



SVENSKT NMR-CENTRUM VID GÖTEBORGS UNIVERSITET

Verksamhetsrapport 2016

DATUM:
2017-02-28

Göran Karlsson
Föreståndare

Sammanfattning

Under 2016 har Svenskt NMR-centrum gett stöd till drygt 110 projekt. Projekten fördelas på ett 70-tal forskare (PIs) från Göteborgs universitet samt andra nationella och internationella universitet. Ett tiotal användare från industri eller annan icke-akademisk organisation har utnyttjat forskningsinfrastrukturen. Användare har fått stöd efter behov, och inom de applikationsområden som forskningsinfrastrukturen erbjuder. NMR-utrustningen har använts under 1070 dygn och den effektiva användningen har minskat marginellt jämfört med föregående år.

Svenskt NMR-centrum har organiserat diskussionsmöten, ett flertal nationella och internationella workshops samt firat 25-årsjubileum. Verksamheten vid forskningsinfrastrukturen har presenterats vid ett flertal inbjudna seminarier, både nationellt och internationellt.

De vetenskapliga resultaten presenteras i 35 granskade artiklar i internationella tidskrifter. Omsättningen har varit 15 MKr och gav ett resultat på 288 kkr.

Summary

In 2016, the Swedish NMR Centre provided support for more than 100 projects. The projects were requested by ca 70 researchers (PIs) from University of Gothenburg and other national and international universities. A dozen users from industry or other non-academic organization has used the research infrastructure. Support has been provided according to the need of the user, and within the areas of application supported by the research infrastructure. The NMR equipment has been used for 1070 days and the effective use is slightly lower compared to the previous year.

The Swedish NMR Centre has organized discussion meetings and several national and international workshops and celebrated its 25 year anniversary. The activity at the research infrastructure has been presented at invited national and international seminars.

The scientific results were published in 35 peer-reviewed articles in international journals. The turnover was 15 MSEK and the result was 288 kSEK.

Innehållsförteckning:

Sammanfattning	3
Summary	3
Innehållsförteckning	4
Instrumentanvändning	5
Applikationsområden	7
Publikationer	9
Outreach och övriga aktiviteter	9
Förändring i infrastruktur	10
Utvärdering, ansökningar och ekonomi	10
Bilagor	
1. Publikationslista för 2016	11

Instrumentanvändning:

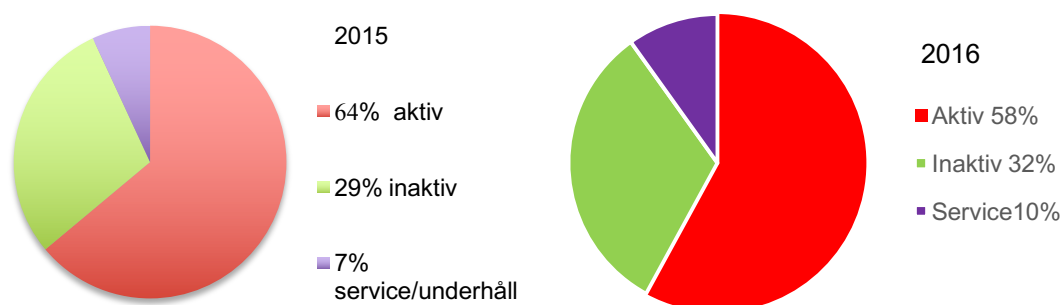
Den totala, bokade användningen av *alla* NMR-spektrometrar under 2016 (2015) är 1070 (1120) dygn eller 42% (44%) av hela året. Det är i paritet med den bokade användningen 2015. Alla instrument används dock inte i samma omfattning och därför görs nedan en mer specifik analys av de olika NMR-spektrometrarna.

För vissa instrument avviker även bokad tid från aktivt använd tid, och därför redovisas även den aktivt använda tiden när det är relevant. Så visar t ex den *aktivt* använda tiden på högfältsinstrumenten en något minskad användning, från 700 dygn 2015 till 632 dygn 2016.

Under 2016 har 900 MHz-magneten inte kunnat användas till sin fulla potential p g a reparation av detektorn i perioden juli-september (74 dagar), och ej heller tre dagar i oktober när även denna magnet utrustades med provväxlare. Den effektivt använda tiden är 55% (65%) under året.

Den effektiva användningen av de två 800 MHz-instrumenten, båda med provväxlare, har varit 59% (62%) respektive 60% (64%). Användningen av de båda 800 MHz-instrumenten är marginellt lägre än föregående år.

