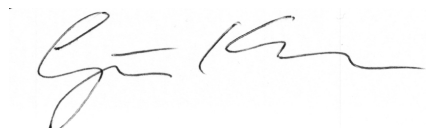


Svenskt NMR-centrum vid Göteborgs universitet

Verksamhetsrapport 2018

DATUM:

2019-02-28

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Göran Karlsson', is written over a light blue rectangular stamp.

Göran Karlsson
Föreståndare

Sammanfattning

Instrumentanvändningen har varit god. Under 2018 har Svenskt NMR-centrum gett stöd till 130 projekt. Projekten fördelas på ett knappt 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 drygt 27 000 timmar vilket är något mer än föregående år.

Svenskt NMR-centrum har organiserat diskussionsmöten, nationella och internationella workshops samt arrangerat det nationella NMR-mötet 2018 i Göteborg. Verksamheten vid forskningsinfrastrukturen har presenterats vid ett flertal tillfällen, både nationellt och internationellt.

Rektor beslöt att svenskt NMR-centrum skall vara en GU-infrastruktur under perioden 2018-07-01 -2021-06-30. Fakultetsstyrelsen beslöt att Institutionen för Kemi och Molekylär Biologi skall vara värdenhet för Svenskt NMR-centrum från och med 2018-07-01.

De vetenskapliga resultaten presenteras i 33 granskade artiklar i internationella tidskrifter. Omsättningen har varit 14 MKr och gav ett resultat på 377 kkr.

Summary

In 2018, the Swedish NMR Centre provided support to 130 projects. The projects were requested by almost 70 researchers (PIs) from University of Gothenburg and other national and international universities. Ten 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 27 000 hrs, a slight increase in comparison to the previous year.

The Swedish NMR Centre has organized discussion meetings, national and international workshops hosted the Swedish NMR Meeting 2018. The activity at the research infrastructure has been presented on several occasions, both nationally and internationally.

The vice-chancellor decided to prolong the appointment of the Swedish NMR Centre as a University of Gothenburg research infrastructure for the period 2018-07-01 - 2021-06-30. The board of the Science faculty decided that the department of Chemistry and Molecular Biology should be the host for the Swedish NMR Centre from 2018-07-01.

The scientific results were published in 33 peer-reviewed articles in international journals. The turnover was 14 MSEK and the result was 377 kSEK.

Innehållsförteckning:

Sammanfattning	3
Summary	3
Innehållsförteckning	4
Instrumentanvändning	5
Personresurser	9
Applikationsområden	9
Nationell användning	10
Publikationer	11
Outreach och övriga aktiviteter	11
Utvärdering, organisation och ekonomi	12
Bilagor	
1. Publikationslista för 2018	14

NMR-magneters användning och övrig utrustning:

Under året har enbart små förändringar skett i NMR-instrumentering. Inga nya magneter har tillkommit. En 600 MHz RT-prob har införskaffats, med huvudsakligt användningsområde för metabolomik. Rekomenderad service av kryoprober har genomförts och instrumentövervakning har i övrigt fungerat klanderfritt. Uppgraderingar av NMR-programvara har gjorts enligt rekommendationer och övrig kringutrustning har också god status.

Den totala användningen av alla magneter är 25 400 timmar vilket är en minskning med 2 % jämfört med föregående år. Det avspeglar i någon att 900 MHz-magneten inte kunnat användas under året. För övriga högfältsinstrument är användningen mycket god.

Varian 500 MHz & 600 MHz

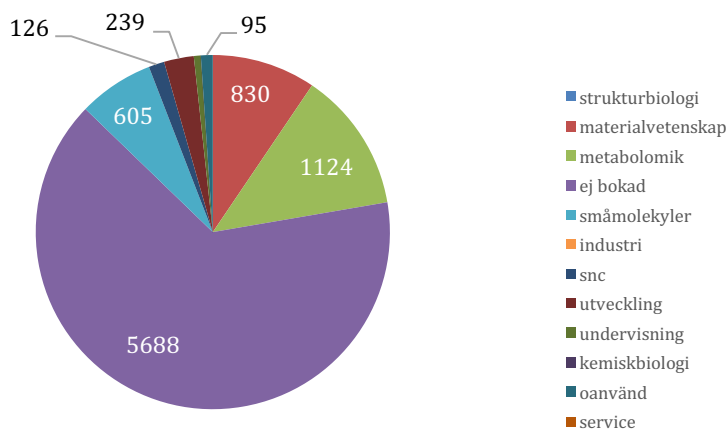
De två äldsta instrumenten, 500 MHz resp 600 MHz, används i mycket liten omfattning. Både magneterna är dock i mycket gott skick och en uppgradering av konsolerna är planerad.

600MHz - solids

Magneten fungerar väl, men över tid har det blivit tydligt att hålltiden för flytande kväve långsamt minskar. Under 2018 är kvävenivån i snitt 9% då påfyllning sker i intervall om 14 dagar. Den fortsatta utvecklingen ska noga följas. Denna magnet har använts i liten omfattning under 2018. Svårigheten att reglera rotationshastigheten löstes slutligen efter upprepade justeringar av fiberoptiken. Under året har magneten använts ca 650 h (7%).

