



ERC ADVANCED GRANT 2019

VPRAŠANJA IN ODGOVORI

Kakšen je naslov novega ERC projekta?

Naslov novega ERC projekta je 'Večskalni simulacijski pristopi za biomedicinske ultrazvočne aplikacije' ali na kratko 'MULTraSonicA'.

Kaj je namen oz. cilj projekta?

Glavni cilj projekta je s pomočjo novih fizikalnih modelov zagotoviti do sedaj nedosegljiv nadzor ultrazvočne dostave zdravil na ciljana (obolela) mesta v tkivih. V okviru projekta bodo raziskovalci razvijali nove mezoskopske modele plinskih veziklov, ki bodo omogočali natančen opis njihovih reoloških in akustičnih lastnosti, ki kritično vplivajo na tehnologijo dostave zdravil in genov s pomočjo ultrazvoka. Specifične interakcije plinskih veziklov z ultrazvokom na podmikronski stopnji bodo vključene z uporabo in razvojem novih večskalnih metod, ki bodo dovoljevale natančno simulacijo propagacije ultrazvoka, od makro do mikroskopske krajevne skale. Novi modeli in metode, podkrepjeni z eksperimentalnimi študijami, bodo omogočili računske študije, ki bodo zagotovile racionalno optimizacijo eksperimentalnih ultrazvočnih parametrov (intenziteta, frekvenca in dolžina obsevanja z ultrazvokom) za pomoč in napredek pri razvoju biomedicinskih ultrazvočnih aplikacij pri zdravljenju raka, vnetij, bolezni srca in ožilja ter drugih.

Kateri partnerji sodelujejo pri projektu?

ERC je projekt, ki je dodeljen posameznemu raziskovalcu, ki si lahko sam sestavi raziskovalno skupino. Vodja projekta lahko po želji sodeluje z drugimi raziskovalci. Prof. dr. Matej Praprotnik bo tako v letošnjem oz. prihodnjem letu na Kemijskem inštitutu, ki bo ustanova gostiteljica projekta, vzpostavil novo raziskovalno skupino na podlagi podpore iz Evropskega raziskovalnega sklada ERC. Pri tem bo sodeloval tako z eksperimentalno skupino prof. dr. Romana Jerale in nekaj drugimi raziskovalci s Kemijskega inštituta, kot tudi z zunanjimi sodelavci z ETH Zurich, Švica in University of Chinese Academy of Sciences, Peking, Kitajska ter Videlectures.net z IJS pri diseminaciji.

Koliko časa bo trajal projekt?

Projekt bo trajal 5 let.

Zakaj je projekt pomemben za Kemijski inštitut ter za celoten slovenski znanstveni prostor? In zakaj je pomemben v evropskem oz. širšem merilu?

ERC projekti sodijo med najbolj zaželene raziskovalne projekte na svetu, ker omogočajo raziskovalno svobodo raziskovalcev in zagotavljajo dovolj sredstev in časa za razvoj ambicioznih konceptov, zato se z ERC projekti rade pohvalijo tudi najbolj ugledne raziskovalne institucije na svetu. Gre za izjemno kompetitiven razpis, še posebej za vodilne raziskovalce, kjer je poudarek na prebojnosti idej in odličnosti prijaviteljev z vrhunskimi



znanstvenimi objavami. Na razpise za ERC projekte se prijavljajo najuglednejši raziskovalci iz Evrope pa tudi iz sveta. Še posebej pomembno je, da je 'MULTraSonicA' že **peti slovenski raziskovalni ERC projekt na Kemijskem inštitutu**.

Doslej smo tako pridobili že naslednje projekte:

1. ERC Advanced Grant projekt z naslovom 'MaCChines', ki ga vodi prof. dr. Roman Jerala;
2. ERC Advanced Grant z naslovom 'RNP Dynamics', ki ga vodi prof. dr. Jernej Ule;
3. ERC Starting Grant z naslovom '123STABLE', ki ga vodi iz. prof. dr. Nejc Hodnik;
4. ERC Proof of Concept Grant z naslovom 'CCEdit', ki ga vodi prof. dr. Roman Jerala;
5. ERC Advanced Grant projekt 'MULTraSonicA', ki ga vodi prof. dr. Matej Praprotnik.

S tokratnim na novo pridobljenim ERC Advanced Grant projektom 'MULTraSonicA', ki je za Kemijski inštitut že peti zaporedni ERC projekt, se naša raziskovalna ustanova utrjuje tudi v svetu, in ne le v Sloveniji, kot vodilna inštitucija na področju raziskav ved o življenju in kemije. Od skupno petih ERC projektov imamo tako na Kemijskem inštitutu zdaj tri ERC Advanced Grant projekte, en ERC Starting Grant projekt in en ERC Proof of Concept projekt.