Den något lägre användningen är delvis en effekt av att vissa användare i ökad omfattning själva kör instrumentet. Den totala användningen av samtliga dessa tre instrument får anses ligga på en hög och jämn nivå.



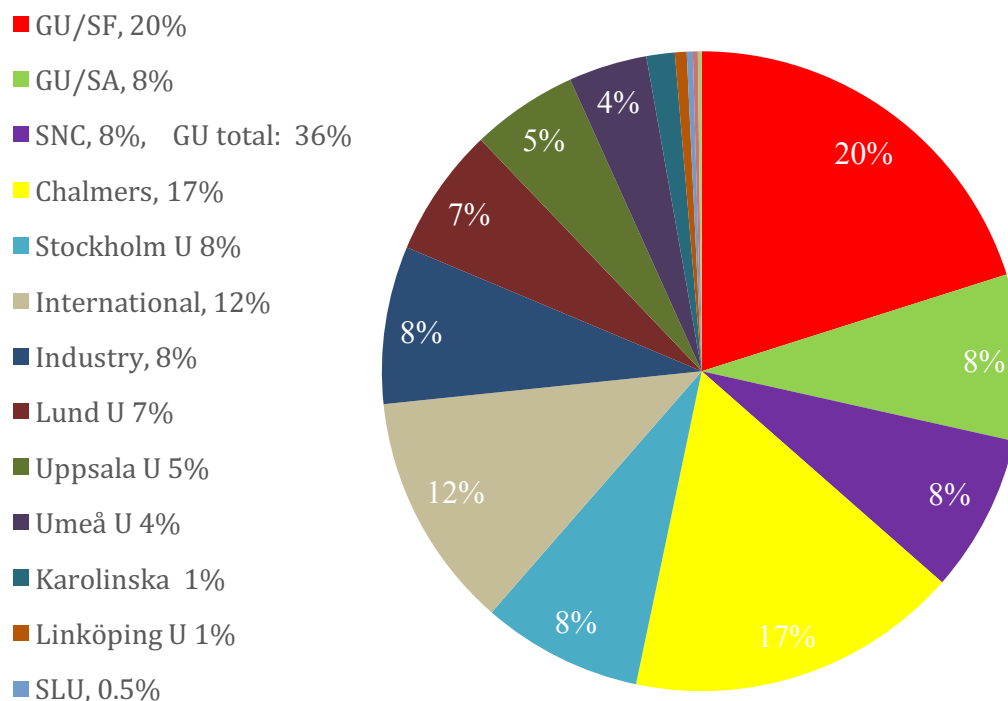
Figur 1. Aktiv användning av högfältsinstrumenten 2015 och 2016. Skillnaderna är små mellan 2016 och 2015.

Lågfältsinstrument med specifika tillämpningar, dvs 600#1, för fastfastillämpningar, och 600#3, för diffusion och imaging, har använts i god omfattning. 600#1 har varit bokad 137 (229) dagar, vilket är en avsevärd minskning mot föregående år. 600#3 har varit bokad 128 (135) dagar för diffusions- och imagingexperiment. Då bör dessutom hänsyn tas till det faktum att detta instrument inte kunnat användas under 105 dagar p g a service. Användning av 600#2 och 500 MHz-magneten har varit låg och uppgår till 12 (17) resp 13 (14) dagar.

Av den totala användningen är drygt 50% användning i Göteborg (GU eller Chalmers). Därefter kommer internationella användare (12%), samt Stockholms Universitet, Lunds Universitet och industri som är jämnstora med ca 8% vardera. Totalt har ett knappt 70-tal enskilda forskargrupper utnyttjat Svenskt NMR-centrum under 2016. Bland industri och forskningsinstitut som använt Svenskt

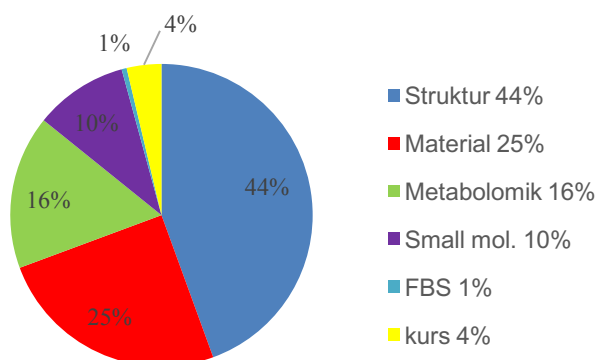
NMR-centrum hör bl a Zoobio, Redglead, IRL AB, SARomics Biostructures AB, Medivir , Christiansen AB, RISE och Swerea IVF.