600MHz - diff, MR, IVDr

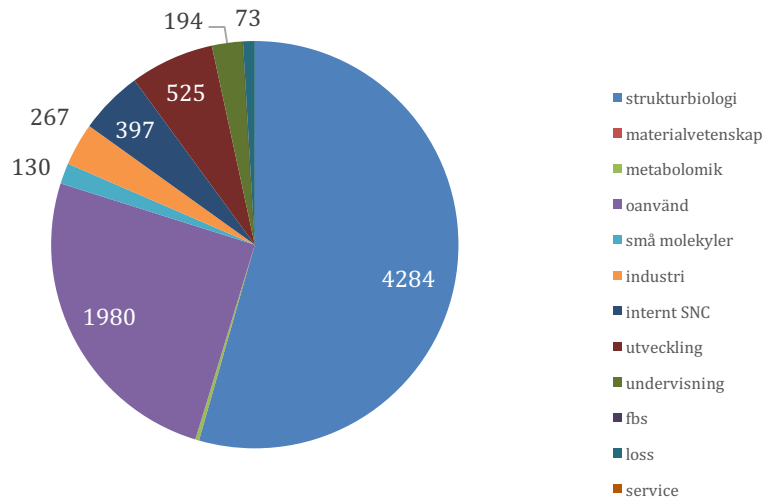
Magneten fungerar väl. Som ett led att öka användningen skaffades en 600 MHz H(X) RT-prob som möjliggör metabolomik-tillämpningar enligt konceptet för IVDr (in vitro diagnostics research) som utvecklats av Bruker. Efter en installationsperiod under våren gick användningen upp avsevärt under andra halvåret. Total bokad tid var 3100 timmar (33%) med metabolomik (13%) och materialvetenskap (9%) främst (Fig. 1). Totalt analyserades mer än 4000 metabolomikprover under 2018.



Figur 1. Användning av 600 MHz "Bruker" inom olika

700 MHz

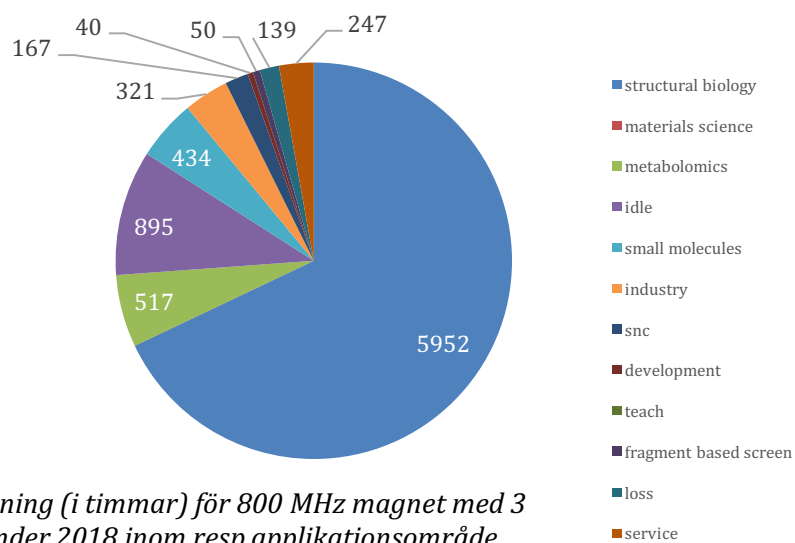
Efter den långdragna reparationen började denna magnet användas fullt ut i februari 2018. Därefter har den varit bokad 5900 timmar (75%, Fig. 2). även här är strukturbiologi det ojämförligt största tillämpningsområdet. Kombinationen 700 MHz och ^1H , ^{19}F , ^{13}C , ^{15}N är mycket ovanlig. Service för kryoproben är planerad i februari 2019.



Figur 2. Användning av 700 MHz magneten inom olika tillämpningsområden.

800#1.

Magneten har fungerat väl under det gångna året. Heliumavkok och kväveavkok är mycket konstant. Den världsunika 3mm kryoproben genomgick service den 8:e februari. I samband med ett akut avbrott av strömförsörjningen den 10:e augusti sjönk temperaturen snabbt i 3m-proben och ett NMR-rör frös sönder. Efter rengöring av proben med destillerat vatten och etanol kunde proben tas i bruk efter ca en veckas uppehåll. Känslighet och linjeform hade inte påverkats. Magneten har i mycket stor omfattning använts för strukturbiologi och i mindre omfattning för andra tillämpningar (Fig. 3).

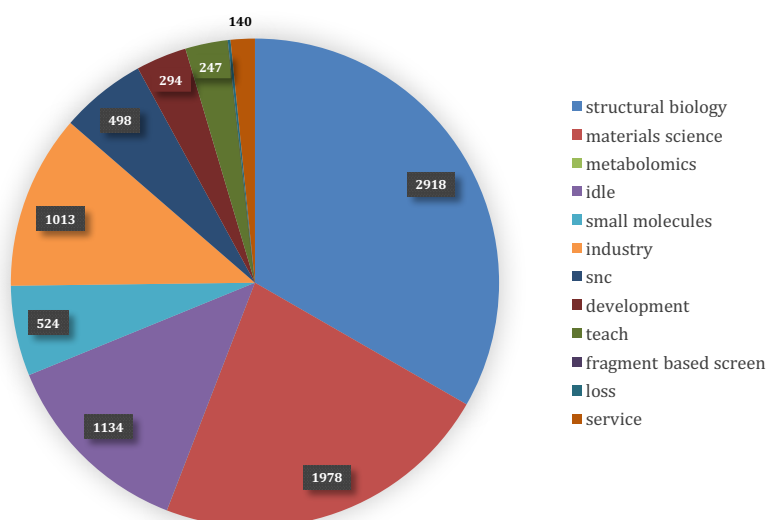


Figur 3. Användning (i timmar) för 800 MHz magnet med 3 mm kryoprob under 2018 inom resp applikationsområde.

