



SVENSKT NMR-CENTRUM VID GÖTEBORGS UNIVERSITET

Verksamhetsrapport 2017

DATUM:
2018-02-28

Göran Karlsson
Föreståndare

Sammanfattning

Under 2017 har Svenskt NMR-centrum gett stöd till drygt 140 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 ca 26 000 timmar (ca 1080 dygn, motsvarande ca 3 års kontinuerlig användning)

Svenskt NMR-centrum har organiserat diskussionsmöten, nationella och internationella workshops samt varit medarrangör av den svenska metabolomik-konferensen 2017. Verksamheten vid forskningsinfrastrukturen har presenterats vid ett flertal tillfällen, både nationellt och internationellt.

Under hösten genomgick Svenskt NMR-centrum en internationell utvärdering i enlighet med Göteborgs universitets policy för forskningsinfrastrukturer och erhöll goda vitsord.

De vetenskapliga resultaten presenteras i 38 granskade artiklar i internationella tidskrifter. Omsättningen har varit 15 MKr och gav ett resultat på 421 kkr.

Summary

In 2017, the Swedish NMR Centre provided support to more than 140 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 was used for 26 000 hrs (corresponding to ca 1080 or 3 years of continuous use).

The Swedish NMR Centre has organized discussion meetings, national and international workshops and co-organized the Swedish Metabolomics Meeting 2017. The activity at the research infrastructure has been presented on several occasions, both nationally and internationally.

During the autumn, the Swedish NMR center was subject to an international evaluation, in accordance with University of Gothenburg policy for research infrastructures, and with good recommendations.

The scientific results were published in 38 peer-reviewed articles in international journals. The turnover was 15 MSEK and the result was 421 kSEK.

Innehållsförteckning:

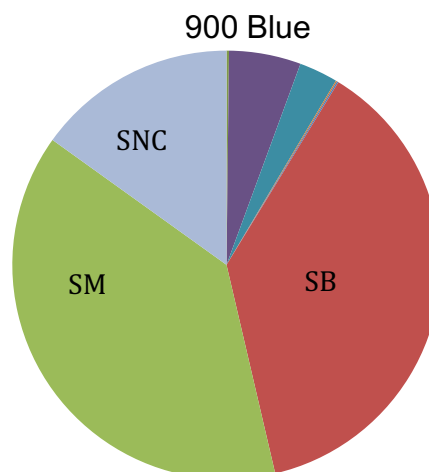
Sammanfattning	3
Summary	3
Innehållsförteckning	4
Instrumentanvändning	5
Applikationsområden	7
Publikationer	9
Outreach och övriga aktiviteter	9
Förändring i infrastruktur	10
Utvärdering, ansökningar och ekonomi	10
Bilagor	
1. Publikationslista för 2017	11
2. Kommentarer till publikationslista	16

Instrumentanvändning:

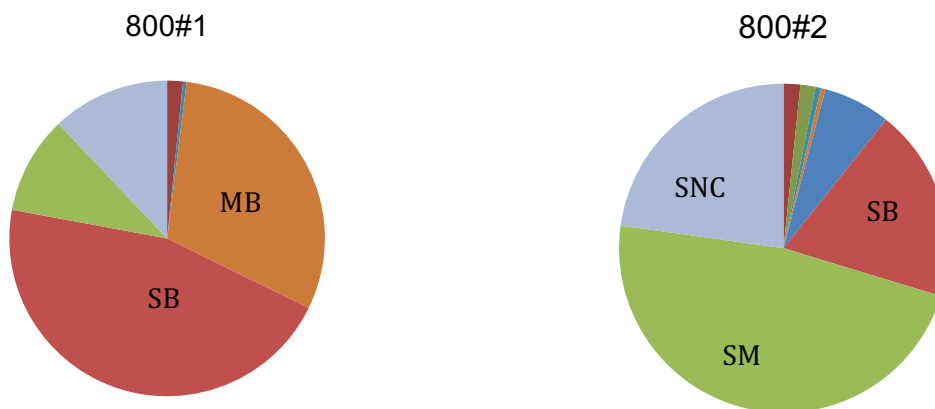
Den totala, bokade användningen av *alla* NMR-spektrometrar under 2017 (2016) är 1078 (1070) dygn eller 44% (44%) av hela året. Det är i paritet med den bokade användningen 2016. Alla instrument används dock inte i samma omfattning och därför görs nedan en mer specifik analys av de olika NMR-spektrometrarna.

Under 2017 har 900 MHz-magneten använts i stor omfattning. Magneten har under perioden varit bokad 8011 timmar (91%). Användningen avser huvudsakligen strukturbiologi och små molekyler.