Fördelningen visar små förändringar i förhållande till 2015, med variationer för enskilda nationella användare.



Figur 2. Total användning av instrumenttid (%) per universitet

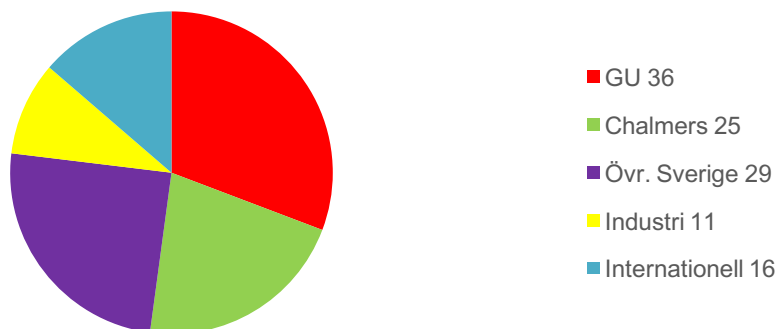
Sett till användningstidens fördelning per applikationsområde så dominerar strukturbiologi stort (44%) följt av materialvetenskap (25%), metabolomik (16%) och små molekyler (10%). Metabolomik har under 2016 ökat i omfattningen samtidigt som små molekyler har minskat, i övrigt är förändringarna marginella. För 2016 redovisas "kurser" som ett eget område. Liksom 2015 har fragmentbaserad screen efterfrågats i liten omfattning, men då särskilt av industriella aktörer.



Figur 3. Fördelning av spektrometertid per applikationsområde.

Applikationsområden

Under 2016 har knappt 120 projekt har fått tillgång till forskningsinfrastrukturen. Det är en ökning med ca 10% från 2015. Som vanligt varierar omfattningen av stöd mellan olika projekt. Antalet projekt är relativt jämnt fördelat mellan lokal, nationell och internationell akademisk användning samt icke-akademiska användare (Figur 4).



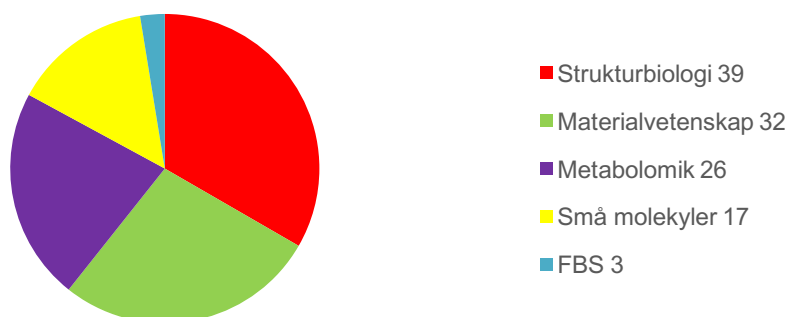
Figur 4. Antal projekt lokalt, nationellt, internationellt och industri.

Under året har motsvarande 4.9 heltidsekvivalenter 1:e forskningsingenjörer varit aktiva. Skillnad i förhållande till antal anställda (6.0 heltidsekvivalenter) beror främst på föräldraledighet och tjänstledighet. Aktivitet inom resp applikationsområde har fördelats enligt tabell 1.

Tabell 1. Stöd per applikationsområde

Strukturbiologi	1.6
Metabolomik	1.4
Små Molekyler	0.7
Materialvetenskap	0.4
Kemisk biologi	0.01
Administration	0.4
<u>Metod & kompetensutveckling</u>	<u>0.39</u>
Totalt	4.9

Antalet projekt som har fått stöd under 2016 har ökat inom samtliga applikationsområden jämfört med 2015. Fördelning av projekt per applikationsområde (Figur 5) avspeglar i någon mån fördelningen i tid per applikationsområde (Figur 3).



Figur 5. Fördelning av antal projekt per applikationsområde.