Den bokade tiden för detta instrument ligger på ca 7 900 timmar (90%). Av denna tid har 68% använts för strukturbologi, medan metabolomik, småmolekyler och industri är relativt jämnstora och står tillsammans för 15% av bokad tid.

800#2.

Denna magnet har fungerat mycket väl under året och varit efterfrågad inom flera applikationsområden. Magneten har en av få kryoprober dedikerad för ^{13}C -detektion och kombinationen med 800 MHz finns bara på ett fåtal platser i hela världen. Kryoproben på denna magnet genomgick service den 7 juli, även denna prob påverkades av det akuta strömbortfallet den 10 augusti, men i avsevärt mindre omfattning eftersom NMR-röret inte frös sönder. även denna magnet har använts i mycket stor omfattning (Fig 4). Den bokade tiden är 7600 timmar (87%) och även här är strukturbologi största användningsområde (33%) följt av materialvetenskap (22%).



Figur 4. Användning av 800MHz med ^{13}C -prob i timmar inom olika områden.

900 MHz

Efter quenchen i december 2017 så har ett intensivt arbete pågått för att återställa full funktionalitet. De "stora" aktörerna (Oxford Instruments, Agilent, Bruker) förklarade relativt omgående att de av olika skäl inte kunde bistå i processen. Den genomgående hållningen var att man saknade både utrustning och kompetens. Efter ett smärre detektivarbete identifierades ett företag i Storbritannien, High Field Specialists, som kunde uppvisa både erforderlig kompetens och den nödvändiga specialutrustningen. Vi fick därmed tillgång till den person som ansvarat för omstarten av magneten 2011, och som högst troligt är mest kompetent för detta arbete över huvud taget.

I februari 2018 gjordes en total kontroll av magnetspoler och det elektriska systemet. Magnetspolarna var helt funktionella, men den elektriska quenchkontrollenheten behövde återställas efter den kontrollerade quenchen. High Field Specialists lämnade ett kostnadsförslag i flera delar, dels ren service för att byta O-ringar och kontrollera vacuum, reparation för att återställa quen-

enheten, samt återinstallation för att kyla ned magneten och ladda magneten och ta den till fält.

Arbetet med att byta O-ringar påbörjades i juni och pågick in i augusti. I augusti gjordes den slutliga vacuum-testen. Resultaten var inte helt tillfredsställande men bedömdes vara tillräckligt bra för en fortsatt nedkylning och laddning av magneten. Inför nedkylningen behövdes tillgång på 9 000 L flytande helium. Inför ett försök i oktober förklarade vår huvudleverantör, AGA, att man bara klarade att leverera 3 000L vid ett tillfälle. De två övriga godkända leverantörerna, AirLiquide och Strandmöllen, kunde vid detta tillfälle inte garantera leverans p g a osäkerhet i heliumtillgången. Ett nytt försök planerades i början av december. Vid detta tillfälle kunde AGA garantera 3 000L och AirLiquide kunde garantera leverans av 6 000L. Nedkylningen påbörjades den 10 december, och efter en vecka uppnåddes temperaturen för flytande helium, 4,2K, i magnetens heliumkärl. Avkoket var då högt, ca 6% per dygn, men det höga avkoket skulle kunna bero på att magneten ännu inte uppnått temperaturjämvikt. En observation av uppförandet vid lägre temperatur, ca 3.3K, var nödvändigt för att kunna bedöma om magneten var funktionell. I januari 2019, efter nedkylning av det undre heliumkärlet till 3.3 K kvarstod ett avkok på 2,5% per dygn, vilket är ca dubbelt så högt som det förväntade. Efter att temperaturen i det undre heliumkärlet fick stiga tillbaka till 4,2K observerades ett avkok på 12,5% per dygn, och det stod klart att det fanns ett inre läckage. Vid mätning av magnetens vacuum återfanns mycket höga heliumnivåer. Läckaget av helium in i vacuumutrymmet omöjliggör fortsatt användning av magneten

Övrigt

Övrig utrustning, inklusive provväxlare, provberedningsrobot, utrustning i våtlab samt heliumuppsamlingsanläggning, har överlag fungerat väl. Kylanläggning för UPS-enheten (Fig. 5) visade sig dock vara underdimensionerad. I samband med översyn av fjärrkyla på Medicinareberget den 6 juli uppgick temperaturen i UPS-rummet till 40 °C. Samtliga batterier i UPS-enheten förstördes och den förlorade >95% av laddningsförmågan. Vid ett strömavbrott den 10 augusti, orsakat av åsknedslag, blev Medicinareberget, inklusive hela Hasselbladlaboratoriet, strömlöst under en kortare period. Samtliga tre kryoprober i drift värmdes upp och ett prov frös sönder i 3mm kryoproben. Denna prob kunde rengöras på plats och visade inga tecken på prestandabortfall. Akademiska hus ersatte arbetskostnad för rengöringen av proben samt kostnader för att förnya batteripaketet.



Figur 5. Nyttan med UPS-enhet och avbrottsfri generatorkraft visade sig 19:e januari 2019, då hela Medicinareberget var strömlöst i 40 minuter. Vid Hasselbladlaboratoriet strömförsörjs hela apparathallen samt datorer i kontrollrummet via UPS-enheten och personalen kunde oförtrutet fortsätta arbeta vid NMR-spektrometrarna. (Notera att inomhusbelysningen inte strömförsörjs på detta sätt.)

