

# **Svenskt NMR-centrum vid Göteborgs universitet**

## **Verksamhetsrapport 2019**

**DATUM:**

2020-02-28

Göran Karlsson  
Föreståndare



## **Sammanfattning**

Instrumentanvändningen har varit god. Under 2019 har Svenskt NMR-centrum gett stöd till mer än 130 externa projekt och drygt 70 forskare (PIs) från Göteborgs universitet samt andra nationella och internationella universitet, från regioner, industri eller annan icke-akademisk organisation. Användare har fått stöd efter behov, och inom de applikationsområden som forskningsinfrastrukturen erbjuder. NMR-utrustningen har använts drygt 30 400 timmar vilket är avsevärt mer än föregående år.

Svenskt NMR-centrum har organiserat diskussionsmöten samt nationella och internationella workshops. Forskningsinfrastrukturen och dess verksamhet har presenterats vid ett flertal tillfällen, både vid nationella och internationella konferenser, samt vid andra svenska universitet.

Internt utvecklingsarbete har varit fokuserat på metodik inom metabolomik, småmolekyl-NMR och strukturbologi och i avsikt att bibehålla högsta standard.

Svenskt NMR-centrum har ingått ett avtal med AstraZeneca om gemensam anskaffning och drift av utrustning för fastfas DNP-NMR. En utrustning för förvätskning av uppsamlad heliumgas, med leverans under 2020, har beställts.

De vetenskapliga resultaten presenteras i 48 artiklar i internationella tidskrifter. Omsättningen var drygt 13 MKr och gav ett resultat på 210 kkr.

## **Summary**

In 2019, the Swedish NMR Centre provided support to more than 130 projects. The projects were requested by more than 70 researchers (PIs) from University of Gothenburg and other national and international universities. 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 more than 30 400 hrs, a considerable increase in comparison to the previous year.

The Swedish NMR Centre has organized discussion meetings, and national and international workshops. The research infrastructure and its activity has been presented on several occasions, both at national and international conferences and at other Swedish universities.

Internal development activities has been focused on methods for metabolomics, small molecule NMR and structural biology, with the purpose to maintain the highest standards.

An agreement was made with AstraZeneca concerning joint activity in MAS DNP-NMR. Equipment for helium gas liquification was ordered. The scientific results were published in 48 articles in international journals. The turnover was 13 MSEK and the result was 210 kSEK.



## **Innehållsförteckning:**

Sammanfattning	3
Summary	3
Innehållsförteckning	5
NMR-magnetens användning	7
Personresurser	8
Projekt inom applikationsområden	8
Nationell fördelning av användare	10
Publikationer	10
Outreach och övriga aktiviteter	10
Utvärdering och organisation	11
Ekonomi - utfall för 2019	11
Bilagor	
1. Publikationslista för 2019	13

## **NMR-magneters användning och övrig utrustning:**

Användningen av NMR-utrustningen är generellt god. Den totala användningen av alla magneter är drygt 30 400 timmar, en avsevärd ökning med ca 20 % jämfört med föregående år (Fig. 1). Det beror på exceptionellbeläggning på högfältsinstrument och en fortsatt ökad användning på 600 MHz-magneter. Användningen är fortsatt ojämnt fördelad över maskinparken. De två äldsta instrumenten, 500 MHz resp 600 MHz, används i mycket liten omfattning.

### **900 MHz**

I mitten av januari 2019 stod det klart att det förelåg en skada på magneten. Skadan består sannolikt av en läcka mellan magnetens heliumtank och vakuumdell. Det är inte ovanligt att sådana skador uppstår i den svetsfog i toppen på magneten där heliumtanken är infäst. I april gjorde Sweetspot NMR ett försök att lokalisera läckan i syfte att därefter laga den. När magneten var i uppvärmt tillstånd, gick det inte att observera något läcka. Enligt bedömning från Sweetspot NMR går magneten därför inte längre att använda.

Under hösten 2019 anmäldes formellt skadan på magneten till Kammarkollegiet. Kammarkollegiet anser dock att skadan inträffade i december 2017 och att ärendet därför är preskriberat. Frågan hanteras nu av GU:s affärsjurister.

I december 2019 fick GU ett erbjudande att med kort varsel ta över en 900 MHz magnet från NMR-centrat vid Birminghams universitet. På grund av platsbrist måste den lokal som används för magneten vara utrymd innan Q2 2020, dvs 2020-04-01. Denna magnet är "identisk" med den magnet som GU redan har. Som motprestation skulle GU enbart stå för kostnader för demontering och transport av magneten. GU undersöker nu om det är möjligt att ta emot magneten, givet den snäva tidsramen.

### **800#1.**

Magnetten har fungerat väl under det gångna året. Heliumavkok och kväveavkok är mycket stabilt. Kryoproben genomgick planerlig service i november. Magnetten har under året använts i mycket hög omfattning. Den bokade tiden för detta instrument är 8360 timmar eller 350 dygn, dvs mer än 96%. Av den totalt tillgängliga tiden står strukturbiologi för 82 %, små molekyler 4% och metabolomik 4%. Övrig tid utgörs av undervisning, industrianvändning samt underhåll, service, kalibrering osv.