Strukturbiologi

Inom applikationsområdet strukturbiologi finns aktivitet inom 39 projekt. Omfattningen varierar från tillgång till experimenttid till analys av NMR-spektra och strukturbestämning. Under året har 19 projekt avslutats. Tolv sekventiella tillordningar har genomförts och 2 strukturer har deponerats i pdb-databasen (5DKA resp 5LFI). Ytterligare två strukturer har färdigställts och avvaktar deponering. Användare återfinns vid universiteten i Umeå, KI, KTH, SU, LiU, Lund, GU samt Barcelona, Leeds och industri (Medivir, Saromics, AstraZeneca, Zoobio). Under 2016 har 15 artiklar publicerats inom strukturbiologi där Svenskt NMR-centrum får erkännande eller personal är medförfattare.

Metabolomik

Inom området metabolomik finns under 2016 aktivitet inom 26 projekt, varav 16 har avslutats under året. Samtliga projekt omfattar datainsamling, men experimentell design, provberedning och analys har också genomförts i de flesta projekt. Totalt har datainsamling från knappt 5000 prover genomförts för användare från KI, SLU, LU, Chalmers och GU, samt från Köpenhamn, Aarhus, Barcelona och Warszawa. Fem artiklar har publicerats under året.

Små molekyler

Inom applikationsområdet Små Molekyler har särskild omsorg lagts vid att tillgängliggöra instrumentering för nya användare från Chalmersområdet. En avancerad NMR kurs har genomförts och data från drygt 550 prov har samlats in. Totalt finns aktivitet inom 17 projekt under perioden, och av dessa har 15 avslutats under året. Användare kommer från GU, Chalmers, SU, KTH och Uppsala, samt IRL, RISE, Swerea och RedGlead. Under 2016 har 7 artiklar publicerats.

Materialvetenskap

Inom området materialvetenskap finns aktivitet inom 32 projekt att redovisa, huvudsakligen med användare från Chalmers eller industri, men även KTH, LuTH, Uppsala, Lund och Sahlgrenska Akademien. Av projekten har nio avslutats under året. Totalt åtta artiklar har publicerats under 2016.

Kemisk biologi – fragmentbaserad screen

De 3 projekt inom fragmentbaserad eller ligand-screen som finns att redovisa under 2016 har efterfrågats av företag eller av forskare verksamma vid Göteborgs universitet.

Metod- och kompetensutveckling

Här kan bl a redovisas

- implementering av optimerade pulssekvenser för makromolekyler
- fortsatt utveckling av standardiserade operativa procedurer (SOP) för metabolomik-prover, särskilt serum och plasmaprover
- ny princip för att förbättra metabolitidentifikation i komplexa prover
- statistisk sampling av NOEer vid strukturberäkningar
- implementering av pulssekvenser för imaging och diffusions-NMR samt T₂-mätning i heterogena material.
- systematisk undersökning av spårvägens effekter och minimering av dess inflytande på NMR-experimenten; särskilt

- ny samplings- och processningsmetodik för 1D-data, särskilt metabolomik
- ytterligare förbättrad hantering av digitalt lås för 2D, 3D och 4D-sekvenser

Publikationer

Under 2016 finns 35 publikationer (se appendix 1) som har medförfattare från NMR-centrum eller där NMR-centrum ges erkännande.

Outreach och övriga aktiviteter

Ett flertal workshops, kurser och symposier har arrangerats under perioden.

Symposium

Den 12-13 oktober firade Svenskt NMR-centrum 25-årsjubileum med ett tvådagars symposium i Wallenbergssalen. Verksamheten presenterades och ackompanjerades av en rad föreläsningar från ledande Europeiska NMR-forskare samt presentationer av representanter från nationella NMR-centra i Danmark, Finland och Norge.

Workshops

Inom ramen för Nordic NMR Network har workshops arrangerats med fokus på NMR-experiment (Göteborg, 24-25 Januari), Pulsprogram (Aarhus, 25-26 April), Paramagnetisk NMR (Aarhus, 8 juli), Metabolomik (Göteborg, 29-30 augusti), samt "Fast Methods" (Göteborg, 10-11 November).

Forskarutbildningskurs

Under hösten organiserades en avancerad internationell forskarutbildningskurs i strukturbiologi, "Dynamik hos proteiner och RNA". Kursen organiserades med stöd både från INSTRUCT och Nordic NMR Network och attraherade ett 20-tal deltagare från hela Europa.

En avancerad NMR-kurs för doktorander och post-docs har genomförts tillsammans med lärare från institutionen för kemi- och molekylär biologi. Totalt 15 studenter deltog i kursen. Godkänd kurs ger "körkort" för utrustningen på NMR-centrum.