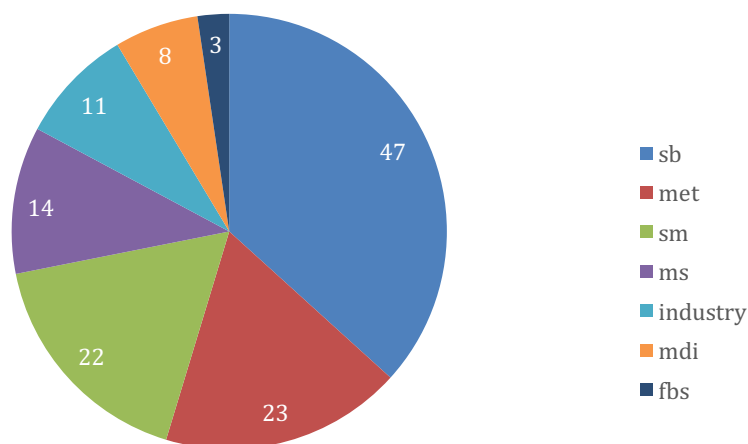
Personresurser per applikationsområden

Under året 2018 har 4.25 FTE forskningsingenjörer varit verksamma.

Det är något lägre än föregående år. En forskningsingenjör har varit ledig för annan statlig anställning och en forskningsingenjör slutade tidigt under 2018 för att gå till en anställning som applikationsexpert hos Bruker. Interna aktiviteter (service, tester, underhåll, administration) har i princip krävt oförändrad personalinsats och mindre tid för support, kompetensutveckling, metodutveckling och implementering har därför varit möjligt. En tillsvidareanställd forskningsingenjör tillträdde i november, och två forskningsingenjörer anställdes för en period om ett år (strukturbiologi resp metabolomik) i avsikt att avlasta personal och möjliggöra intern kompetensutveckling.

Applikationsområden.

Under perioden har aktivitet pågått inom ca 130 projekt. Flest projekt (47) återfinns inom tillämpningsområdet strukturbiologi, följt av metabolomik (23), småmolekyler (22) och materialvetenskap (14) (Fig. 6)



Figur 6. antal projekt inom resp tillämpningsområde.

Applikationsområdet strukturbiologi har vuxit i omfattning till 47 projekt (39 projekt 2017) och på nivå som varierar från tillgång till experimenttid till analys av NMR-spektra. Ökningen beror till del på en användare (Burmann, GU). Under perioden har flera sekventiella tillordningar genomförts. Användare återfinns vid universiteten i Umeå, Stockholm (SU, KI), Lund, Uppsala (UU, SLU), Linköping, Göteborg, Barcelona och Frankfurt samt industri (Medivir). Bland de projekt som fått mest stöd under 2018 kan nämnas en studie av signalöverföring i bakteriella fytocytokromer från Göteborgs Universitet, en studie av protein-ligandinteraktion från Lunds Universitet och en strukturbestämning av ett protein från det bakteriella sekretionssystemet Typ III från Umeå Universitet.

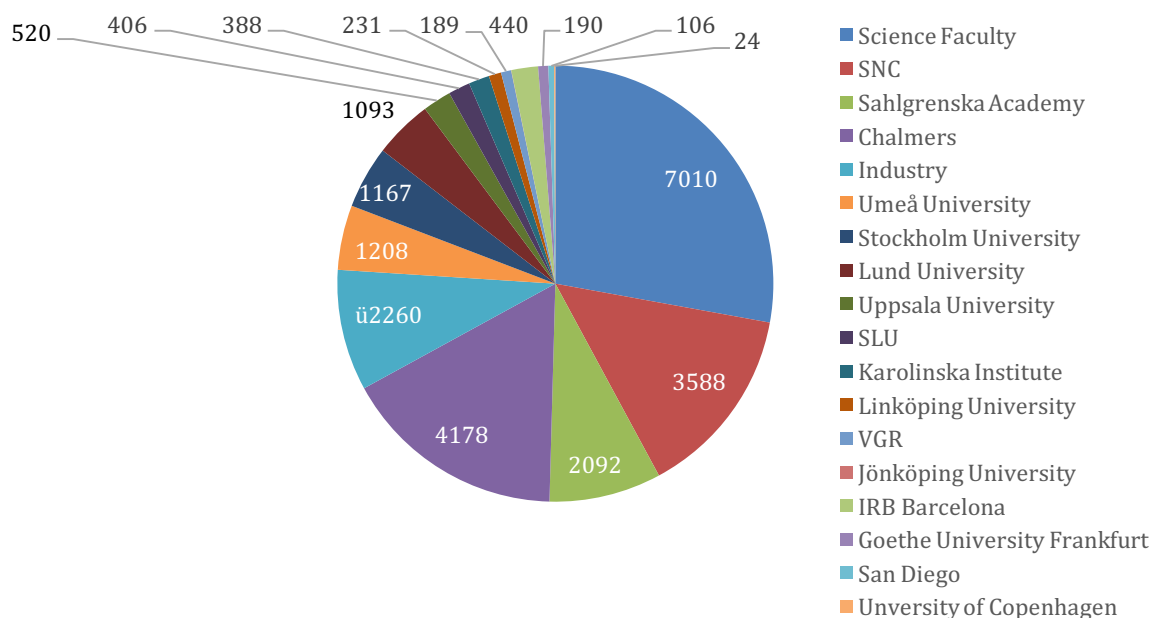
Inom NMR-baserad metabolomik är Bruker en ledande aktör och har introducerat ett koncept, IVDr (in vitro diagnostic research) som har implementerats vid ert flertal internationella laboratorier, t ex inom International Phenome Centre Network samt vid Imperial College och CERM (Florence). I maj 2018 introducerade vi IVDr-konceptet vid NMR-centrum, med särskilt fokus på lipoproteinprofilering. Därefter har mer än 4 000 serum- och plasmaprover analyserats med denna teknik, bl a 2 000 prover från "Västerbottenkohorten". Chalmers har bett om analys av 900 prov i en

