

# Svenskt NMR-centrum vid Göteborgs universitet

## Verksamhetsrapport 2020

DATUM:

2021-02-26



Göran Karlsson  
Föreståndare



## Sammanfattning

Användning av NMR-magneterna har varit god, trots Corona-pandemin. Under 2020 har Svenskt NMR-centrum gett stöd till 123 externa projekt och 60 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 30 200 timmar.

Under året har tre stora installationer genomförts; ett 400 MHz system för DNP-NMR, en 900 MHz-magnet som och ett system för heliumförvätskning. Utåtriktade aktiviteter har minskat kraftigt under 2020. Svenskt NMR-centrum har organiserat en internationell workshop.

Internt utvecklingsarbete har bl a varit fokuserat på metodik för undertryckning av multipla lösningsmedelssignaler och relaxationsmetodik. Ett projekt med stöd från SciLifeLab har genomförts i avsikt att hitta molekyelfragment som kan användas för att utveckla ett läkemedel mot Covid-19

De vetenskapliga resultaten presenteras i 26 artiklar i internationella tidskrifter. Omsättningen var 16 425 kkr och gav ett resultat på -244 kkr.

## Summary

The use of NMR magnets has been good, despite the Corona pandemic. In 2020, the Swedish NMR Center provided support to 123 external projects and 60 researchers (PIs) from the University of Gothenburg as well as other national and international universities, from regions, industry or other non-academic organizations. Users have received support as needed, and within the application areas that the research infrastructure offers. The NMR equipment has been used for 30,200 hours.

During the year, three large installations were carried out; a 400 MHz system for DNP-NMR, a 900 MHz magnet and a system for helium liquefaction. Outreach activities have decreased sharply during 2020. The Swedish NMR Center has organized one international workshop.

Internal development work has, among other things, focused on methodology for suppression of multiple solvent signals and relaxation methodology. A project with support from SciLifeLab has been carried out with the intention of finding molecular fragments that can be used to develop a drug against Covid-19

The scientific results are presented in 26 articles in international journals. The financial turnover was 16 425 000 SEK and gave a result of SEK -244 000 SEK.



## **Innehållsförteckning:**

Sammanfattning	3
Summary	3
Innehållsförteckning	5
NMR-magneters användning	6
Installationer	7
Övrig utrustning	8
Personal	9
Projekt inom applikationsområden	8
Nationell fördelning av användare	10
Publikationer och out-reach	12
Ekonomi - utfall för 2020	12
Bilagor	
1. Publikationslista för 2020	14

## **NMR-magneters användning**

Användningen av NMR-utrustningen är generellt god. Den sammanlagda totala användningen på alla magneter är 30 230 timmar, vilket är nästan identiskt med föregående år. Det avspeglar en exceptionell beläggning på högfältsinstrument och en god användning av specialiserade 600 MHz-magneter. Installation av det nya systemet för NMP-NMR och 900 MHz-magneten slutfördes under senhöst och dessa magneter bidrar i liten eller ringa omfattning.

### **800#1.**

Magneten har fungerat väl under det gångna året. Heliumavkok och kväveavkok är mycket stabilt. Magneten har under året använts i mycket hög omfattning. Den bokade tiden för detta instrument är **8709** timmar (99%) dvs den har använts kontinuerligt. Av den totalt tillgängliga tiden står strukturbiologi för 72 %, små molekyler 4% och metabolomik 4% samt kemisk biologi 6%. Service och underhåll utgör 10%. Övrig tid utgörs bl a undervisning (2%).

### **800#2.**

Även denna magnet har fungerat mycket väl under året, totalt 8344 timmar (95%) avspeglar en mycket hög användning, med fokus på strukturbiologi (55%), små molekyler (18%) och kemisk biologi (4%). Service och underhåll står för 13%.