### **800#2.**

Även denna magnet har fungerat mycket väl under året. Kryoproben genomgick planerlig service i november. Användningen har i princip varit kontinuerlig då planerad service och underhåll inkluderas, 8742 timmar eller 364 dygn. Även här är strukturbiologi det största området med 71% av totalt tid, följt av små molekyler (14%) och materialvetenskap (6%). Övrig tid utgörs av undervisning, industrianvändning samt underhåll, service, kalibrering osv.

### **700 MHz**

Magnetten har fungerat utan problem. Den har använts kontinuerligt under 2019, med planerat avbrott för service av kryoprob i mars. Även här utgör struktur-

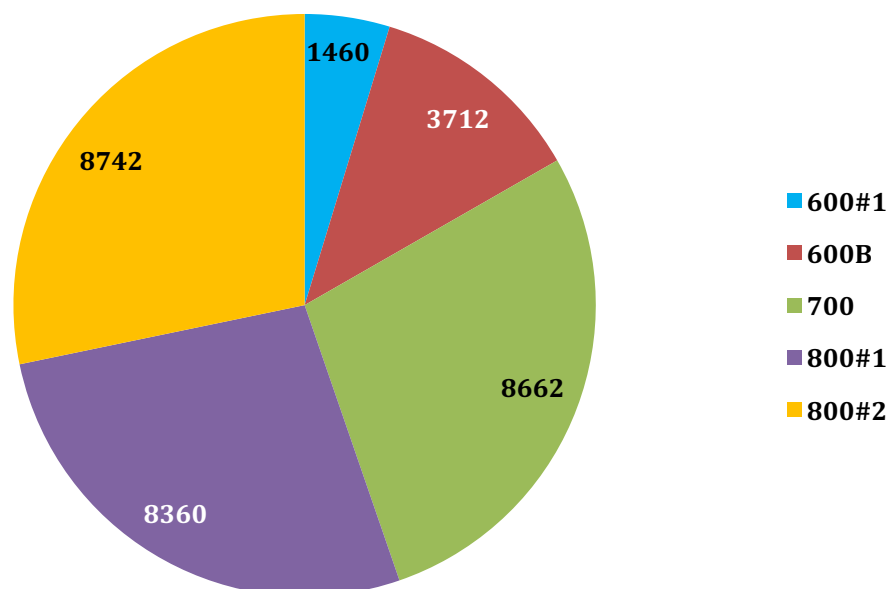
biologi det ojämförligt största tillämpningsområdet med 79%. Intern användning för utveckling av <sup>19</sup>F-baserade tillämpningar står för 10% och materialvetenskap 3%. Övrig tid är undervisning och underhåll, service, kalibrering osv.

### 600MHz - solids

Magneten och konsol fungerar väl, fortfarande 10 år efter senaste uppgradering. Denna magnet är försedd med en 3.2 mm rotor för MAS-tillämpning. Hålltiden för flytande kväve är nu stabil. Nivån sjunker från 100% till 11% under 14 dagar. Magneten har använts i ökande omfattning under 2019 och den totala användningen har mer än fördubblats, från 650 till 1460 timmar, eller 60 dygn (16%).

### 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. Användningen har ökat med ca 1 000 timmar till 3712 timmar (155 dygn) Av den totalt tillgängliga tiden är den huvudsakliga användningen metabolomik (19%) följt av och materialvetenskap (13%).



Figur. 1. Spektrometeranvändning i timmar under 2019.

De två äldsta instrumenten, 500 MHz resp 600 MHz, används i mycket liten omfattning eller inte alls. Både magneterna är dock i mycket gott skick och uppgradering är planerad för 2020. En principöverenskommelse om användande och kostnadsfördelning för uppgradering av 600 MHz-instrumentet har gjorts med Institutionen för Kemi och Molekylärbiologi. Diskussioner pågår med Chalmers om 500 MHz-instrumentet.

### Övrig utrustning

Övrig utrustning, inklusive provväxlare, provberedningsrobot, utrustning i våtlab samt heliumuppsamlingsanläggning har överlag fungerat väl. UPS-enheten för oavbruten strömförsörjning på Hasselbladslab genomgår planerig service och inga störningar har inträffat under året.

### Personresurser per applikationsområden

Under året har 6,25 forskningsingenjörer varit aktiva, fördelat på ca 1,5 FTE inom metabolomik, 1,5 FTE inom strukturbologi och 1,5 FTE för småmolekyl-NMR och materialvetenskap. Resterande tid har använts internt för administration, underhåll, kalibrering och tester samt metod- och kompetensutveckling. De två korttidsanställningar som gjordes, om vardera ett år, har varit mycket värdefulla för att ge avlastning som planerat inom strukturbologi resp metabolomik.

