Plan Overview

A Data Management Plan created using DMP Tool

DMP ID: https://doi.org/10.48321/D10C7D

Title: Synthesis of Chalcogen-BODIPYs for Bio-Analytics and Theranostic Applications

Creator: Alcindo DosSantos - **ORCID:** 0000-0003-0358-610X

Affiliation: Universidade de São Paulo (www5.usp.br)

Funder: São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

Template: Digital Curation Centre (português)

Project abstract:

The project deals with the synthesis of chalcogen-BODIPYs and photophysical studies of them so that they will be used as fluorescent sensors in the detection of various analytes, especially those of biochemical interest. In collaboration, theranostic applications will be investigated. The synthetic targets will be centered on BODIPYs and *aza*-BODIPYs nuclei, by structural modifications seeking to insert residues containing the atoms of S, Se and Te, which will mediate central photophysical events for the intended applications, such as the mediation of fluorescence *quenching* events (heavy atom effect) in addition to contributing to applications in Photodynamic Therapy – PDT. When in the presence of oxidizing species (especially those of biological importance), the corresponding chalcogenoxides/chalcogenones may be formed, inhibiting the PeT effect, re-triggering the fluoresces (*turn-on*). This kind of mechanisms should bring contributions to its applications such as *on/off*-fluorescence-sensors capable of detecting endogenous oxygen and nitrogen reactive species (ROS, RNS), allowing *in vitro* as well as *in vivo* applications. It is noteworthy that the functionalization of chromophoric nuclei will allow the observation of significant bathochromic displacements in the absorption spectrum (due to steric effects and heavy atom effect) in order to obtain fluorescent compounds in the near infrared region (IVP), making them very attractive for applications in biological systems.

More specifically, in terms of applications, photophysical studies (absorption, emission, lifetime - excited state) of the compounds through ROS and RNS, studies of the interactive process with biomolecules (DNA and albumins HSA and BSA – collaboration with Prof. Bernardo Almeida Iglesias - UFSM) and with analytes of environmental interests (metal ions – collaborations with prof. Dr. Carlos Lodeiro Espiño - UNL/Portugal and Prof. Iolanda Cucovia - IQ-USP), anchoring these chromophores on the surfaces of nanoparticles (prof. Koiti Araki - IQ-USP) and also the

ability to generate singlet oxygen (Prof. Mauricio Batista - IQ-USP) since these compounds have the potential to be used in photodynamic therapy (PDT).

Different models and approaches will be used with the purpose of offering new diagnostic and therapy alternatives and for this end we should also have the collaboration of Prof. Mario Hirata (FCF-USP), who has continuous performance and collaborations with various research groups in the medical/clinical area.

Start date: 10-01-2021

End date: 09-01-2023

Last modified: 07-08-2024

Copyright information:

The above plan creator(s) have agreed that others may use as much of the text of this plan as they would like in their own plans, and customize it as necessary. You do not need to credit the creator(s) as the source of the language used, but using any of the plan's text does not imply that the creator(s) endorse, or have any relationship to, your project or proposal

Synthesis of Chalcogen-BODIPYs for Bio-Analytics and Theranostic Applications

Coleta de Dados

Que dados serão coletados ou criados?

O projeto prevê a execução experimental de procedimentos químicos que terão como resultado, a geração de compostos químicos, inéditos que serão devidamente caracterizados e submetidos a ensaios analíticos e bioquímicos. Com isso, serão gerados dados de diversas naturezas, incluindo os relativos a detalhes de procedimentos experimentais, coletados em "Cadernos de Laboratório" numerados, que ficarão armazenados e acondicionados no próprio laboratório de pesquisa. Serão, em decorrencia dos procedimentos experimentais adotados, também geradas amostras dos compostos químicos, que serão catalogadas e armazenadas com códigos que seguem a seguinte sistematica (AAS-XYZ-2n-nn), sendo: AAS, as iniciais do nome do coordenador do laboratorio (prof. Alcindo A. dos Santos), XYZ, designação genérica das iniciais do nome do aluno executor, 2n, final do ano correspondente e nn, os ultimos 2 digitos, referentes a pagina do Caderno de Laboratório em que as anotações foram feitas. Além dos dados manuscritos registrados no Caderno de Laboratório, os eletronicos, coletados de equipamentos utilizados para condução de comprovações analiticas, serão registrados em hard disk e nuvem da base de dados do laboratório.

Como os dados serão coletados ou criados?

Serão coletados por anotações feitas pelos executores dos procedimentos experimentais, nos cadernos de laboratorio, que seguirão sistematica de catalogação ja descrita. Também serão salvas em formato eletronico e arquivados em base de dados fisica e nuvem.

Documentação e Metadados

Que documentação e metadados acompanharão os dados?

Dados de formato eletrônico e impresso, quando for o caso (manuscrito, digitalizados), comporão o conjunto de informações geradas.

Ética e Conformidade Legal

Como você administrará qualquer questão ética?

mediante apresentação do projeto devidamente descritivo à Comissão de Ética institucional apropriada.

Como você vai gerenciar os direitos autorais e os direitos de propriedade intelectual (IP / IPR)?

considerando a participação dos membros da equipe, diretamente envolvidos no desenvolvimento intelectual do resultado gerado, em decorrencia da pesquisa desenvolvida, com tutela e orientação da

Agencia USP de Inovação (AUSPIN).

Armazenamento e Backup

Como os dados serão armazenados e terão backup durante a pesquisa?

O armazenamento das informações deverá ser realizado por manutenção de copias fisicas mas especialmente em nuvem (drive), disponibilizada no pacote gmail contratado pelo IQ-USP.

Como você vai gerenciar o acesso e a segurança?

O armazenamento será realizado em nuvem (drive), de acesso e responsabilidade do coordenador do laboratorio, por sua conta institucional

Seleção e Preservação

Quais dados são de valor a longo prazo e devem ser mantidos, compartilhados e / ou preservados?

Dados decorrentes de trabalhos experimentais realizados por alunos e pesquisadores, serão mantidos, armazenados, por anotações em copias fisicas (cadernos de laboratorio), em formatos eletronicos (dados analiticos: espectros, planilhas (dados vetorizados), fotos, registros e textuais digitalizados.

Qual é o plano de preservação a longo prazo do conjunto de dados?

Os dados considerados perenes, eletronicos, terão suas integridades avaliadas com frequencia bienal e os cuidados de manutenção deverão seguir as atualizações das ferramentas eletronicas disponibilizadas. Os de formato impresso (cadernos de laboratorio, teses e dissertações), serão mantidos, sob cuidados do coordenador do grupo de pesquisa (prof. A. A. Dos Santos) em deposito fisico apropriado.

Compartilhamento de Dados

Como você vai compartilhar os dados?

Quando necessario e oportunamente, os dados que carecerem de compartilhamento deverão ser disponibilizados por copias ou reproduções dos originais.

Existem restrições ao compartilhamento de dados requeridos?

com excessão dos dados que deverão ser empregados para deposito de patente, até que o sejam e mereçam tratamento de sigilo, os demais, se requeridos, poderão ser compartilhados e o serão pelo formato mais apropriado

Responsabilidades e Recursos

Quem será responsável pelo gerenciamento de dados?

O gerenciamento dos dados gerados, armazenados, serão de responsabilidade do coordenador do laboratorio, prof. A. A. Dos Santos e Sr. Marcos V. L. R. Archilha, designado como co-responsavel pela tarefa.

Quais recursos você precisará para entregar seu plano?

os adquiridos com infraestrutura disponibilizada pela instituição e agencias de fomento.