### **700 MHz**

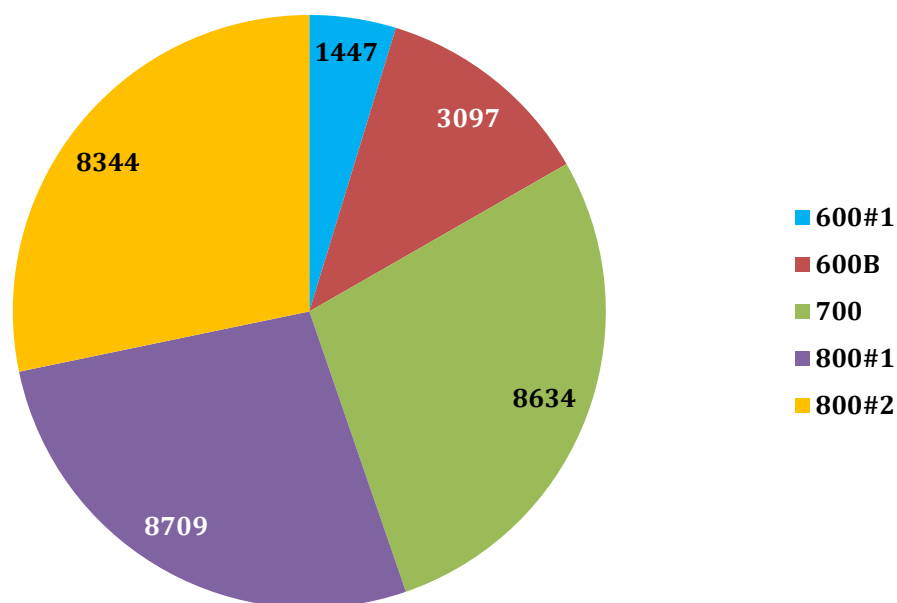
Magneten har fungerat utan problem. Den har använts kontinuerligt under 202 (8634 h, 98%), med planerat avbrott för service av kryoprob i maj. Även här utgör strukturbiologi det ojämförligt största tillämpningsområdet med 54%. Kemisk biologi (12%), metodutveckling (9%), små molekyler (5%) och materialvetenskap (5%). Service och underhåll (13%) står för resterande användning.

### **600MHz - solids**

Magneten och konsol fungerar huvudsakligen väl, mer än 10 år efter senaste uppgradering. Denna magnet är försedd med en 3.2 mm rotor för MAS-tillämpning. Under hösten behövde prob och förstärkare repareras. Magneten har använts i 1134 h (13%), vilket är något mindre än 2019 (1460 h).

### **600MHz - diff, MR, IVDr**

Magneten har fungerat väl. Växling mellan applikationer kräver inte enbart byte av prob, utan även operativsystem, eftersom metabolomik enbart körs under windows, och diffusion under linux). Under 2020 har användningen varit 3097 h (35%) vilket är en minskning med 600 h jämfört med 2019. Användningen är huvudsakligen materialvetenskap (14%) följt av och metabolomik (7%) och metodutveckling av parallell undertryckning av signaler från multipla lösningsmedel (7%)



Figur. 1. Spektrometeranvändning i timmar under 2020.

### 600 & 500 MHz

De två äldsta instrumenten, 500 MHz resp 600 MHz, har inte använts aktivt under 2020. omfattning eller inte alls. Arbetet med att uppgradera magneterna har fått avvakta återinstallationen av 900 MHz-magneterna.

### Nya installationer under 2020

Under 2020 genomfördes omfattande installationer. Tre nya utrustningar installerades och parallellt genomfördes förändringar i försörjningssystemet (kyla, el, kväve). Corona-pandemin medförde också att den planerade tidsmässiga separationen reviderades vilket fick till följd att samtliga installationer påbörjades i augusti, inom en tidsrymd av två veckor.

### 900 MHz-magneterna

I januari, med hjälp av upphandlingsenheten, beskrevs hur ansvaret mellan Göteborgs Universitet och University of Birmingham (UoB) skulle fördelas vid övertagandet av 900 MHz-magneterna. Processen skedde under viss tidspress då UoB hade ett bindande avtal med tredje part om utrymning och tillgängliggörande av lokaler. Arbetet komplicerades av att den parallella upphandlingen av tjänsten att ladda ned och demontera UoB-magneterna behövde vara färdigställd.

De nödvändiga avtalen signerades med knapp marginal, full köpeskilling för magneterna erlades (1 £) och arbetet med nedladdning och demontering av magneterna i Birmingham påbörjades i mars 2020. Transport till Göteborg och återinstallation planerades initialt till april 2020, men på grund av Corona-pandemin fick detta arbete senareläggas till augusti 2020.

Corona-pandemin försvårade logistik, men specialtransporten med magneten skeppades från England och anlände till svenskt NMR-centrum den 13 augusti. Akademiska hus hade förberett demontering av en yttervägg och förstärkning av golvet i tre våningsplan, magneten lyftes in i byggnaden den 13 augusti, och arbetet med att återmontera magneten tog vid. Den gamla magneten lyftes ut ur byggnaden en vecka senare, och i nuläget undersöks möjligheten att låta den utgöra en konstnärlig installation utanför Hasselbladlaboratoriet.

Corona-pandemin medförde god tillgång på helium, och installationsarbetet fortsatte oavbrutet från augusti till november. Första försöket att ta magneten till fullt fält, den 16:e oktober, inducerade en spontan quench vid 820 MHz. Ett andra försök gjordes relativt omgående och den fjärde november nådde magneten slutligen fält.

Kryoshimningen gjordes tillsammans med personal från Bruker, som också hjälpte till att installera kryoproben. I skrivande stund är drift < 1.5 Hz/h och lineshape på 3mm cryoprob är 0.8/5/10). Den totala kostnaden för återinstallation blev 4.9 MKr för arbete och 2.3 MKr för helium.