De båda 800 MHz-instrumenten har använts i stor omfattning. För 800#1 är bokad tid 7447 timmar (84%) och för 800#2 är bokad tid 5779 timmar (66%).



Figur 1a. 900 MHz-magneten. Fördelning av bokad tid på applikationsområde. SM =små molekyler, SB = strukturbiologi, SNC = intern



Figur 1b. 800 MHz-magneterna. Fördelning av bokad tid på applikationsområden. SM = små molekyler, SB= strukturbiologi, MB = metabolomik. SNC = intern använding..

Den faktiska användningen är väl i nivå med användning tidigare år (2016 55% resp 59%).

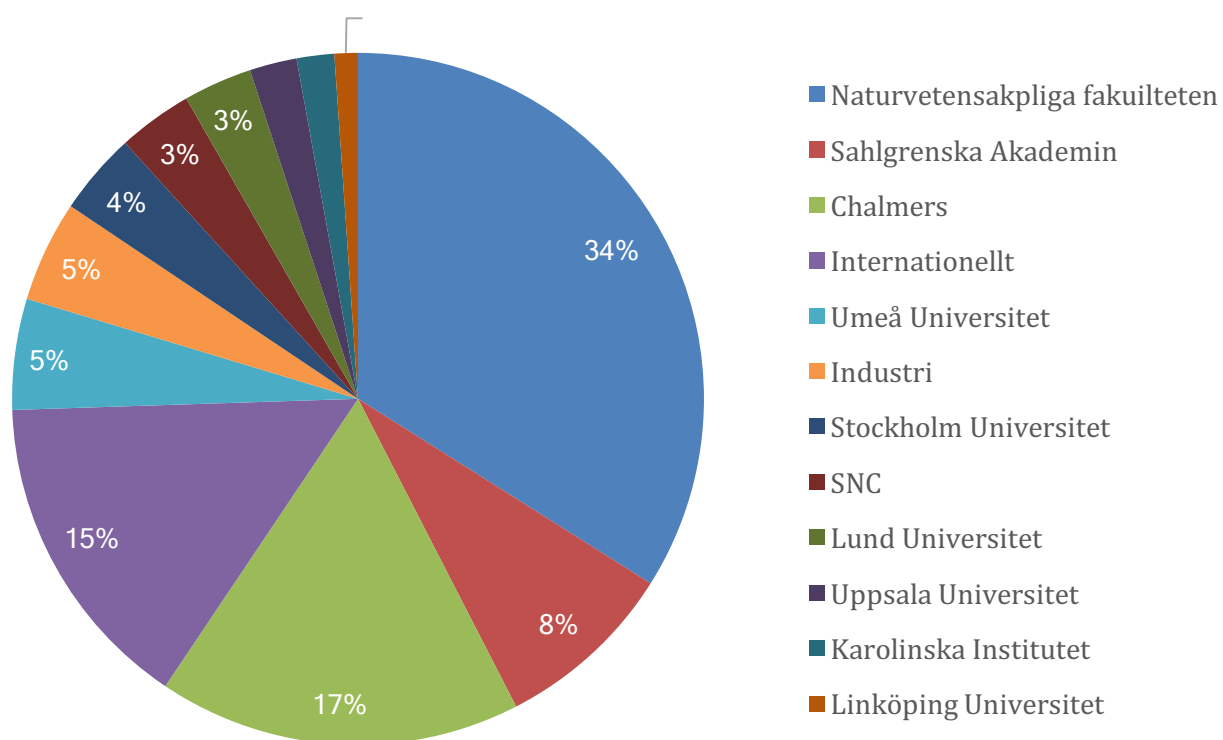
I januari installerades en 700 MHz magnet, men av tekniska skäl har instrumentet inte kommit till användning under 2017. I slutet av december, och som följd av funktionsbortfall av UPS-enhet, quenchede 900 MHz-magneten plötsligt. Det hade liten påverkan på verksamheten under 2017, men vad det innebär framgent är ännu oklart.

De två 600 MHz-instrumenten för särskilda tillämpningar har använts i god omfattning. 600 MHz-instrumentet för fast-fas (materialvetenskap) har varit bokat 2712 timmar (31%) med en jämn fördelning under året. Användningen inkluderar längre perioder av kontinuerlig användning liksom kortare mätningar som utförs enbart under dagtid.

600 MHz-instrumentet för diffusion/imaging har varit bokat 1589 timmar (22%) mellan januari och 3 november. Därefter har installation av ny BBI-probe, flytt av SampleJet och implementering av Brukers IVDr-teknik för metabolomik tagit instrumentet i anspråk.