### Projekt inom applikationsområden

Under perioden har aktivitet pågått inom drygt 130 externa projekt (Fig. 2). Det är en ökning gentemot tidigare år, och har bland annat sin grund i att en tydligare projektavgränsning eftersträvs. Av dessa utgör 11 projekt, knappt 10 procent, industrianvändare. Knappt hälften, 62 projekt, rör strukturbologi, 26 projekt är inom metabolomik, 20 inom materialvetenskap, 22 projekt avser småmolekyler och 2 projekt avser kemisk biologi. Internt utvecklingsarbete inkluderar generell metodutveckling samt implementering av nya NMR-experiment, totalt inom ett drygt tiotal projekt. Här kan nämnas implementering av pulssekvenser för  $^{19}\text{F}$  kopplat till utveckling av metodik för cellfri proteininmärkning, men även användning av relaxationsreagens, mikrosampling och blandningstekniker för metabolomik samt metoder och parametrar för benchmarking av spektrometrar och prover.

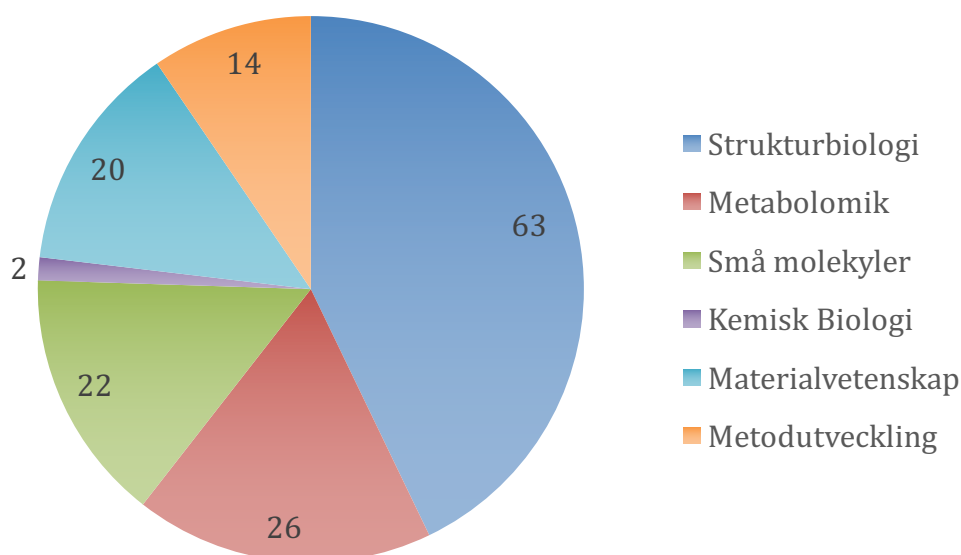


Fig.2. Antal projekt inom de olika applikationsområdena.

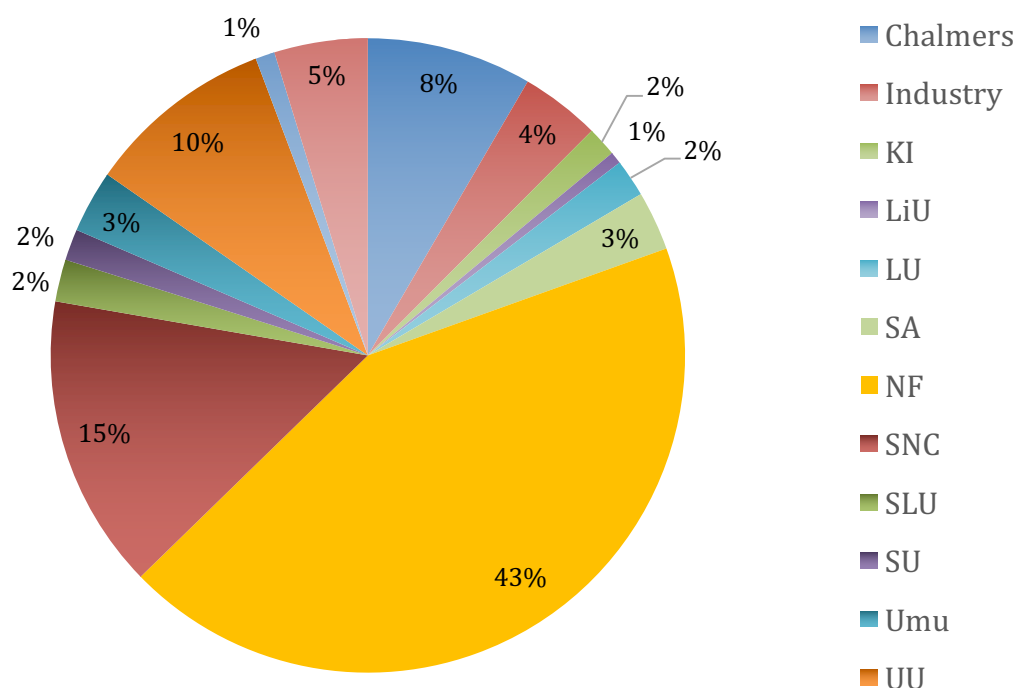


Applikationsområdet **strukturbiologi** har vuxit i omfattning till 63 projekt (47 projekt 2018) och på nivå som varierar från tillgång till experimenttid till analys av NMR-spektra. Användare återfinns vid universiteten, Linköping, Lund, Göteborg, Stockholm, Umeå, Uppsala samt Karolinska Institutet, SLU Chalmers och Kina. Bland de projekt som fått mest stöd under 2019 kan nämnas en studie av signalöverföring i bakteriella fytocytokromer och nusA-analyser, från Göteborgs Universitet.