Nationella möten

Tillsammans med andra strukturbiologer i Göteborg ordnades det nationella strukturbiologimötet i Tällberg för 20:e gången. I samband med detta gavs en muntlig presentation av verksamheten vid NMR-centrum.

Presentationer vid universitet

Verksamheten inom SciLifeLab presenterade i samband med Outreach-dagar,

- Göteborg (17 mars)

- Umeå (6 april)

samt för DDD-plattformen vid Uppsala Universitet

- Uppsala (29 september)

Cell-fri expression för NMR-spektroskopi presenterades i en workshop i Köpenhamn

- Köpenhamns Universitet (10 maj)

Verksamheten i stort, och särskilt materialvetenskap, presenterades för Chalmers Styrkeområde Materialvetenskap

-Göteborg (13 december)

Metabolomikverksamheten presenterades på det 16e CeMEB-mötet

-Tjärnö (13 oktober)

Presentationer vid konferenser etc

Verksamheten har presenterats muntligt vid ICMRBS, Kyoto 2016 (Orekhov), ENC 2016, Pittsburg (Bernin), EUROMAR 2016, Aarhus (Bernin), Bruker 40th User Meeting, Karlsruhe (Karlsson), samt med posters vid Metabolomics Society Conference, Dublin (Pedersen), EUROMAR 2016 (Mayzel) och ICMRBS (Mayzel).

Gymnasieskolor

Ett flertal gymnasieskolor har besökt svenskt NMR-centrum under året, bla Kattegattgymnasiet från Halmstad och Mikael Elias gymnasium från Göteborg.

Förändring av infrastrukturen

En automatisk provväxlare installerades på 900 MHz-magneten.

Ett avtal mellan Medivir AB och Svenskt NMR-centrum avseende donation av utrustning och användning av resurser tecknades (dnr E 2016/862).

Den ökade omfattningen av verksamheten har lett till större lokalbehov. Ett personalrum byggdes om till arbetsrum med 6 skrivplatser och funktionen för personalrum integrerades med det tidigare biblioteket.

Anläggning för uppsamling av heliumgas har färdigställts. Under perioden gjordes en smärre modifiering av ballongens utformning och flera tester genomfördes.

Uppsamling av heliumgas sker effektivt (>95%) och förenklar dessutom hanteringen vid påfyllning av helium.

Utvärderingar, ansökningar och ekonomi

Under 2016 har Svenskt NMR-centrum varit en facilitet inom SciLifeLab. Verksamheten, där Svenskt NMR-centrum vid Göteborgs Universitet är huvudman, har utförts tillsammans med Umeå-noden och regleras i ett konsortialavtal mellan Göteborgs Universitet och Umeå Universitet (dnr V2016/1037).

Verksamheten inom SciLifeLab har genomgått internationell utvärdering under 2016. Rapporten (dnr V2016/1037) var positiv för Svenskt NMR-centrum. Under hösten beslöt styrelsen för SciLifeLab att Svenskt NMR-centrum får fortsätta som facilitet under perioden 2017-2020.

Svenskt NMR-centrum var medsökande till VR/RFI om fortsatt stöd för bioinformatik (NBIS) vilket bifölls för perioden 2016-2017. Ett konsortialavtal mellan Göteborgs Universitet och Uppsala Universitet undertecknades i oktober.

Svenskt NMR-centrum var medsökande till VR/RFI om fortsatt stöd för SWEDSTRUCT (bifölls ej), och BBMRI (bordlagd).

Resultaträkning för verksamhetsåret redovisas i tabell 2. Utfallet är 282 kkr, vilket är mycket nära det budgeterade 250 kkr. Utfallet följer också budget relativt väl, med smärre avvikelser. Årets utfall följer en 5-årsplan som ska ge ett ackumulerat resultat i nivå med rektors rekommendationer (5-8% av omsättningen).

Tabell 2.