Av den totala användningen är ca 60 % användning i Göteborg (GU eller Chalmers). Därefter kommer internationella användare (15%), industri tätt följt av Umeå universitet. Totalt har ett drygt 70-tal enskilda forskargrupper utnyttjat Svenskt NMR-centrum under 2017. Bland industri och forskningsinstitut återfinns bl a, Södra, Akzo, IRL AB, Medivir AB, Christiansen AB, RISE och Galderma.

Fördelningen uppvisar små förändringar i förhållande till 2016, med variationer för enskilda nationella användare. Med undantag för KTH och SLU har alla stora svenska universitet varit aktiva användare under 2017.



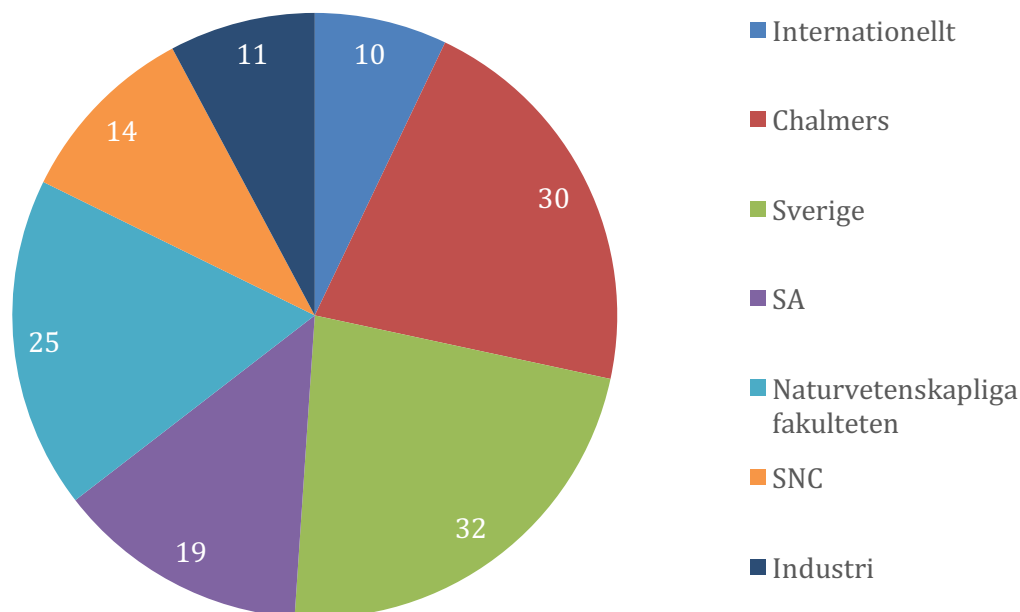
Figur 2. Total användning av instrumenttid (%) per universitet

Sett till användningstidens fördelning per applikationsområde så är strukturbiologi störst (36%) följt av småmolekyler (32%), materialvetenskap (16%), metabolomik

(11%), Övrig tid inkluderar div industriella applikationer, fragmentbaserad screen, undervisning osv.

Applikationsområden

Under 2017 har ca 140 projekt har fått tillgång till forskningsinfrastrukturen. Det är en ökning med ca 20% från 2016. 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).



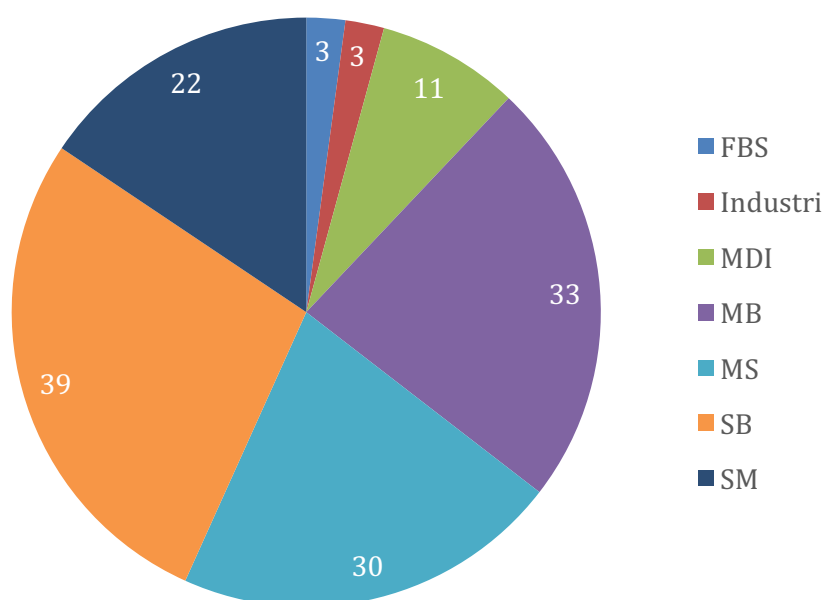
Figur 4. Antal projekt lokalt, nationellt, internationellt och industri.