#### **400 MHz DNP-NMR – Samarbete GU-AstraZeneca**

I augusti påbörjades installationen av det nya systemet för DNP-NMR. Arbetet gick i stort enligt plan och i slutet av september kördes de första experimenten. Systemet har krångla lite under hösten, en förstärkare har behövt bytas ut och två andra förstärkare har omprogrammerats. För att få kontinuerlig tillgång till flytande kväve planeras en lösning som implementerats i NMR-laboratoriet i Lyon. Processen, med AGA-Linde och AirLiquide som leverantörer, är pågående. I nuläget är systemet helt funktionellt och körs under dagtid. Användning hittills har varit 200 h. En internutbildning av personalen har ägt rum, men den mer avancerade kurs som leverantören ska tillhandahålla har måst skjutas på framtiden.

#### **Heliumförvätskare**

Leverans av heliumförvätskaren försenades på grund av Corona-pandemin. Installationen påbörjades i slutet av augusti och förvätskaren och dess gasrenare anslöts till försörjningssystemen för elektricitet, vattenkylning och gasuppsamling. Efter inkörning och optimering har systemet tagits i bruk. Viss handhavandeträning återstår innan systemet till fullo kan utnyttjas. Under perioden oktober-januari (3 mån) har 1300L flytande helium producerats lokalt, vilket innebär en besparing motsvarande 200 kkr. Systemet är dock inte dimensionerat för det heliumavkok som 900 MHz-magneterna genererar. För att klara detta behöver ytterligare ett *cold-head* installeras.

#### **Övrig utrustning**

Övrig utrustning, inklusive provväxlare, provberedningsrobot samt utrustning i våtlab har fungerat väl. Den stora gaskompressorn i heliumuppsamlingsanläggning har genomgått omfattande reparation och service. UPS-enheten för oavbruten strömförsörjning på Hasselbladslab genomgår planerlig service och inga störningar har inträffat under året. Det interna kylsystemet kopplat till kryoprobernas kompressorer, DNP-systemets gyrotron och heliumförvätskaren, har uppgraderats till en total kylkapacitet på 50 kW. Även pumpstationerna i kylsystemet har uppgraderats. Den genererade värmen tas till vara av Akademiska hus och används i fjärrvärmesystemet.



## Personal

En anställning som förste forskningsingenjör med kompetens inom DNP-NMR annonserades i januari. Efter intervjuer med flera kompetenta kandidater erbjöds Arthur C. Pinon anställningen. Pinon tillträdde anställningen i augusti och deltog vid installationen av det nya DNP-systemet.

### Personresurser per applikationsområden

Under året har 6,5 forskningsingenjörer varit aktiva, fördelat på ca 1,5 FTE inom metabolomik, 2 FTE inom strukturbologi och 1,5 FTE för småmolekyl-NMR och materialvetenskap, inkl DNP-NMR. Resterande tid har använts internt för administration, underhåll, service, kalibrering och tester samt metod- och kompetensutveckling.

## Områden och användare

### Projekt inom applikationsområden

Under perioden har aktivitet pågått inom 124 externa projekt (Fig. 2) och 10 interna projekt för metod- och kompetensutveckling. Detta är i nivå med föregående år. Av projekten är 55 projekt inom strukturbologi, 28 projekt är metabolomik, 24 projekt är små molekyler, och 15 projekt materialvetenskap. Ett projekt (1%) avser kemisk biologi. Variationerna inom resp kategori är små jämfört med tidigare år. .