Resultaträkning	Budget	Utfall	%	Anslag	Bidrag	Int
Bidrag	5 099	5 099	100%	5 099		
Försäljning	450	529	4%	449	80	
Interna bidrag	1 500	2 051	91%	1 500	551	
Bidrag	6 270	11 137	94%		11 137	
Finansiella intäkter	180	62	26%		62	
Periodisering påg proj	-2 123	-5 820	103%		-5 820	
Täckn. avs BF anlägg.	3 605	4 254	77%		4 254	
Avsättn BF anlägg		-1 754			-1 754	
Intäkter	14 981	15 558	67%	7 049	8 509	
Lönekostnader	6 132	5 279	57%	2 353	2 319	608
Förändr. semesterskuld	20	-10	235%	-15	6	-1
Övr personalkost	120	288	100%	166	122	1
Övrig Drift	3 054	2 900	56%	2 138	667	96
Indir kost int bidr		551		969	285	-703
Lokalkostnader	1 710	1 751	68%	895	857	
Finanisella kostnader		5		5		
Avskrivningar	3 695	4 513	80%	258	4 254	
Kostnader	14 731	15 277	67%	6 767	8 509	
Totalt	250	282		282		

SNC staff

- Andersson Hall, U., Edin, F., **Pedersen, A.**, & Madsen, K. (2016). Whole-body fat oxidation increases more by prior exercise than overnight fasting in elite endurance athletes. *Applied Physiology, Nutrition, and Metabolism*, 1–8. <http://doi.org/10.1139/apnm-2015-0452>
- Bialik, E, Stenqvist, B, Fang, Y, Östlund, Å, Furó, I, Lindman, B, Lund, M and **Bernin, D.** (2016), Ionization of Cellobiose in Aqueous Alkali and the Mechanism of Cellulose Dissolution *J. Phys. Chem. Lett.*, 7, 5044–5048. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.6b02346
- Bijlmakers M-J, Teixeira JMC, Boer R, **Mayzel, M.** Puig-Sàrries, P, **Karlsson, G.**, Coll, M, Pons, M and Crosas B. (2016) A C2HC zinc finger is essential for the RING-E2 interaction of the ubiquitin ligase RNF125. *Scientific Reports*. 6:29232. DOI:10.1038/srep29232.
- Karamanos, TK. Pashley, CL. Kalverda, AP. Thompson, GS. **Mayzel, M.** **Orekhov, V.** and Radford, SE. (2016). A Population Shift between Sparsely Populated Folding Intermediates Determines Amyloidogenicity. *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138 (19), pp 6271– 6280, DOI: 10.1021/jacs.6b02464
- **Karlsson, BG.** Persson, C, Mayzel, M, Hedenström, M. and Backman L. (2016). Solution structure of the calmodulin-like C-terminal domain of *Entamoeba*-actinin2. *Proteins* 84:461–466. DOI: 10.1002/prot.24992
- Kristiansen, PE, **Persson, C.** Fuochi, V, **Pedersen, A.** **Karlsson, BG.** Nissen-Meyer, J, and Opegård, C, 2016. Nuclear Magnetic Resonance Structure and Mutational Analysis of the Lactococcin A Immunity Protein, *Biochemistry*, , 55 (45), pp 6250–6257.
- Lendel, C, Sparrman, T, **Mayzel, M.** Andersson, CE, **Karlsson, G.** and Hård T. (2016) Combined Solution - and Magic Angle Spinning NMR Reveals Regions of Distinct Dynamics in Amyloid β Protofibrils, *ChemistrySelect*, 1, 5850–5853. DOI: 10.1002/slct.201601468
- Marimon, O., Teixeira, J.M.C., Cordeiro, T.N., Soo, V.W.C., Wood, T.L., **Mayzel, M.** Amata, I., García, J., Morera, A., Gay, M., Vilaseca, M., **Orekhov, V.Y.**, Wood, T.K., and Pons, M. (2016) An oxygen-sensitive toxin–antitoxin system. *Nat Commun*, 7: 1-10, DOI: 10.1038/ncomms13634
- Peuker; S, Andersson, H, Gustavsson, E.K. Maiti, S. Kania, R. Karim, A. Niebling, S. **Anders Pedersen, A.**, Erdelyi, M. and Westenhoff, S. (2016). Efficient Isotope Editing of Proteins for Site-Directed Vibrational Spectroscopy. *J. Am. Chem. Soc.*, 138 (7), pp 2312–2318 . DOI: 10.1021/jacs.5b12680
- Rohlin, A., Eiengerd, F., Lundstam, U., Zagoras, T., Nilsson, S., Edsjö, A., Pedersen, J., Svensson, J., Skullman, S., **Karlsson, B. G.**, Björk, J. and Nordling, M. (2016), GREM1 and POLE variants in hereditary colorectal cancer syndromes. *Genes Chromosomes Cancer*, 55: 95–106. doi: 10.1002/gcc.22314
- Ross, AB, Svelander, C, **Karlsson, G.** and Savolainen, OI. (2017) Identification and quantification of even and odd chained 5-n alkylresorcinols, branched chain-alkylresorcinols and methylalkylresorcinols in Quinoa (*Chenopodium quinoa*). *Food Chemistry* 220, 344–351, <http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.10.020>
- Schou, MF, Nygaard Kristensen, T, **Pedersen, A.** **Karlsson, BG.** Loeschcke, V, and Malmendal, A. (2016). Metabolic and functional characterization of effects of developmental temperature in *Drosophila melanogaster*, *American Journal of Physiology*, DOI: 10.1152/ajpregu.00268.2016
- Stenson, M., **Pedersen, A.**, Hasselblom S., Nilsson-Ehle; H. **Karlsson, BG.** Pinto, R. and Andersson, PO. (2016). Serum nuclear magnetic resonance-based metabolomics and outcome in diffuse large B-cell lymphoma patients - a pilot study. *Leukemia & Lymphoma*, 57: 1814-1822 . DOI: 10.3109/10428194.2016.1140164
- Urbanczyk, M. **Bernin, D.** Czuron, A. and Kazimierzuk, K. (2016). Monitoring polydispersity by NMR diffusometry with tailored norm regularisation and moving-frame processing. *Analyst*, 141, 1745-1752. DOI: 10.1039/C5AN02304A
- Unnerstale, S. Nowakowski, M. Baraznenok, V. Stenberg, G. Lindberg, J. **Mayzel, M.** **Orekhov, V.** and Agback, T. (2016). Backbone Assignment of the MALT1 Paracaspase by Solution NMR. *PLoS ONE* 11(1): e0146496. doi: 10.1371/journal.pone.0146496