Under året har motsvarande 5.7 heltidsekvivalenter 1:e forskningsingenjörer varit aktiva. Aktivitet inom resp applikationsområde har fördelats enligt tabell 1.

Fördelning av projekt per applikationsområde (Figur 5) avspeglar i någon mån fördelningen i tid per applikationsområde

Tabell 1. Stöd per applikationsområde

Strukturbiologi	1.6
Metabolomik	1.4
Små Molekyler	0.6
Materialvetenskap	0.6
Kemisk biologi	0.1
Administration	0.4
<u>Metod & kompetensutveckling</u>	<u>1.0</u>
<u>Totalt</u>	<u>5.7</u>



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, sekventiell tillordning och total strukturbestämning. Användare återfinns vid universiteten i Umeå, KI, SU, LiU, Lund, GU samt Barcelona, Zurich och industri

(Medivir). Under 2017 har elva artiklar publicerats inom strukturbologi där Svenskt NMR-centrum får erkännande eller personal är medförfattare.

Metabolomik

Inom området metabolomik finns under 2017 aktivitet inom 33 projekt, varav 12 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, LU, Chalmers och GU, samt från Köpenhamn och Aarhus. Sju artiklar har publicerats under året.

Små molekyler

Totalt finns aktivitet inom 22 projekt under perioden. Användare kommer från GU, Chalmers, SU och Uppsala, samt IRL, RISE och Akzo. Under 2017 har nio artiklar publicerats.

Materialvetenskap

Inom området materialvetenskap finns aktivitet inom 30 projekt att redovisa, huvudsakligen med användare från Chalmers eller industri, men även Stockholm, Uppsala, Lund och Sahlgrenska Akademien. Totalt elva artiklar har publicerats under 2017.

Kemisk biologi – fragmentbaserad screen

De 3 projekt inom fragmentbaserad eller ligand-screen som finns att redovisa under 2017 har efterfrågats av företag eller av forskare verksamma vid Göteborgs universitet samt Uppsala universitet.

Metod- och kompetensutveckling

Här kan särskilt redovisas

- fortsatt utveckling av standardiserade operativa procedurer (SOP) för metabolomik-prover, särskilt metanolfällning av serumprover
- metod för att karaktärisera åldring av biobankade prover
- installation av IVDr-teknik
- överföring av targeted acquisition (TA) direkt till spektrometerdatorer

Publikationer

Under 2017 finns 38 publikationer (se appendix 1) som har medförfattare från NMR-centrum eller där NMR-centrum ges erkännande. I appendix 2 ges ytterligare kommentarer till användningen.

Outreach och övriga aktiviteter

Ett flertal aktiviteter har arrangerats under 2017.

Nationell konferens

Den 23-24 augusti arrangerade Svenskt NMR-centrum, tillsammans med Chalmers, det svenska metabolomik-mötet 2018. Inbjudna föreläsare, bl a Elaine Holmes (Imperial College), Claudio Luchinat (University of Florence) och David Wishart (University of Alberta) samt en rad svenska föreläsare bidrog till att deltagarantalet

öbersteg 100. Vid mötet gavs en muntlig presentation från svenskt NMR-centrum (G. Karlsson).

Hearing

I samband med metabolomik-mötet arrangerades ett "Phenome hearing" vid Sahlgrenska akademien den 22 augusti, med presentationer av Elaine Holmes och Manfred Spraul (Bruker).

Forskarutbildningskurs

Under hösten organiserades en avancerad internationell forskarutbildningskurs i strukturbioologi, " Biomolecular NMR: modern tools for data processing and interpretation". Kursen attraherade ett 20-tal deltagare från hela Europa.

Presentationer vid universitet och konferenser

Verksamheten presenterade i samband med SciLifeLab Outreach-dagar i Stockholm (13 juni) samt vid det nationella strukturbioologimötet i Tällberg (16-19 juni)

Verksamheten har också presenterats i samband med muntliga föredrag vid ENC i Asilomar (Bernin) ACS i San Fransisco (Bernin), EUROMAR i Warszawa (Orekhov) samt med poster vid Metabolomics Society Conference i Brisbane (Pedersen) samt EUROMAR 2017 (Mayzel och Orekhov).

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 700 MHz-magnet med provväxlare och kryoprob installerades som ett led i samverkan med Medivir AB. Vid installationen upptäcktes att proben behövde genomgå översyn. I omedelbar anslutning behövde proben ytterligare service, och detta instrument har inte varit operativt under någon del av 2017.

En automatisk provväxlare överfördes från 900 MHz-magneten till en 600 MHz-magnet. Tillsammans med en RT BBI-prob utgör detta grunden för att kunna utföra kvalitetsreglerad och standardiserad metabolomik, i enlighet med Brukers koncept för IVDr (*in vitro* diagnostics research).