Katera vrhunska raziskovalna oprema bo uporabljena tekom projekta?

V raziskavah, ki bodo izjemno računsko zahtevne, bomo uporabljali predvsem visokozmogljive računalniške gruče, tako tiste, s katerimi razpolagamo na Kemijskem inštitutu (VRANA in Ažmanov računski center), kot tudi slovenski nacionalni superračunalnik HPC RIVR oz. VEGA v Mariboru. Slednji se uvršča med najzmogljivejše superračunalnike v Evropi z močjo 10 petaflopsov (10 milijonov milijard računskih operacij na sekundo), obratovati bo začel predvidoma konec tega leta. V eksperimentalnem delu projekta pa bomo uporabljali napravo za generiranje ultrazvoka in po potrebi ostalo naj sodobnejšo raziskovalno opremo Kemijskega inštituta kot je novi krio-elektronski mikroskop, s katerim določamo strukturo proteinskih plinskih veziklov.

Kdo je nosilec projekta?

Nosilec projekta je prof. dr. Matej Praprotnik. Prof. Praprotnik je vodja Teoretičnega odseka na Kemijskem inštitutu in redni profesor fizike na Fakulteti za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani, kjer predava predmet 'Molekularna biofizika'. Tam je leta 2003 tudi doktoriral. Podoktorsko izpopolnjevanje je opravil na Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Nemčija. Bil je gostujoči raziskovalec na ETH Zurich, Univerzi v Minnesoti, Univerzi v Kaliforniji, Santa Barbara in na Kavli Institute for Theoretical Physics China, Peking. Njegovo raziskovalno delo je osredotočeno na računalniško simulacijo mehke in biološke snovi. Poudarek je na razvoju novih računskih pristopov in njihovi uporabi v simulacijah kompleksnih molekularnih sistemov. Med letoma 2015 in 2019 je bil predsednik Društva biofizikov Slovenije. Prav tako je predsednik znanstvenega sveta PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), predstavnik Slovenije v svetu CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire), član znanstvenega sveta Kemijskega inštituta in član uredniških odborov revij Scientific Reports (Nature Research) in Polymers (MDPI).

Kakšna je finančna struktura projekta?

Vrednost projekta je 2,5 milijona evrov v petih letih.



KEMIJSKI INŠTITUT

SI-1001 Ljubljana
Hajdrihova 19, p.p. 660
Tel.: 01/476 02 00
Faks: 01/476 03 00
<http://www.ki.si>

Kratek opis v angleščini:

The project aims to design a virtual research environment to assist medical applications of *ultrasound-guided drug and gene delivery* and imaging. The proposal focus are the encapsulated microbubbles and gas vesicles with submicron size that are used as ultrasound contrast agents and can also act as drug carriers. Detailed knowledge of their physical properties is essential in ultrasound-mediated therapeutic applications, which are driven by combined effects of ultrasound and contrast agents in cavitation and sonoporation. Today, our understanding and quantification of these processes is limited. State-of-the-art continuum models of the contrast agents cannot incorporate the critical details such as varying thickness of the encapsulating shell. Furthermore, they do not allow for simulations of several contrast agents that interact at a submicron/mesoscopic level. This represents a severe limitation since the contrast agents' dynamic interaction with the direct environment substantially modifies their cavitation behavior and in turn the outcome of drug delivery. The goal of this research project is to develop new, data-informed mesoscopic models of ultrasound contrast agents to accurately model their rheological and acoustic behavior that critically affects the technology of ultrasound-guided drug and gene delivery. The proposed models of contrast agents, together with the proposed multiscale methods, will result in a flexible virtual research environment allowing for computational studies that will provide the optimal experimental range of ultrasound parameters such as intensities, frequencies, beam collimation, and duration of ultrasound exposure for biomedical applications. The potential applications of the proposed virtual research environment are in assisting and advancing therapeutic applications of ultrasound-guided drug and gene delivery and imaging in the treatment of various diseases, e.g., cancers, inflammatory diseases, cardiovascular diseases such as thrombosis, stroke and myocardial infarction.

Project: Multiscale modeling and simulation approaches for biomedical ultrasonic applications

Researcher: Matej Praprotnik

Host Institution: National Institute of Chemistry, Slovenia

ERC Funding: € 2,5 million for five years

Kontakt za medije:

Nataša Jager Radin, natasa.jager.radin@ki.si, 031 336 838 ali 01 476 04 78

Brigita Pirc, brigita.pirc@ki.si, 041 960 396 ali 01 476 02 25