Inom metabolomik har totalt 26 projekt (23 projekt 2018) fått stöd som inkluderar provberedning, datainsamling och/eller analys. PI kommer från Göteborg, Linköping, Lund, Jönköping, Aarhus, Dublin, Madrid, San Diego, samt Chalmers, Sahlgrenska Universitetssjukhuset och Södra Älvsborgs Sjukhus. Projekten avser mycket ofta NMR-analys av biovätskor, särskilt plasma/serum och urin.

Inom småmolekyler finns användare från Göteborgs Universitet, Chalmers, Lund, Uppsala samt industri (Medivir, IRL, SARomics) Under året har SNC supportat totalt 22 projekt (19 projekt 2018).

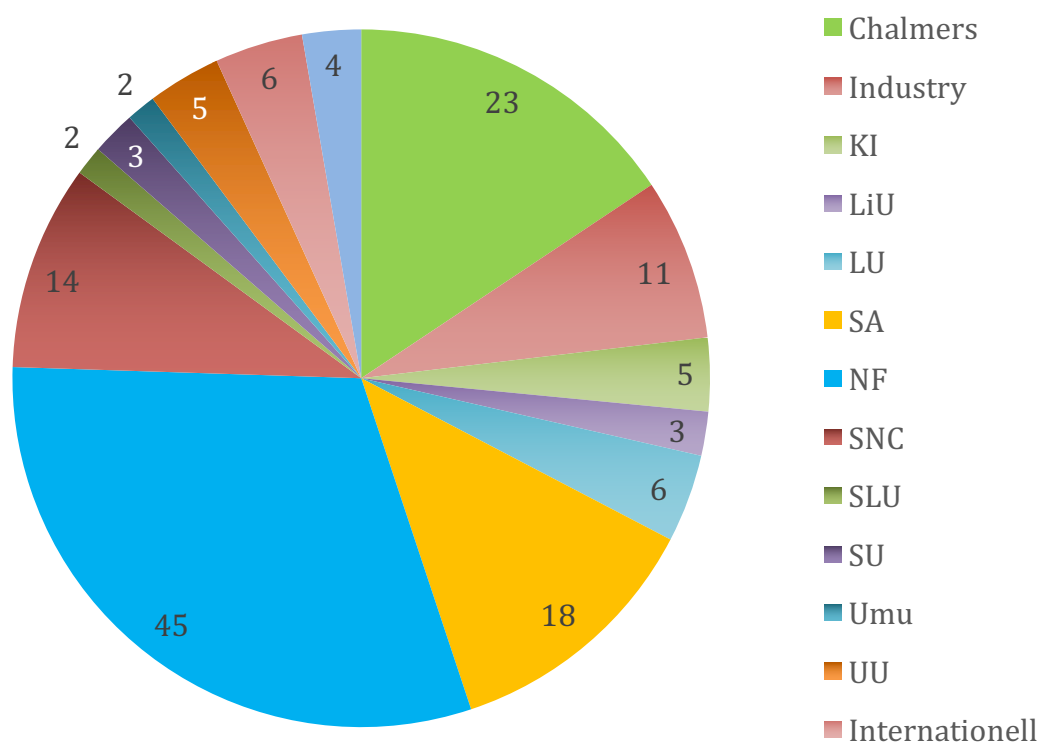
Inom området materialvetenskap/imaging finns aktivitet inom 21 projekt (14 projekt 2018) att redovisa, huvudsakligen med användare från Chalmers och Sahlgrenska. Exempel på projekt inom denna kategori är t ex imagingstudier av biopsier från Sahlgrenska Akademien eller utveckling av metodik för att studera kemiskt modifierad cellulosa, från Chalmers.



**Figur 3.** Fördelning av spektrometertid på universitet. GU (SA+NF) står för 46 % och Göteborg inkl Chalmers 54 %. Övriga svenska universitet står för 28%. Intern användning (SNC) motsvarar 15%.

### Nationell fördelning av användning

Under 2019 använde 72 PIs, (varav 22 kvinnor), 8 företag samt fyra andra icke-akademiska användare Svenskt NMR-centrum. De fick tillgång till NMR-tid och varierande grad av support i drygt 130 projekt. Med utgångspunkt från användarens affiliering ser vi en relativt bred användning i Sverige, även om Göteborgs Universitet är dominerande och står för mer än 50% av den totala användningen när det gäller spektrometertid (Fig. 3). Jämfört med föregående år står Göteborgs Universitet för en ökning. Uppdelat på projekt (Fig 8) så är bilden likartad. Göteborgs Universitet står för ca hälften av projekten.



Figur 4. Fördelning av projekt 2019 på lokal, nationell, internationell, och industri-användning.

### Publikationer

Under 2019 finns 48 publikationer (34 under 2018), som antingen har medförfattare från NMR-centrum eller där NMR-centrum får erkännande i egenskap av forskningsinfrastruktur (se bilaga 1)..