Under 2017 skedde noggranna analyser av störningar från spårvägstrafik. Olika alternativ (korrigering vid processning av NMR-data, olika varianter av externa Helmholtz-spolar) för att undertrycka dessa störningar undersöktes. Detta ledde till installation av en magnetisk fältkompensationsutrustning som filtrerar bort >90% av störningar från spårvagnstrafik.

Utvärderingar, ansökningar och ekonomi

Naturvetenskapliga fakulteten, i egenskap av värdenhet, har genomfört en internationell utvärdering av verksamheten. Rapporten var positiv för Svenskt NMR-centrum.

Under 2017 har Svenskt NMR-centrum varit en facilitet inom SciLifeLab. Verksamheten har utförts tillsammans med Umeå-noden och regleras i ett

konsortialavtal mellan Göteborgs Universitet och Umeå Universitet (dnr V2016/1037).

Svenskt NMR-centrum var en partner inom NBIS (VR/RFI-stödd forskningsinfrastruktur för bioinformatik) under 2017. Ett konsortialavtal mellan Göteborgs Universitet och Uppsala Universitet reglerar denna verksamhet.

VR-RFI biföll en förlängning av NBIS-verksamheten för 2018-2019.

Resultaträkning för verksamhetsåret redovisas i tabell 2. Utfallet är 421 kkr, vilket är något bättre än det budgeterade. Utfallet följer också budget relativt väl, med smärre avvikelser. Årets utfall följer den 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	5 199	5 199	100%	5 199		
Försäljning	450	763	170%	421	192	
Interna bidrag	1 500	1 500	100%	1 500		
Bidrag	4 350	8 182	188%		8 182	
Finansiella intäkter	70	46	65%	11	34	
Periodisering på proj	-360	-4 191	1164%		-4 061	
Täckn. avs BF anlägg.	4 985	4 456	89%		4 456	
Avsättn BF anlägg.		-216			-216	
Intäkter	16 094	15 738	97%	7 131	8 587	
Lönekostnader	5 949	5 850	98%	2 486	2 744	619
Förändr. semesterskuld	20	20	100%	3	20	-3
Övr personalkost	200	147	73%	114	33	
Övrig Drift	2 705	2 613	97%	1 942	550	101
Indir kost int bidr	100			450	266	-718
Lokalkostnader	1 628	1 611	99%	870	740	
Finanisella kostnader		37		37		
Avskrivningar	5 392	5 040	93%	564	4 476	
Kostnader	15 995	15 317	96%	6 466	8 829	
Totalt	200	421		665	-243	

Artiklar med medförfattare från Svenskt NMR-centrum

[1-8]

1. Almhöjd, U.S., P. Lingström, Å. Nilsson, J.G. Norén, S. Siljeström, Å. Östlund, and **D. Bernin**, *Molecular Insights into Covalently Stained Carious Dentine Using Solid-State NMR and ToF-SIMS*. Caries Research, 2017. **51**(3): p. 255-263, doi: 10.1159/000460828
2. Brunius, C., **A. Pedersen, D. Malmodin, B.G. Karlsson**, L.I. Andersson, G. Tybring, and R. Landberg, *Prediction and modeling of pre-analytical sampling errors as a strategy to improve plasma NMR metabolomics data*. Bioinformatics, 2017. **33**(22): p. 3567-3574, doi: 10.1093/bioinformatics/btx442
3. Börjesson, M., Sahlin, K., **Bernin, D.**, and Westman, G. *Increased thermal stability of nanocellulose composites by functionalization of the sulfate groups on cellulose nanocrystals with azetidinium ion*. Journal of Applied Polymer Science, 2017. DOI: 10.1002/app.45963
4. Hall, U.A., S. Pettersson, F. Edin, **A. Pedersen, D. Malmodin**, and K. Madsen, *Metabolism and Whole-Body Fat Oxidation Following Post-Exercise Carbohydrate or Protein Intake*. International journal of sport nutrition and exercise metabolism, 2017: p. 1-25, doi: 10.1123/ijsnem.2017-0129
5. Mattsson, C., M. Hasani, B. Dang, **M. Mayzel**, and H. Theliander, *About structural changes of lignin during kraft cooking and the kinetics of delignification*. Holzforschung, 2017. **71**(7-8): p. 545-553, doi: 10.1515/hf-2016-0190
6. **Mayzel, M.**, A. Ahlner, P. Lundström, and V.Y. Orekhov, *Measurement of protein backbone ^{13}C and ^{15}N relaxation dispersion at high resolution*. Journal of Biomolecular NMR, 2017: p. 1-12, doi: 10.1007/s10858-017-0127-4
7. Rådjursöga, M., **G.B. Karlsson**, H.M. Lindqvist, **A. Pedersen, C. Persson**, R.C. Pinto, L. Ellegård, and A. Winkvist, *Metabolic profiles from two different breakfast meals characterized by ^1H NMR-based metabolomics*. Food Chemistry, 2017. **231**: p. 267-274, doi: 10.1016/j.foodchem.2017.03.142
8. Yang, J., A.-L. Gustavsson, M. Haraldsson, **G. Karlsson**, T. Norberg, and L. Baltzer, *High-affinity recognition of the human C-reactive protein independent of phosphocholine*. Organic & Biomolecular Chemistry, 2017. **15**(21): p. 4644-4654, doi: 10.1039/C7OB00684E