jämförande studie mellan Brukers approach och den teknologi som erbjuds av det finska företaget Nightingale. Som en följd av detta har planering för NMR-baserad metabolomik inom MEDIMACS, en uppföljning till PREDIMED-studien, genomförts. Totalt har 23 projekt (33 projekt 2017) fått stöd som inkluderar provberedning, datainsamling och analys. Totalt har datainsamling från drygt 4000 prover genomförts med användare från universiteten i Göteborg, Lund, Jönköping, Aarhus, Köpenhamn, San Diego, samt Chalmers, Sahlgrenska Universitetssjukhuset och Södra älvborgs Sjukhus.

Inom småmolekyler finns användare från Göteborgs Universitet, Chalmers, Lund, Uppsala samt industri (Medivir, IRL, Gnothis AB). Under året har SNC supportat totalt 19 projekt (22 projekt 2017). Bland de projekt som fått mest stöd under 2018 återfinns en studie som inkluderar NOE-uppbyggnadkurvor för små molekyler, från Uppsala Universitet.

Inom området materialvetenskap/imaging finns aktivitet inom 14 projekt (30 projekt 2017) att redovisa, huvudsakligen med användare från Chalmers och Sahlgrenska. Detta område har minskat avsevärt jämfört med föregående år vilket i någon mån avspeglar tillgänglig support under året, men också en komplexitet att särskilja från studier som inkluderar småmolekyler. Exempel på projekt inom denna kategori är t ex imagingstudier av biopsier från Sahlgrenska Akademien eller utveckling av metodik för att studera kemiskt modifierad cellulosa, från Chalmers.

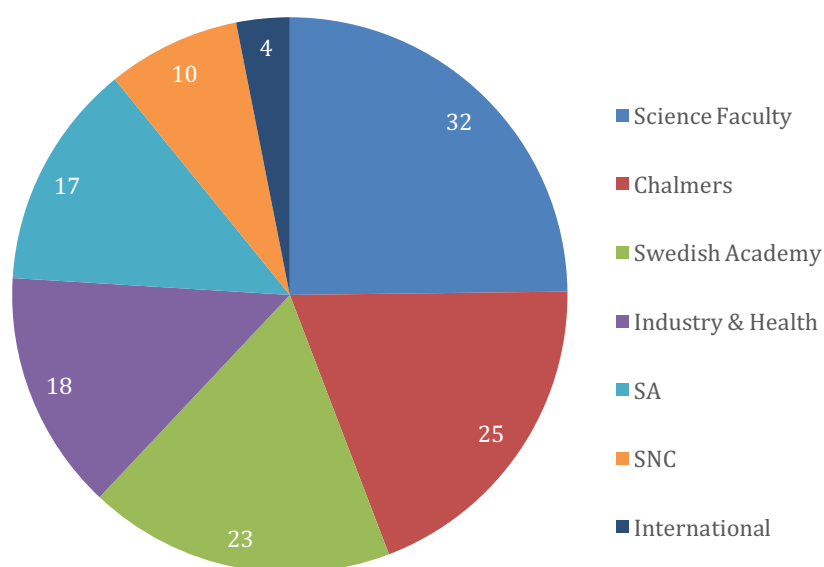
Inom kemisk biologi finns aktivitet inom tre projekt, två från Göteborgs Universitet samt ett från Medivir.



Figur 7. Fördelning av spektrometertid på universitet. GU står för 50% och Göteborg (inkl Chalmers) ca 2/3 av tiden. Jämfört med 2017 finns en ökning för industri och en minskning för internationella användare.

Nationell fördelning av användning

Under 2018 använde 66 forskningsgrupper, 6 företag samt fyra andra icke-akademiska användare Svenskt NMR-centrum. De fick tillgång till NMR-tid och varierande grad av support i ca 130 projekt. Med utgångspunkt från användarens affiliering ser vi en relativt bred användning i Sverige, även om Göteborgs Universitet är dominerande och står för 50% av den totala användningen när det gäller spektrometertid (Fig. 7). Jämfört med föregående år står Göteborgs Universitet för en liten ökning. Uppdelat på projekt (Fig 8) så är bilden likartad. Göteborgs Universitet står för ca hälften av projekten.



Figur 8. Fördelning av projekt 2018 på lokal, nationell, internationell, och industri-användning.

Publikationer

Under 2018 finns 33 publikationer som antingen har medförfattare från NMR-centrum eller där NMR-centrum får erkännande i egenskap av forskningsinfrastruktur (Se också appendix 1).

Outreach och övriga aktiviteter

Ett flertal workshops, kurser och symposier har arrangerats under perioden. NMR-centrum har bl a engagerats i undervisning på avancerad nivå vid Göteborgs Universitet, bla genom masterskurser för apotekare, kemister och biologer. En riktad workshop (reach-in) mot Örebro/Uppsala har genomförts med fokus på strukturbiologi och metoder för sekventiell tillordning. NMR-centrum har besökt NMR-laboratoriet i Umeå och på plats jämfört och diskuterat verksamhet, investeringar och strategisk utveckling av forskningsinfrastrukturer.