### Outreach och övriga aktiviteter

Ett flertal workshops, kurser och symposier har arrangerats under perioden och NMR-centrum har bl a engagerats i undervisning på avancerad nivå inom masters-kurser för apotekare, kemister och biologer. Svenskt NMR-centrum presenterades vid symposiet för "National Molecular Medicin Fellows" i Marstrand 2 april och en riktad hearing genomfördes i Linköping 8 maj. I oktober arrangerades en internationell workshop med fokus på "Biomolecular NMR - protein dynamics" med ett 20-tal deltagare. I november arrangerades ett symposium med titeln

"Metabolomics in clinical research" med ett knappt 100-tal registrerade deltagare. I november gjorde Umeå-grupperingen ett besök i Göteborg då fortsatt samverkan diskuterades.

Svenskt NMR-centrum och dess verksamhet presenterades också vid ATTD-mötet i Berlin, 18-20 februari, vid ENC i Asilomar 7-12 april, vid "Fingerprinting in Metabolomics by NMR" i Florens 12-13 juni, vid SBnets årliga möte i Tällberg, 14-17 juni, vid EUROISMAR-mötet i Berlin, 25-30 augusti samt vid SciLifeLab Facility Meeting på Djurönäset, 30 september-1 oktober.

### **Upphandling**

I juli ingicks ett avtal med AstraZeneca. Avtalet beskriver ett gemensamt projekt där en 400 MHz DNP-NMR magnet placeras vid Svenskt NMR-centrum. Kostnader och tillgång till det nya systemet fördelas lika mellan parterna under projekttiden, 2020-2029.

Upphandling av heliumförvätskning har (äntligen) slutförts. Systemet installeras i juni 2020.

### **Utvärderingar, organisation och ekonomi**

Svenskt NMR-centrum placerades vid institutionen för KMB den 1/7 2018. Ekonomiadministrativt skedde dock överföring först per 1/1 2019. Den fortsatta processen har varit komplex. RED19-utvärderingen påpekade också för samtliga administrativa nivåer vid Göteborgs Universitet att den organisatoriska placeringen av Svenskt NMR-centrum borde övervägas.

I sitt remissvar till naturvetenskapliga fakulteten skrev Institutionen för Kemi och Molekylär biologi att man höll med om att NMR-centrums organisatoriska placering borde vara under den centrala administrationen inom GU, och att den nuvarande policyn går stick i stäv mot tidigare fattade beslut. Fakultetens svar är att fakulteten kommer att arbeta med universitetsledningen i denna fråga.

### **Ekonomi- utfall för perioden**

Resultaträkning för Svenskt NMR-centrum under 2019 redovisas i tabell 1. Utfallet följer budget relativt väl, med smärre avvikelser. Interna bidrag (medfinansiering för KAW, SciLifeLab, NBIS) förväntades först 2020. Dessa medel förs till pågående projekt och får ingen resultatpåverkan. Lön och drift ligger på 87% resp 77%, dvs avsevärt under budget, vilket förklarar avvikelser mot budget för den totalt omsättningen.

Försäljning utgörs nästan helt av användaravgifter. Användaravgifterna synliggörs på NMR-centrums hemsida och har beräknats efter direkta kostnader för kryogener samt kostnader för service och underhåll. Under 2019 har denna kostnad varit 80 kr/h för instrument med kryoprob. Tillämpningar inom strukturbiologi har betalat 20% av denna kostnad, för att i någon mån harmoniera med jämförbara kostnader vid MaxLAB (ingen kostnad) eller EM-faciliteten inom SciLifeLab (SEK 5 000 per projekt) eller iNEXT (ingen kostnad). I övriga nordiska länder är denna kostnad ca 100 kr/h. Industri användare betalar fyra gånger högre taxa, vilket inkluderar kostnad för lokaler och avskrivningar.

Inom området metabolomik tillämpas en särskild kostnadsmodell som baseras på antal analyserade prov. Under 2019 har denna kostnad varit 200 SEK per prov. Internationellt eftersträvas en provkostnad på €20.

Tabell 1.

<b>Resultaträkning</b>	<b>Budget</b>	<b>Utfall</b>	<b>%</b>
Anslag	5 199	5 199	100%
Försäljning	800	931	116%
Interna bidrag	2 310	4225	183%
Bidrag	4 100	6616	161%
Finansiella intäkter	40	54	135%
Periodisering påg proj	0	-5 179	
Täckn. avs BF anlägg.	2 656	1 509	57%
<b>Intäkter</b>	<b>15 105</b>	<b>13 356</b>	<b>71%</b>
Lönekostnader	6 570	5 712	87%
Förändr. semesterskuld	20	-99	-495%
Övr personalkost	200	190	95%
Övrig Drift	3 454	2 644	77%
Lokalkostnader	1 570	1 705	109%
Indirekta kostnader	0	32	
Avskrivningar	3 119	2 962	95%
<b>Kostnader</b>	<b>15 033</b>	<b>13 146</b>	<b>67%</b>
<b>Totalt</b>	<b>72</b>	<b>210</b>	<b>%</b>