Artiklar där Svenskt NMR-centrum får erkännande:

[1-30]

1. Andersson, H., E. Danelius, P. Jarvoll, S. Niebling, A.J. Hughes, S. Westenhoff, U. Brath, and M. Erdélyi, *Assessing the ability of spectroscopic methods to determine the difference in the folding propensities of highly similar β -hairpins*. ACS omega, 2017. **2**(2): p. 508-516, doi: 10.1021/acsomega.6b00484

2. Andersson, H., J. Grafenstein, M. Isobe, M. Erdélyi, and M.O. Sydnes, *Photochemically Induced Aryl Azide Rearrangement: Solution NMR Spectroscopic Identification of the Rearrangement Product*. The Journal of organic chemistry, 2017. **82**(3): p. 1812-1816, doi: 10.1021/acs.joc.6b02555
3. Andresen, C., M. Niklasson, S.C. Eklöf, B. Wallner, and P. Lundström, *Biophysical characterization of the calmodulin-like domain of Plasmodium falciparum calcium dependent protein kinase 3*. PloS one, 2017. **12**(7): p. e0181721, doi: 10.1371/journal.pone.0181721
4. Arnés, M., S. Casas-Tintó, A. Malmendal, and A. Ferrús, *Amyloid β 42 peptide is toxic to non-neural cells in Drosophila yielding a characteristic metabolite profile and the effect can be suppressed by PI3K*. Biology open, 2017. **6**(11): p. 1664-1671, doi: 10.1242/bio.029991
5. Atilaw, Y., S. Duffy, M. Heydenreich, L. Muiva-Mutisya, V.M. Avery, M. Erdélyi, and A. Yenesew, *Three Chalconoids and a Pterocarpene from the Roots of Tephrosia aequilata*. Molecules, 2017. **22**(2): p. 318, doi: 10.3390/molecules22020318
6. Atilaw, Y., L. Muiva-Mutisya, A. Ndakala, H.M. Akala, R. Yeda, Y.J. Wu, P. Coghi, V.K. Wong, M. Erdélyi, and A. Yenesew, *Four Prenylflavone Derivatives with Antiplasmodial Activities from the Stem of Tephrosia purpurea subsp. leptostachya*. Molecules, 2017. **22**(9): p. 1514, doi: 10.3390/molecules22091514
7. Danelius, E., H. Andersson, P. Jarvoll, K. Lood, J. Grafenstein, and M. Erdélyi, *Halogen bonding: a powerful tool for modulation of peptide conformation*. Biochemistry, 2017. **56**(25): p. 3265-3272, doi: 10.1021/acs.biochem.7b00429
8. Deyou, T., M. Marco, M. Heydenreich, F. Pan, A. Gruhonjic, P.A. Fitzpatrick, A. Koch, S. Derese, J. Pelletier, K. Rissanen, A. Yenesew, and M. Erdélyi, *Isoflavones and Rotenoids from the Leaves of Millettia oblata ssp. teitensis*. Journal of Natural Products, 2017. **80**(7): p. 2060-2066, doi: 10.1021/acs.jnatprod.7b00255
9. Ekberg, J., L. Nordstierna, and U. Klement, *Porosity investigation of yttria-stabilized zirconia topcoats using NMR cryoporometry*. Surface and Coatings Technology, 2017. **315**: p. 468-474, doi: 10.1016/j.surfcoat.2017.02.067
10. Garaga, M.N., L. Aguilera, N. Yaghini, A. Matic, M. Persson, and A. Martinelli, *Achieving enhanced ionic mobility in nanoporous silica by controlled surface interactions*. Physical Chemistry Chemical Physics, 2017. **19**(8): p. 5727-5736, doi: 10.1039/C6CP07351D
11. Gunnarsson, M., H. Theliander, and M. Hasani, *Chemisorption of air CO₂ on cellulose: an overlooked feature of the cellulose/NaOH (aq) dissolution system*. Cellulose, 2017. **24**(6): p. 2427-2436, doi: 10.1007/s10570-017-1288-8
12. Guo, D., H. Lu, and X. Qu, *A Fast Low Rank Hankel Matrix Factorization Reconstruction Method for Non-Uniformly Sampled Magnetic Resonance Spectroscopy*. IEEE Access, 2017. **5**: p. 16033-16039, doi: 10.1109/ACCESS.2017.2731860

