosti ponovne uporabe?	☒ Da ☐ Ne Ključne besede: PFAS, ionske tekočine, nano-gline, SWAXS, molekulska dinamika.
3.2	Zagotavljanje dostopnosti podatkov (A)	
3.2.1	Ali bodo vsi podatki odprto dostopni?	☒ Da ☐ Ne Odprto dostopni bodo vsi podatki, povezani z objavljenimi rezultati.
3.2.2	Kdaj bodo podatki odprto dostopni in za koliko časa?	Podatki, ki podpirajo publikacijo, bodo odprto dostopni najpozneje ob njeni objavi; preostali izbrani podatki ob zaključku projekta. Dostop bo trajen.
3.2.3	Na kakšen način bo v primeru omejitev pri uporabi omogočen dostop	Ni relevantno; omejitve dostopa niso načrtovane.

	do podatkov med izvajanjem projekta in po njegovem zaključku?	
3.2.4	Ali bo za dostop do podatkov oz. njihovo branje potrebna dodatna dokumentacija oz. informacija o ustrezni programski opremi?	☐ Da ☒ Ne
3.3	Zagotavljanje interoperabilnosti podatkov (I)	
3.3.1	Katere geslovnike oz. šifrante boste uporabili pri pripravi podatkov in metapodatkov?	Uporabljena bodo gesla in šifranti s področja: splošni: Dublin Core Metadata Terms (DCMI), IUPAC-nomenklatura, enote SI ter identifikatorji snovi InChI/InChIKey oziroma SMILES.
3.3.2	Ali boste primorani uporabiti manj poznane ali lastne geslovnike oz. šifrante?	☐ Da ☒ Ne Morebitni interni identifikatorji vzorcev bodo pojasnjeni v metapodatkih.
3.4	Zagotavljanje ponovne uporabe podatkov (R)	
3.4.1	Na kakšen način boste zagotovili dokumentacijo, potrebno za ponovno uporabo podatkov?	Vsak objavljeni podatkovni sklop bo vseboval datoteko »preberi me« s pojasnili glede podatkov in vira osnovne objave rezultatov, ki bo vsebovala pojasnila dodatnih podrobnosti izvedene raziskave.
3.4.2	Ali bodo vaši podatki javno dostopni in licencirani z odprtima licencama CC BY oz. CC BY-SA, da bo s tem omogočena čim širša ponovna uporaba?	☒ Da ☐ Ne
3.4.3	Kakšne postopke zagotavljanja kakovosti podatkov boste uporabili?	Kalibracija in ponovitve meritev; preverjanje konvergence simulacij.
4.	Etični in pravni vidiki	
4.1	Ali obstajajo etična ali pravna vprašanja, ki bi lahko vplivala na deljenje podatkov?	☐ Da ☒ Ne
4.2	Ali boste med izvajanjem projekta obdelovali oz. hranili osebne podatke?	☐ Da ☒ Ne
4.3	Ali bodo med projektom ustvarjene oz. ponovno uporabljene posebne vrste osebnih podatkov?	☐ Da ☒ Ne

4.4	Kako boste uredili lastništvo podatkov in morebitne avtorske pravice na podatkih, ki jih boste ustvarili ali ponovno uporabili?	Lastnik avtorskih pravic in intelektualne lastnine podatkov bo Univerza v Ljubljani ali partnerske ustanove.
5.	Drugi raziskovalni rezultati	
5.1	Ali boste poleg podatkov ustvarili ali ponovno uporabili tudi druge raziskovalne rezultate?	☒ Da ☐ Ne Drugi rezultati: programska koda, skripte za absorpcijsko korekcijo in analizo podatkov, teoretične metode in modeli.
6.	Finančna sredstva	
6.1	Kakšni bodo stroški ravnanja s podatki in drugimi rezultati projekta po načelih FAIR in kako bodo kriti?	Stroški urejanja, dokumentiranja in hrambe podatkov se krijejo iz sredstev projekta ter z uporabo obstoječe infrastrukture UL FKKT in RUL.
6.2	Kdo bo odgovorna oseba za ravnanje z raziskovalnimi podatki pri projektu?	Matija Tomšič, vodja ARIS dela projekta.

Uporabljeni viri:

- *Anotirana predloga načrta za ravnanje s raziskovalnimi podatki za projekte Obzorja Evropa*. CTK UL. Dostopno na: <https://dirrodata.ctl.uni-lj.si/raziskovalni-podatki/nacrt-ravnanja-z-raziskovalnimi-podatki/>.
- Bezjak, Sonja (ur.) (2024). *Spoznaj FAIR: Priročnik o odprti znanosti v Sloveniji*. Univerza na Primorskem. Dostopno na: <https://www.hippocampus.si/ISBN/978-961-293-328-9.pdf>.
- *Horizon Europe Data management plan template*. Dostopno na: <https://www.openaire.eu/images/Guides/HORIZON EUROPE Data-Management-Plan-Template.pdf>.
- *NWO Template Data management plan*. Dostopno na: <https://www.nwo.nl/en/research-data-management>.

Verzija dokumenta: 1.0 z dne 15. 10. 2024

Datum priprave: 19. 08. 2026