Verksamheten presenterades vid MoReLife Infrastrukturdagar i Lund, 28 februari - 1 mars, vid SciLife Science Summit, 25 april, vid SBnets årliga möte i Tällberg, 15-18 juni, vid Organikerdagarna i Lund, 17-20 juni, i samband invigningen av NMR-laboratoriet i Uppsala (13 April) vid Swedish Metabolomics Conference, 26-28

augusti i Örebro, vid mötet med den nya National SciLifeLab Committee i Stockholm den 5 September, samt vid Svenskt NMR-möte i Göteborg 23-25 oktober. Verksamheten har också presenterats vid Norskt NMR-möte (Tromsø), ENC (Orlando), EUROMAR 2018 (Nantes) samt ICMRBS 2018 (Dublin).

Utvärderingar, organisation och ekonomi

Rapporten från den internationella utvärderingen i slutet av 2017 utgjorde underlag för Naturvetenskapliga fakultetens, i egenskap av värdenhet, ansökan till rektor att svenskt NMR-centrum fortsatt ska vara en GU-forskningsinfrastruktur vid Göteborgs Universitet. Rektor beslöt att svenskt NMR-centrum fortsatt ska vara en GU-forskningsinfrastruktur under perioden 2018-07-01 - 2021-06-30.

I juni beslöt styrelsen vid Naturvetenskapliga fakulteten att Svenskt NMR-centrum ska föras över till institutionen för kemi och molekylär biologi från 2018-07-01, samt ha eget kostnadsställe. Inför beslutet förtydligades att tilldelning till Svenskt NMR-centrum ska ske direkt från fakultetsstyrelsen. Ett prefektbeslut delegerar ansvar för arbetsmiljö, ekonomi och personal till föreståndaren för Svenskt NMR-centrum.

Under 2018 har Svenskt NMR-centrum varit en facilitet inom SciLifeLab. Verksamheten inom SciLifeLab har utförts tillsammans med Umeå-noden och regleras i ett konsortialavtal mellan Göteborgs Universitet och Umeå Universitet (dnr V2016/1037). Inom SciLifeLab tillhör Svenskt NMR-centrum den organisatoriska plattformen "Cellular Imaging och Molecular Structures". Verksamheten ger stöd inom tre serviceområden: Bioimaging and Molecular Structure, Metabolomics samt Chemical Biology and Genome Engineering.

Svenskt NMR-centrum var en partner inom NBIS (VR/RFI-stödd forskningsinfrastruktur för bioinformatik) under 2018. Ett konsortialavtal mellan Göteborgs Universitet och Uppsala Universitet reglerar denna verksamhet.

Resultaträkning för verksamhetsåret redovisas i tabellen till höger. Resultat är 377 kkr, vilket är något bättre än det budgeterade. Utfallet följer också budget relativt väl, med smärre avvikelser. Årets resultat följer den 5-årsplan som ska ge ett ackumulerat resultat (eller "fritt disponibelt kapital") enligt rektors rekommendation, dvs 5-8% av omsättningen. Svenskt NMR-centrum har ett fritt disponibelt kapital som är 1154 kkr efter 2018.

Resultaträkning	Budget	Utfall	%
Anslag	5 199	5 199	100%
Försäljning	800	537	67%
Interna bidrag	1 500	3341	223%
Bidrag	3 650	5442	149%
Finansiella intäkter	40	68	170%
Periodisering påg <u>proj</u>	616	-3 522	571%
<u>Täckn. avs BF anlägg.</u>	3 864	3 077	80%
Intäkter	15 669	14 142	90%
Lönekostnader	5 947	4 941	83%
<u>Förändr. semesterskuld</u>	20	63	315%
<u>Övr personalkost</u>	200	249	124%
Övrig Drift	2 595	2 764	107%
Lokalkostnader	1 635	1 689	103%
<u>Finansella kostnader</u>		2	
Avskrivningar	5 932	3 865	65%
Kostnader	15 418	13 763	89%
Totalt	250	377	151%