**Artiklar med tack till Svenskt NMR-centrum**

1. Abdurrokhman I, Elamin K, Danyliv O, Hasani M, Swenson J, Martinelli A. Protic Ionic Liquids Based on the Alkyl-Imidazolium Cation: Effect of the Alkyl Chain Length on Structure and Dynamics. *Journal of Physical Chemistry B* 2019, 123:4044-4054, doi:10.1021/acs.jpcc.9b01274.
2. Aliakbari A, Ehsani A, Torshizi RV, Lovendahl P, Esfandyari H, Jensen J, Sarup P. Genetic variance of metabolomic features and their relationship with body weight and body weight gain in Holstein cattle. *Journal of Animal Science* 2019, 97:3832-3844, doi:10.1093/jas/skz228.
3. Burmann BM, Gerez JA, Matecko-Burmann I, Campioni S, Kumari P, Ghosh D, Mazur A, Aspholm EE, Sulskis D, Wawrzyniuk M, et al. Regulation of alpha-synuclein by chaperones in mammalian cells. *Nature* 2019, doi:10.1038/s41586-019-1808-9.
4. Etman AS, Pell AJ, Svedlindh P, Hedin N, Zou XD, Sun JL, Bernin D. Insights into the Exfoliation Process of V2O5 center dot nH(2)O Nanosheet Formation Using Real-Time V-51 NMR. *Acs Omega* 2019, 4:10899-10905, doi:10.1021/acsomega.9b00727.
5. Hasani M, Nordstierna L, Martinelli A. Molecular dynamics involving proton exchange of a protic ionic liquid-water mixture studied by NMR spectroscopy. *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)* 2019, doi:10.1039/c9cp03563j.
6. Hedlund A, Theliander H, Köhnke T. Mass transport during coagulation of cellulose-ionic liquid solutions in different non-solvents. *Cellulose* 2019, doi:10.1007/s10570-019-02649-w.
7. Horvath I, Blockhuys S, Sulskis D, Holgersson S, Kumar R, Burmann BM, Wittung-Stafshede P. Interaction between Copper Chaperone Atox1 and Parkinson's Disease Protein alpha-Synuclein Includes Metal-Binding Sites and Occurs in Living Cells. *ACS Chem Neurosci* 2019, 10:4659-4668, doi:10.1021/acscchemneuro.9b00476.
8. Koning G, Leverin AL, Nair S, Schwendimann L, Ek J, Carlsson Y, Gressens P, Thornton C, Wang X, Mallard C, et al. Magnesium induces preconditioning of the neonatal brain via profound mitochondrial protection. *Journal of Cerebral Blood Flow and Metabolism* 2019, 39:1038-1055, doi:10.1177/0271678X17746132.
9. Lindqvist HM, Gjertsson I, Andersson S, Calder PC, Bärebring L. Influence of blue mussel (*Mytilus edulis*) intake on fatty acid composition in erythrocytes and plasma phospholipids and serum metabolites in women with rheumatoid arthritis. *Prostaglandins, Leukotrienes and Essential Fatty Acids* 2019, 150:7-15, doi:10.1016/j.plefa.2019.08.004.
10. Michel M, Visnes T, Homan EJ, Seashore-Ludlow B, Hedenström M, Wiita E, Vallin K, Paulin CBJ, Zhang J, Wallner O, et al. Computational and Experimental Druggability Assessment of Human DNA Glycosylases. *ACS Omega* 2019, 4:11642-11656, doi:10.1021/acsomega.9b00162.
11. Millard PS, Bugge K, Marabini R, Boomsma W, Burow M, Kragelund BB. IDDomainSpotter: Compositional bias reveals domains in long disordered protein regions-Insights from transcription factors. *Protein Sci* 2019, doi:10.1002/pro.3754.
12. Milton Harris J, Bentley MD, Moreadith RW, Viegas TX, Fang Z, Yoon K, Weimer R, Dizman B, Nordstierna L. Tuning Drug Release From Polyoxazoline-Drug