SNC acknowledged 2016

- Abdissa, N., Pan, F., Gruhonjic, A., Gräfenstein, J., Fitzpatrick, P. A., Landberg, G., Rissanen, K., Yenesew, A., and Erdélyi, M. (2016). Naphthalene Derivatives from the Roots of *Pentas parvifolia* and *Pentas bussei*. *Journal of Natural Products*, 79(9), 2181–2187. <http://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.6b00178>
- Aronsson, P., Munissi, J., Gruhonjic, A., & Fitzpatrick, P. A. (2016). Phytoconstituents with Radical Scavenging and Cytotoxic Activities from *Diospyros shimbaensis*. *Diseases*. doi:10.3390/diseases4010003
- Bergonzini, G., Cassani, C., Lorimer Olsson, H., Hürberg, J., & Wallentin, C. J. (2016). Visible-Light-Mediated Photocatalytic Difunctionalization of Olefins by Radical Acylarylation and Tandem Acylation/Semipinacol Rearrangement. *Chemistry - a European Journal*, 22(10), 3292–3295. <http://doi.org/10.1002/chem.201504985>
- Bugge, K., Papaleo, E., Haxholm, G. W., Hopper, J. T. S., Robinson, C. V., Olsen, J. G., et al. (2016). A combined computational and structural model of the full-length human prolactin receptor. *Nature Communications*, 7, 11578. <http://doi.org/10.1038/ncomms11578>
- Danelius, E., Pettersson, M., Bred, M., Min, J., Waddell, M. B., Guy, R. K., et al. (2016). Flexibility is Important for Inhibition of the MDM2/ p53 Protein-Protein Interaction by Cyclic β -Hairpins. *Organic & Biomolecular Chemistry*. <http://doi.org/10.1039/C6OB01510G>
- Carlsson, A.-C. C., Mehmeti, K., Uhrbom, M., Karim, A., Bedin, M., Puttreddy, R., Roland Kleinmaier[†], Neverov AA, Nekoueishahraki, B., Gräfenstein, J., Rissanen, K. and Erdélyi, M. (2016). Substituent Effects on the [N–I–N]⁺ Halogen Bond. *Journal of the American Chemical Society*, 138(31), 9853–9863.
- Diehl, C., Akke, M., Bekker-Jensen, S., Mailand, N., Streicher, W., & Wikström, M. (2016a). Structural Analysis of a Complex between Small Ubiquitin-like Modifier 1 (SUMO1) and the ZZ Domain of CREB-binding Protein (CBP/p300) Reveals a New Interaction Surface on SUMO. *The Journal of Biological Chemistry*, 291(24), 12658–12672. <http://doi.org/10.1074/jbc.M115.711325>
- Diehl, C., Wisniewska, M., Frick, I.-M., Streicher, W., Björck, L., Malmström, J., & Wikström, M. (2016b). Structure and Interactions of a Dimeric Variant of sHIP, a Novel Virulence Determinant of *Streptococcus pyogenes*. *Frontiers in Microbiology*, 7, 95. <http://doi.org/10.3389/fmicb.2016.00095>
- Fontana, C., Conde-Elvarez, R., Stehle, J., Holst, O., Iriarte, M., Zhao, Y., et al. (2016). Structural Studies of Lipopolysaccharide-defective Mutants from *Brucella melitensis* Identify a Core Oligosaccharide Critical in Virulence. *The Journal of Biological Chemistry*, 291(14), 7727–7741. <http://doi.org/10.1074/jbc.M115.701540>
- Fridén-Saxin, M., Seifert, T., Malo, M., da Silva Andersson, K., Pemberton, N., Dyrager, C., et al. (2016). Chroman-4-one and chromone based somatostatin β -turn mimetics. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 114, 59–64. <http://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.02.046>
- Garaga, M. N., Persson, M., Yaghini, N., & Martinelli, A. (2016). Local coordination and dynamics of a protic ammonium based ionic liquid immobilized in nano-porous silica micro-particles probed by Raman and NMR spectroscopy. *Soft Matter*, 12(9), 2583–2592. <http://doi.org/10.1039/c5sm02736e>
- Idström, A., Schantz, S., Sundberg, J., Chmelka, B. F., Gatenholm, P., & Nordstierna, L. (2016). (13)C NMR assignments of regenerated cellulose from solid-state 2D NMR spectroscopy. *Carbohydrate Polymers*, 151, 480–487. <http://doi.org/10.1016/j.carbpol.2016.05.107>
- Lyckeskog, HN., Mattsson, C., Olausson, L., Andersson, S-I., Vamling L. and Theliander, H. (2016), Thermal stability of low and high Mw fractions of bio-oil derived from lignin conversion in subcritical water, *Biomass Conv. Bioref.* (2016). DOI:10.1007/s13399-016-0228-4.
- Massad, T., Papadopolos, E., Stenmark, P., & Damberg, P. (2016). The C repressor of the P2 bacteriophage. *Journal of Biomolecular NMR*, 64(2), 175–180. <http://doi.org/10.1007/s10858-015-9999-3>