Artiklar med medförfattare från Svenskt NMR-centrum

1. Effect of the paste-anode interface under impressed current cathodic protection in concrete structures,
Zhang EQ, Tang L, Bernin D, Jansson H,
Materials and Corrosion,0947-5117, 2018-08-00,2018-03-06,69,8,1104-1116,10.1002/maco.201709908
2. Higher Concentrations of BCAAs and 3-HIB Are Associated with Insulin Resistance in the Transition from Gestational Diabetes to Type 2 Diabetes,
Andersson-Hall U, Gustavsson C, Pedersen A, Malmodin D, Joelsson L, Holmäng A,
Journal of Diabetes Research,2314-6745, 2018-06-05,2018-06-05, ,1-12,10.1155/2018/4207067,29967793,
3. Increased thermal stability of nanocellulose composites by functionalization of the sulfate groups on cellulose nanocrystals with azetidinium ions
Börjesson M, Sahlin K, Bernin D, Westman G,
J. Appl. Polym. Sci.,0021-8995, 2018-03-10,2017-11-08,135,10,45963,10.1002/app.45963
4. Affinity of charcoals for different forms of radioactive organic iodine,
Aneheim E, Bernin D, Foreman MRS,
Nuclear Engineering and Design,0029-5493, 2018-03-00,2018-03-00,328,,228-240,10.1016/j.nucengdes.2018.01.007
5. Perspectives on NMR studies of CO₂ adsorption,
Bernin D, Hedin N,
Current Opinion in Colloid & Interface Science,1359-0294, 2018-01-00,2018-01-00,33,,53-62,10.1016/j.cocis.2018.02.003
6. Surface treatment of cellulose nanocrystals (CNC): effects on dispersion rheology
Sahlin K, Forsgren L, Moberg T, Bernin D, Rigdahl M, Westman G,
Cellulose,0969-0239, 2018-01-00,2017-11-28,25,1,331-345,10.1007/s10570-017-1582-5
7. The CO₂ capturing ability of cellulose dissolved in NaOH(aq) at low temperature,
Gunnarsson M, Bernin D, Östlund Å, Hasani M,
Green Chem.,1463-9262, 2018-00-00,2018-00-00,20,14,3279-3286,10.1039/c8gc01092g
8. High-fidelity spectroscopy reconstruction in accelerated NMR,
Qu X, Qiu T, Guo D, Lu H, Ying J, Shen M, Hu B, Orekhov V, Chen Z,
Chem. Commun.,1359-7345, 2018-00-00,2018-00-00,54,78,10958-10961,10.1039/c8cc06132g,30198542
9. Effect of various structure directing agents (SDAs) on low-temperature deactivation of Cu/SAPO-34 during NH₃-SCR reaction,
Woo J, Leistner K, Bernin D, Ahari H, Shost M, Zammit M, Olsson L,
Catal. Sci. Technol.,2044-4753, 2018-00-00,2018-00-00,8,12,3090-3106,10.1039/c8cy00147b
10. Dispersed Uniform Nanoparticles from a Macroscopic Organosilica Powder,
Church TL, Bernin D, Garcia-Bennett AE, Hedin N,
Langmuir,1520-5827, 2018-02-13,2018-02-05,34,6,2274-2281,10.1021/acs.langmuir.7b03705,29400064
11. Nutritional Metabolomics: Postprandial Response of Meals Relating to Vegan, Lacto-Ovo Vegetarian, and Omnivore Diets,
Rådjursöga M, Lindqvist H, Pedersen A, Karlsson B, Malmodin D, Ellegård L, Winkvist A,
Nutrients,2072-6643, 2018-08-10,2018-08-10,10,8,1063,10.3390/nu10081063,30103400

12. XLSY: Extra-Large NMR Spectroscopy,
Pustovalova Y, Mayzel M, Orekhov VY,
Angew. Chem. Int. Ed.,1433-7851, 2018-10-22,2018-10-01,57,43,14043-
14045,10.1002/anie.201806144,30175546

Artiklar där Svenskt NMR-centrum har gett access eller annan support:

13. Carbon's Three-Center, Four-Electron Tetrel Bond, Treated Experimentally,
Karim A, Schulz N, Andersson H, Nekoueishahraki B, Carlsson ACC, Sarabi D, Valkonen A,
Rissanen K, Gräfenstein J, Keller S, Erdelyi, M,
J. Am. Chem. Soc.,1520-5126, 2018-12-07,2018-12-07,,,,10.1021/jacs.8b09367
14. Crystal Structures and Cytotoxicity of ent-Kaurane-Type Diterpenoids from Two *Aspilia*
Species,
Yaouba S, Valkonen A, Coghi P, Gao J, Guantai EM, Derese S, Wong VKW, Erdelyi, M,
Yenesew A,
Molecules,1420-3049, 2018-12-04,2018-12-
04,23,12,3199,10.3390/molecules23123199,
15. A randomized controlled cross-over trial investigating the effect of anti-inflammatory
diet on disease activity and quality of life in rheumatoid arthritis: the Anti-inflammatory
Diet In Rheumatoid Arthritis (ADIRA) study protocol,
Winkvist A, Bärebring L, Gjertsson I, Ellegård L, Lindqvist HM,
Nutr J,1475-2891, 2018-12-00,2018-04-20,17,1,,10.1186/s12937-018-0354-x
16. Metabolic control of PPAR activity by aldehyde dehydrogenase regulates invasive cell
behavior and predicts survival in hepatocellular and renal clear cell carcinoma,
Andrejeva D, Kugler JM, Nguyen HT, Malmendal A, Holm ML, Toft BG, Loya AC, Cohen
SM,
BMC Cancer,1471-2407, 2018-12-00,2018-11-28,18,1,,10.1186/s12885-018-5061-7
17. Ulvan lyase from *Formosa agariphila* and its applicability in depolymerisation of ulvan
extracted from three different *Ulva* species,
Konasani VR, Jin C, Karlsson NG, Albers E,
Algal Research,2211-9264, 2018-12-00,2018-12-00,36,,106-
114,10.1016/j.algal.2018.10.016
18. A novel ulvan lyase family with broad-spectrum activity from the ulvan utilisation loci of
Formosa agariphila KMM 3901,
Konasani VR, Jin C, Karlsson NG, Albers E,
Sci Rep,2045-2322, 2018-12-00,2018-10-02,8,1,,10.1038/s41598-018-32922-
0,30279430,
19. Vandermonde Factorization of Hankel Matrix for Complex Exponential Signal Recovery -
Application in Fast NMR Spectroscopy,
Ying J, Cai JF, Guo D, Tang G, Chen Z, Qu X,
IEEE Trans. Signal Process.,1053-587X, 2018-11-01,2018-11-01,66,21,5520-
5533,10.1109/tsp.2018.2869122
20. Halogen Bond Asymmetry in Solution,
Lindblad S, Mehmeti K, Veiga AX, Nekoueishahraki B, Gräfenstein J, Erdelyi, M,
J. Am. Chem. Soc.,1520-5126, 2018-10-17,2018-09-20,140,41,13503-
13513,10.1021/jacs.8b09467
21. Silica-based diffusion probes for use in FRAP and NMR-diffusometry,
Pihl M, Kolman K, Lotsari A, Ivarsson M, Schüster E, Lorén N, Bordes R,
Journal of Dispersion Science and Technology,0193-2691, 2018-10-08,2018-10-08,,,1-
8,10.1080/01932691.2018.1472015
22. Backbone ¹H, ¹³C, and ¹⁵N resonance assignments of the ligand binding domain of the