- Conjugates. *European Polymer Journal* 2019, 120:109241-109241, doi:10.1016/j.eurpolymj.2019.109241.
13. Pihl M, Kolman K, Lotsari A, Ivarsson M, Schüster E, Lorén N, Bordes R. Silica-based diffusion probes for use in FRAP and NMR-diffusometry. *Journal of Dispersion Science and Technology* 2019, 40:555-562, doi:10.1080/01932691.2018.1472015.
  14. Rogne P, Andersson D, Grundström C, Sauer-Eriksson E, Linusson A, Wolf-Watz M. Nucleation of an Activating Conformational Change by a Cation- $\pi$  Interaction. *Biochemistry* 2019, 58:3408-3412, doi:10.1021/acs.biochem.9b00538.
  15. Sar S, Ökvist LS, Sparrman T, Engström F, Samuelsson C. Characterization of double leached waelz oxide for identification of fluoride mineral. *Metals* 2019, 9, doi:10.3390/met9030361.
  16. Tykesson E, Maccarana M, Thorsson H, Liu J, Malmström A, Ellervik U, Westergren-Thorsson G. Recombinant dermatan sulfate is a potent activator of heparin cofactor II-dependent inhibition of thrombin. *Glycobiology* 2019, 29:446-451, doi:10.1093/glycob/cwz019.
  17. Verteramo ML, Stenström O, Ignjatović MM, Caldararu O, Olsson MA, Manzoni F, Leffler H, Oksanen E, Logan DT, Nilsson UJ, et al. Interplay between Conformational Entropy and Solvation Entropy in Protein-Ligand Binding. *Journal of the American Chemical Society* 2019, 141:2012-2026, doi:10.1021/jacs.8b11099.
  18. Wehrli PM, Uzelac I, Olsson T, Jacso T, Tietze D, Gottfries J. Discovery and development of substituted thiadiazoles as inhibitors of Staphylococcus aureus Sortase A. *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 2019, 27:115043-115043, doi:10.1016/j.bmc.2019.115043.
  19. Wiberg C, Carney TJ, Brushett F, Ahlberg E, Wang EG. Dimerization of 9,10-anthraquinone-2,7-Disulfonic acid (AQDS). *Electrochimica Acta* 2019, 317:478-485, doi:10.1016/j.electacta.2019.05.134.
  20. Wiberg C, Owusu F, Wang EG, Ahlberg E. Electrochemical Evaluation of a Naphthalene Diimide Derivative for Potential Application in Aqueous Organic Redox Flow Batteries. *Energy Technology* 2019, 7, doi:UNSP 1900843 10.1002/ente.201900843.
  21. Wu M, Farkas D, Eriksson LA, Strid Å. Proline 411 biases the conformation of the intrinsically disordered plant UVR8 photoreceptor C27 domain altering the functional properties of the peptide. *Scientific Reports* 2019, 9, doi:10.1038/s41598-018-37005-8.
  22. Young NJ, Coley MD, Greenaway AM. Mineralogical investigations of Jamaican hematite-rich and goethite-rich bauxites using XRD and solid state Al-27 and P-31 MAS NMR spectroscopy. *Journal of Geochemical Exploration* 2019, 200:54-76, doi:10.1016/j.gexplo.2019.01.010.
  23. Zhang R, Zhang N, Mohri M, Wu L, Eckert T, Krylov VB, Antosova A, Ponikova S, Bednarikova Z, Markart P, et al. Nanomedical relevance of the intermolecular interaction dynamics - Examples from lysozymes and insulins. *ACS Omega* 2019, 4:4206-4220, doi:10.1021/acsomega.8b02471.

## Artiklar med författare från Svenskt NMR-centrum

24. Agback, P., F. Dominguez, Y. Pustovalova, T. Lukash, N. Shiliaev, V.Y. Orekhov, I. Frolov, T. Agback, and E.I. Frolova, *Structural characterization and biological function of bivalent binding of CD2AP to intrinsically disordered domain of chikungunya virus nsP3 protein*. *Virology*, 2019. **537**: p. 130-142.
25. Andersen, T.C.B., P.E. Kristiansen, Z. Huszenicza, M.U. Johansson, R.P. Gopalakrishnan, H. Kjelstrup, S. Boyken, V. Sundvold-Gjerstad, S. Granum, M. Sørli, P.H. Backe, D.B. Fulton, B.G. Karlsson, A.H. Andreotti, and A. Spurkland, *The SH3 domains of the protein kinases ITK and LCK compete for adjacent sites on T cell-specific adapter protein*. *Journal of Biological Chemistry*, 2019: p. jbc.RA119.008318-jbc.RA119.008318.
26. Bernin, D., M. Marucci, C. Boissier, J. Hjærtstam, U. Olsson, and S. Abrahmsén-Alami, *Real time MRI to elucidate the functionality of coating films intended for modified release*. *Journal of Controlled Release*, 2019. **311-312**: p. 117-124.
27. Ciudad, S., E. Puig, T. Botzanowski, M. Meigooni, A.S. Arango, J. Do, M. Mayzel, M. Bayoumi, S. Chaignepain, G. Maglia, S. Cianferani, V. Orekhov, E. Tajkhorshid, B. Bardiaux, and N. Carulla, *A $\beta$ (1-42) tetramer and octamer structures reveal edge pores as a mechanism for membrane damage*. *bioRxiv*, 2019: p. 759472.
28. Danelius, E., R.G. Ohm, Ahsanullah, M. Mulumba, H. Ong, S. Chemtob, M. Erdelyi, and W.D. Lubell, *Dynamic Chirality in the Mechanism of Action of Allosteric CD36 Modulators of Macrophage-Driven Inflammation*. *J Med Chem*, 2019.
29. Dickman, R., E. Danelius, S.A. Mitchell, D.F. Hansen, M. Erdelyi, and A.B. Tabor, *A Chemical Biology Approach to Understanding Molecular Recognition of Lipid II by Nisin(1-12): Synthesis and NMR Ensemble Analysis of Nisin(1-12) and Analogues*. *Chemistry*, 2019. **25(64)**: p. 14572-14582.
30. Etman, A.S., A.J. Pell, P. Svedlindh, N. Hedin, X. Zou, J. Sun, and D. Bernin, *Insights into the Exfoliation Process of V2O5·nH2O Nanosheet Formation Using Real-Time 51V NMR*. *ACS Omega*, 2019. **4(6)**: p. 10899-10905.
31. Gołowicz, D., P. Kasprzak, V. Orekhov, and K. Kazmierczuk, *Fast time-resolved NMR with non-uniform sampling*. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, 2019.
32. Gunnarsson, M., M. Hasani, and D. Bernin, *Influence of urea on methyl  $\beta$ -glucopyranoside in alkali at different temperatures*. Manuscript submitted for publication, 2019.
32. Gunnarsson, M., M. Hasani, and D. Bernin, *The potential of magnetisation transfer NMR to monitor the dissolution process of cellulose in cold alkali*. *Cellulose*, 2019.
34. Gustavsson, E., L. Isaksson, C. Persson, M. Mayzel, U. Brath, L. Vrhovac, J.A. Ihalainen, B.G. Karlsson, V. Orekhov, and S. Westenhoff, *Modulation of Structural Heterogeneity Controls Phytochrome Photoswitching*. *Biophysical Journal*, 2019.
35. Hedin, N., P. Rzepka, A.B. Jasso-Salcedo, T.L. Church, and D. Bernin, *Intracrystalline Transport Barriers Affecting the Self-Diffusion of CH<sub>4</sub> in Zeolites [Na<sub>12</sub>]-A and [Na<sub>12-x</sub>K<sub>x</sub>]-A*. *Langmuir*, 2019. **21**.
36. Klein, C.F., S.L.K. Holle, M.H. Andersen, A. Pedersen, H. Bundgaard, K.K. Iversen, and A. Malmendal, *In-hospital metabolite changes in infective endocarditis—a*