- Mattsson, C., Andersson, S.-I., Belkheiri, T., Emand, L.-E., Olausson, L., Vamling, L., & Theliander, H. (2016). Using 2D NMR to characterize the structure of the low and high molecular weight fractions of bio-oil obtained from LignoBoost™ kraft lignin depolymerized in subcritical water. *Biomass and Bioenergy*. <http://doi.org/10.1016/j.biombioe.2016.09.004>
- Stephen S. Nyandoro, Joan J. E. Munissi, Amra Gruhonjic, Sandra Duffy, Fangfang Pan, Rakesh Puttreddy, John P. Holleran, Paul A. Fitzpatrick, Jerry Pelletier, Vicky M. Avery, Kari Rissanen, and Máté Erdélyi, (2016) Polyoxygenated Cyclohexenes and Other Constituents of *Cleistochlamys kirkii* Leaves. *J. Nat. Prod.*, DOI: 10.1021/acs.jnatprod.6b00759
- Tehrani-Bagha, A. R., Viladot, A., Holmberg, K., & Nordstierna, L. (2016). An Ouzo emulsion of toluene in water characterized by NMR diffusometry and static multiple light scattering. *Colloids and Surfaces a: Physicochemical and Engineering Aspects*, 494, 81–86. <http://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2016.01.008>
- Yaghini, N., Garaga, M. N., & Martinelli, A. (2016a). Transport Properties, Local Coordination, and Thermal Stability of the Water/ Diethylmethylammonium Methanesulfonate Binary System. *Fuel Cells*, 16(1), 46–54. <http://doi.org/10.1002/fuce.201500064>
- Yaghini, N., Gyme-González, V., Varela, L. M., & Martinelli, A. (2016b). Structural origin of proton mobility in a protic ionic liquid/imidazole mixture: insights from computational and experimental results. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(33), 23195–23206. <http://doi.org/10.1039/c6cp03058k>
- Yang, M., d'Ortoli, T. A., Сдвѣн, E., Jana, M., Widmalm, G., & MacKerell, A. D. (2016). Delineating the conformational flexibility of trisaccharides from NMR spectroscopy experiments and computer simulations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(28), 18776–18794. <http://doi.org/10.1039/C6CP02970A>