13. Hakkert, S.B., J. Gräfenstein, and M. Erdelyi, *FDHALO17: The 15 N NMR chemical shift in the characterization of weak halogen bonding in solution*. Faraday Discussions, 2017. **203**: p. 333-346, doi: 10.1039/C7FD00107J
14. Hedlund, A., T. Köhnke, and H. Theliander, *Diffusion in Ionic Liquid–Cellulose Solutions during Coagulation in Water: Mass Transport and Coagulation Rate Measurements*. Macromolecules, 2017. **50**(21): p. 8707-8719, doi: 10.1021/acs.macromol.7b01594
15. Hellinger, R., K. Thell, M. Vasileva, T. Muhammad, S. Gunasekera, D. Kümmel, U. Göransson, C.W. Becker, and C.W. Gruber, *Chemical Proteomics for Target Discovery of Head-to-Tail Cyclized Mini-Proteins*. Frontiers in Chemistry, 2017. **5**: p. 73, doi: 10.3389/fchem.2017.00073
16. Huang, H., C. Karlsson, M. Strømme, A. Gogoll, and M. Sjödin, *Synthesis and characterization of poly-3-((2, 5-hydroquinone) vinyl)-1 H-pyrrole: investigation on backbone/pendant interactions in a conducting redox polymer*. Physical Chemistry Chemical Physics, 2017. **19**(16): p. 10427-10435, doi: 10.1039/C6CP08736A
17. Jorner, K., A. Dreos, R. Emanuelsson, O. El Bakouri, I.F. Galván, K. Börjesson, F. Feixas, R. Lindh, B. Zietz, and K. Moth-Poulsen, *Unraveling factors leading to efficient norbornadiene–quadricyclane molecular solar-thermal energy storage systems*. Journal of Materials Chemistry A, 2017. **5**: p. 12369-12378, doi: 10.1039/C7TA04259K
18. Koning, G., Leverin, A.-L., Nair, S., Schwendimann, L., Ek, J., Carlsson, Y., Gressens, P., Thornton, C., Wang, X., Mallard, C., and Hagberg, H. *Magnesium induces preconditioning of the neonatal brain via profound mitochondrial protection* Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism 2017. (In press) doi.org/10.1177/0271678X17746132
19. Leistner, K., A. Kumar, K. Kamasamudram, and L. Olsson, *Mechanistic study of hydrothermally aged Cu/SSZ-13 catalysts for ammonia-SCR*. Catalysis Today, 2017, doi: 10.1016/j.cattod.2017.04.015
20. Lu, H., X. Zhang, T. Qiu, J. Yang, J. Ying, D. Guo, Z. Chen, and X. Qu, *Low Rank Enhanced Matrix Recovery of Hybrid Time and Frequency Data in Fast Magnetic Resonance Spectroscopy*. IEEE Transactions on Biomedical Engineering, 2017, doi: 10.1109/TBME.2017.2719709
21. Morgado, L., Burmann, B. M., Sharpe, T., Mazur, A., and Hiller, S. *The dynamic dimer structure of the chaperone Trigger Factor* Nature Communications 2017. (In press). doi:10.1038/s41467-017-02196-7
22. Niklasson, M., R. Otten, A. Ahlner, C. Andresen, J. Schlagnitweit, K. Petzold, and P. Lundström, *Comprehensive analysis of NMR data using advanced line shape fitting*. Journal of biomolecular NMR, 2017. **69**(2): p. 93-99, doi: 10.1007/s10858-017-0141-6
23. Nyandoro, S.S., J.J. Munissi, M. Kombo, C.A. Mgina, F. Pan, A. Gruhonjic, P. Fitzpatrick, Y. Lu, B. Wang, K. Rissanen and Erdelyi, M. *Flavonoids from Erythrina schliebenii*. Journal of natural products, 2017. **80**(2): p. 377-383, doi: 10.1021/acs.jnatprod.6b00839