- longitudinal <sup>1</sup>H NMR-based study*. European Journal of Clinical Microbiology and Infectious Diseases, 2019. **38**(8).
37. Kubatova, N., D.J. Pyper, H.R.A. Jonker, K. Saxena, L. Remmel, C. Richter, S. Brantl, E. Evgenieva-Hackenberg, W. Hess, G. Klug, A. Marchfelder, J. Soppa, W. Streit, M. Mayzel, V.Y. Orekhov, M. Fuxreiter, R. Schmitz-Streit, and H. Schwalbe, *Rapid biophysical characterization and NMR structural analysis of small proteins from bacteria and archaea*. Chembiochem, 2019.
  38. Lindqvist, H.M., M. Rådjursöga, D. Malmodin, A. Winkvist, and L. Ellegård, *Serum metabolite profiles of habitual diet: evaluation by <sup>1</sup>H-nuclear magnetic resonance analysis*. American Journal of Clinical Nutrition, 2019. **110**(1): p. 53-62.
  39. Malmberg, P., J.G. Norén, and D. Bernin, *Molecular insights into hypomineralized enamel*. European Journal of Oral Sciences, 2019. **127**(4): p. 340-346.
  40. Malmodin, D., A. Pedersen, B.G. Karlsson, and G. Forsander, *NMR Spectroscopic Analysis to Evaluate the Quality of Insulin: Concentration, Variability, and Excipient Content*. J Diabetes Sci Technol, 2019: p. 1932296819831995.
  41. Qu, X., Y. Huang, H. Lu, T. Qiu, D. Guo, T. Agback, V. Orekhov, and Z. Chen, *Accelerated Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy with Deep Learning*. Angew Chem Int Ed Engl, 2019.
  42. Rådjursöga, M., H.M. Lindqvist, A. Pedersen, G.B. Karlsson, D. Malmodin, C. Brunius, L. Ellegård, and A. Winkvist, *The <sup>1</sup>H NMR serum metabolomics response to a two meal challenge: A cross-over dietary intervention study in healthy human volunteers*. Nutrition Journal, 2019. **18**(1).
  43. Sparrman, T., L. Svenningsson, K. Sahlin-Sjövold, L. Nordstierna, G. Westman, and D. Bernin, *A revised solid-state NMR method to assess the crystallinity of cellulose*. Cellulose, 2019.
  44. Svenningsson, L., T. Sparrman, E. Bialik, D. Bernin, and L. Nordstierna, *Molecular orientation distribution of regenerated cellulose fibers investigated with rotor synchronized solid state NMR spectroscopy*. Cellulose, 2019. **26**(8): p. 4681-4692.
  45. Wernersson, S., V. Bågenholm, C. Persson, S.K. Upadhyay, H. Stålbrand, and M. Akke, *Backbone <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, and <sup>15</sup>N resonance assignments of BoMan26A, a  $\beta$ -mannanase of the glycoside hydrolase family 26 from the human gut bacterium *Bacteroides ovatus**. Biomolecular NMR Assignments, 2019.
  46. Woo, J., D. Bernin, H. Ahari, M. Shost, M. Zammit, and L. Olsson, *Understanding the mechanism of low temperature deactivation of Cu/SAPO-34 exposed to various amounts of water vapor in the NH<sub>3</sub>-SCR reaction*. Catalysis Science and Technology, 2019. **9**(14): p. 3623-3636.
  47. Xie, K., J. Woo, D. Bernin, A. Kumar, K. Kamasamudram, and L. Olsson, *Insights into hydrothermal aging of phosphorus-poisoned Cu-SSZ-13 for NH<sub>3</sub>-SCR*. Applied Catalysis B: Environmental, 2019. **241**: p. 205-216.
  48. Zhao, D., A. Martinelli, A. Willfahrt, T. Fischer, D. Bernin, Z.U. Khan, M. Shahi, J. Brill, M.P. Jonsson, S. Fabiano, and X. Crispin,