- human wildtype glucocorticoid receptor and the F602S mutant variant,
Köhler C, Carlström G, Tångefjord S, Papavoine T, Lepistö M, Edman K, Akke M,
Biomol NMR Assign,1874-2718, 2018-10-00,2018-04-17,12,2,263-268,10.1007/s12104-
018-9820-9,29667121,
23. Conformational Sampling of Macrocyclic Drugs in Different Environments: Can We Find the Relevant Conformations?,
Poongavanam V, Danelius E, Peintner S, Alcaraz L, Caron G, Cummings MD, Wlodek S, Erdelyi, M, Hawkins PCD, Ermondi G, Kihlberg J,
ACS Omega,2470-1343, 2018-09-30,2018-09-24,3,9,11742-
11757,10.1021/acsomega.8b01379,30320271
 24. NMR Determination of the Binding Constant of Ionic Species: A Caveat,
Schulz N, Schindler S, Huber SM, Erdelyi, M,
J. Org. Chem.,1520-6904, 2018-09-21,2018-08-15,83,18,10881-
10886,10.1021/acs.joc.8b01567,30110550
 25. Impact in Plasma Metabolome as Effect of Lifestyle Intervention for Weight-Loss Reveals Metabolic Benefits in Metabolically Healthy Obese Women
Almanza-Aguilera E, Brunius C, Bernal-Lopez MR, Garcia-Aloy M, Madrid-Gambin F, Tinahones FJ, Gómez-Huelgas R, Landberg R, Andres-Lacueva C,
J. Proteome Res.,1535-3907, 2018-08-03,2018-06-07,17,8,2600-
2610,10.1021/acs.jproteome.8b00042,29877711,
 26. Untargeted ¹H NMR-Based Metabolomics Analysis of Urine and Serum Profiles after Consumption of Lentils, Chickpeas, and Beans: An Extended Meal Study To Discover Dietary Biomarkers of Pulses,
Madrid-Gambin F, Brunius C, Garcia-Aloy M, Estruel-Amades S, Landberg R, Andres-Lacueva C,
J. Agric. Food Chem.,0021-8561, 2018-07-11,2018-06-19,66,27,6997-
7005,10.1021/acs.jafc.8b00047,29920085,
 27. Porosity measurements in suspension plasma sprayed YSZ coatings using NMR cryoporometry and X-ray microscopy,
Klement U, Ekberg J, Creci S, Kelly ST,
J Coat Technol Res,1547-0091, 2018-07-00,2018-03-13,15,4,753-757,10.1007/s11998-
018-0053-8
 28. Liquid Norbornadiene Photoswitches for Solar Energy Storage,
Dreos A, Wang Z, Udmark J, Ström A, Erhart P, Börjesson K, Nielsen MB, Moth-Poulsen K,
Adv. Energy Mater.,1614-6832, 2018-06-00,2018-03-
25,8,18,1703401,10.1002/aenm.201703401
 29. Mechanistic study of hydrothermally aged Cu/SSZ-13 catalysts for ammonia-SCR
Leistner K, Kumar A, Kamasamudram K, Olsson L,
Catalysis Today,0920-5861, 2018-06-00,2018-06-00,307,,55-
64,10.1016/j.cattod.2017.04.015
 30. The Influence of Heat Treatments on the Porosity of Suspension Plasma-Sprayed Yttria-Stabilized Zirconia Coatings,
Ekberg J, Ganvir A, Klement U, Creci S, Nordstierna L,
J Therm Spray Tech,1059-9630, 2018-02-00,2018-01-04,27,3,391-401,10.1007/s11666-
017-0682-y
 31. Orange is the new white: rapid curing of an ethylene-glycidyl methacrylate copolymer with a Ti-bisphenolate type catalyst,
Mauri M, Svenningsson L, Hjertberg T, Nordstierna L, Prieto O, Müller C,
Polym. Chem.,1759-9954, 2018-00-00,2018-00-00,9,13,1710-
1718,10.1039/c7py01840a

32. Improved Reconstruction of Low Intensity Magnetic Resonance Spectroscopy With Weighted Low Rank Hankel Matrix Completion,
Guo D, Qu X,
IEEE Access,2169-3536, 2018-00-00,2018-00-00,6,,4933-4940,10.1109/access.2018.2794478
33. Stabilized Cyclic Peptides as Scavengers of Autoantibodies: Neutralization of Anticitrullinated Protein/Peptide Antibodies in Rheumatoid Arthritis,
Gunasekera S, Fernandes-Cerqueira C, Wennmalm S, Wähämaa H, Sommarin Y, Catrina AI, Jakobsson PJ, Göransson U,
ACS Chem. Biol.,1554-8937, 2018-06-15,2018-04-09,13,6,1525-1535,10.1021/acscchembio.8b00118,29630823,