24. Ørsted, M., A. Malmendal, J. Muñoz, and T.N. Kristensen, *Metabolic and functional phenotypic profiling of Drosophila melanogaster reveals reduced sex differentiation under stressful environmental conditions*. Biological Journal of the Linnean Society, 2017. **123**(1): p. 155-162, doi: 10.1093/biolinnean/blx120
25. Palme, A., A. Peterson, H. de la Motte, H. Theliander, and H. Brelid, *Development of an efficient route for combined recycling of PET and cotton from mixed fabrics*. Textiles and Clothing Sustainability, 2017. **3**(1): p. 4, doi: 10.1186/s40689-017-0026-9
26. Ruan, C.-Q., M. Strømme, A. Mihranyan, and J. Lindh, *Favored surface-limited oxidation of cellulose with Oxone® in water*. RSC Advances, 2017. **7**(64): p. 40600-40607, doi: 10.1039/C7RA06141B
27. Schulz, N., P. Sokkar, E. Engelage, S. Schindler, M. Erdelyi, E. Sanchez-Garcia, and S.M. Huber, *The Interaction Modes of Haloimidazolium Salts in Solution*. Chemistry-A European Journal, 2017: p. in press, doi: 10.1002/chem.201705032
28. Wallenhammar, A., M. Anandapadamanaban, A. Lemak, C. Mirabello, P. Lundström, B. Wallner, and M. Sunnerhagen, *Solution NMR structure of the TRIM21 B-box2 and identification of residues involved in its interaction with the RING domain*. PloS one, 2017. **12**(7): p. e0181551, doi: 10.1371/journal.pone.0181551
29. Zhang, R., L. Wu, T. Eckert, M. Burg-Roderfeld, M.A. Rojas-Macias, T. Lütteke, V.B. Krylov, D.A. Argunov, A. Datta, P. Markart, Guenther, A., Norden, B., Schauer, R., Bhunia, A., Enani M. A., Billeter, M., Scheidig, A. J. Nifantiev, N. E., and Siebert, H. C. *Lysozyme's lectin-like characteristics facilitates its immune defense function*. Quarterly Reviews of Biophysics, 2017. **50**: p. e9, doi: 10.1017/S0033583517000075
30. Zhou, S., P. Pettersson, P. Brzezinski, P. Ädelroth, and L. Mäler, *NMR study of Rcf2 reveals an unusual dimeric topology in detergent micelles*. ChemBioChem, 2017: p. in press, doi: 10.1002/cbic.201700664

Artikel 1-8 med medförfattarskap från Svenskt NMR-centrum baseras antingen på metodutveckling eller omfattande assistans. Följande artiklar kan särskilt kommenteras:

- Artikel 2: Åldrande av biobankat material är ett potentiellt problem. I denna artikel beskrivs en metod, baserad på NMR-metabolomik, med vars hjälp biobankat material kan kvalitetsbedömas. Vi beskriver också en modell för att kunna prediktera hur data såg ut innan åldring. Arbetet var ett samarbete mellan KI (Tybring, ny användare), Chalmers (Landberg, ny användare) och Svenskt NMR-centrum.
- Artikel 6: Utveckling av ny pulssekvens för relaxation kombineras med icke-uniform datainsamling. Metodutveckling i samarbete med Liu (Lundström)
- Artikel 7. Implementering av NMR-baserad metabolomik för nutritionsstudier. Samarbete med Sahlgrenska Akademin (Winkvist, ny användare).
- Artikel 8. Fragmentbaserad screen (FBS) på ett selekterat bibliotek av molekyler från CBCS. Tillgång till FBS som service är bara tillgängligt via Svenskt NMR-centrum. Samarbete mellan UU (Baltzer), KI/CBCS (Gustavsson) och Svenskt NMR-centrum.

Artikel 1-30 med erkännande till Svenskt NMR-centrum baseras på tillgång till utrustning, metodik eller kompetens. Flera artiklar baseras på tillgång till den unika instrumentering vid Svenskt NMR-centrum. Det avspeglas bl a i artikel **2, 5, 6, 8 och 23** där tillgång till 800 MHz TXO-proben (hög upplösning kombinera med med särskild känslighet för ^{13}C) var av särskild betydelse.

I artikel **1, 7, 30** var den höga fältstyrkan i 900 MHz-magneten av särskild betydelse. För små molekyler är NOE-effekten otillräcklig vid lägre fält och den höga fältstyrkan var också nödvändig för att erhålla önskvärd TROSY-effekt.

Användning av 800MHz-magnet med högkänslig 3mm kryoprob var av speciell betydelse för de arbeten som bl a beskriver metabolomikstudier av extrakt från bananflugor (**artikel 4 och 24**) samt för proteinanalys i artiklar **21** och **28**.

Artikel **18** utgör exempel på full metabolomiksupport (provberedning, datrainsamling och analys) till Sahlgrenska Akademin (Hagberg, ny användare).

Inom materialvetenskap fanns ny användare från Uppsala (Strømme, artiklar 16 och 26) och i strukturbologi fanns ny användare från KI (Petzold, artikel 22).