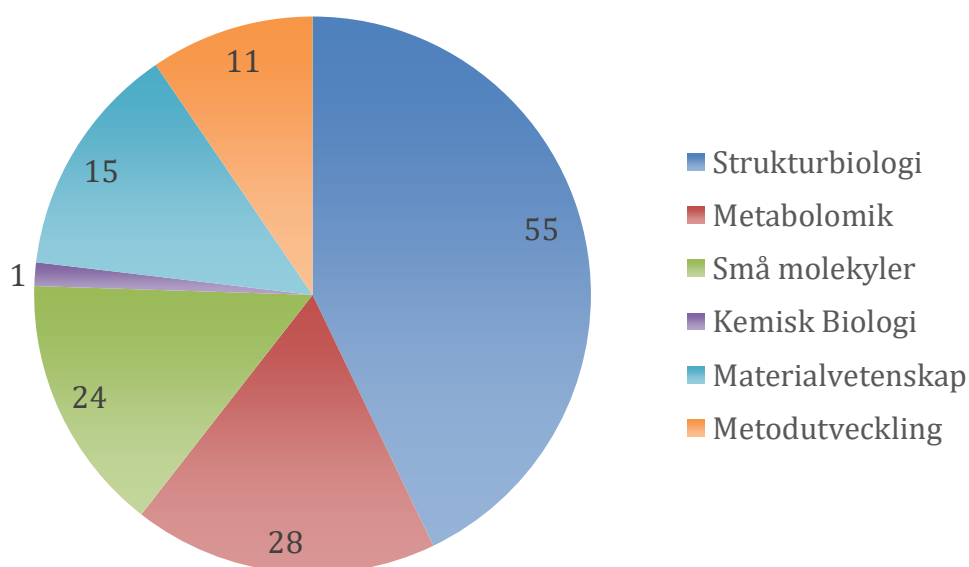


Fig.2. Antal projekt inom de olika applikationsområdena.

Applikationsområdet **strukturbologi** omfattar 55 projekt (63 projekt 2019) och på nivå som varierar från tillgång till experimenttid till analys av NMR-spektra. Användare har god geografisk spridning.

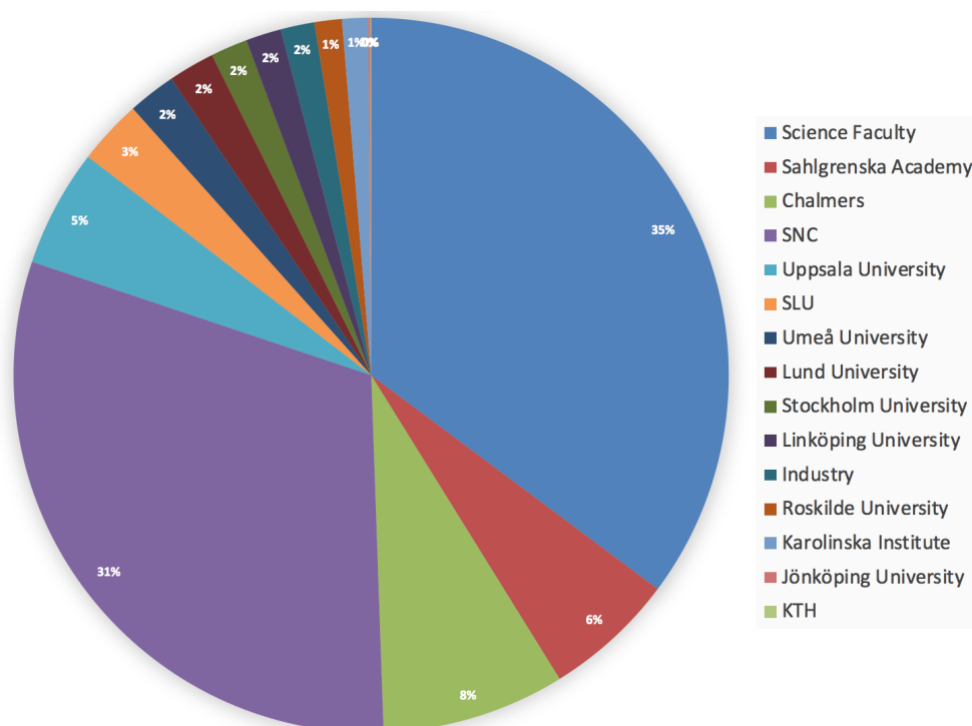
Inom metabolomik har totalt 28 projekt (26 projekt 2019) fått stöd som inkluderar provberedning, datainsamling och/eller analys. PI kommer från Göteborg, Linköping,

Jönköping, Karolinska Institutet, Uppsala Universitet, Aarhus, Dublin, Madrid, San Diego, samt 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, Stockholm, Uppsala samt industri (Nouryon, IRL). Under året har SNC gett stöd åt totalt 17 projekt (22 projekt 2019).

Inom området materialvetenskap/imaging finns aktivitet inom 15 projekt (21 projekt 2019) 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.

Inom området kemisk biologi har NMR-centrum utfört ett projekt med finansiering från SciLifeLab. Projektet ”FragCor” har som mål att screena molekyelfragment för att hitta bindare till aktiva ytan av ett proteas, Mpro, som är nödvändigt för Coronavirusets replikation. Projektet utfördes tillsammans med Umeå-noden och forskargrupper från Frankfurt, Amsterdam, Zurich och NIH, samt CBCS- och DDD-faciliteterna inom SciLifeLab. Proteaset producerades av *Protein Production Network Sweden* och molekyelfragment från tre kommersiella bibliotek, Maybridge, BioNet resp SPECS, tillhandahölls av CBCS. Den fragmentbaserade screenen genomfördes av forskningsingenjörer vid svenskt NMR-centrum i Göteborg och Umeå. Den totala screenen omfattar knappt 7000 molekyelfragment och läkemedelsliknande substanser. Hittills har 11 fragment selekterats för fortsatta studier.

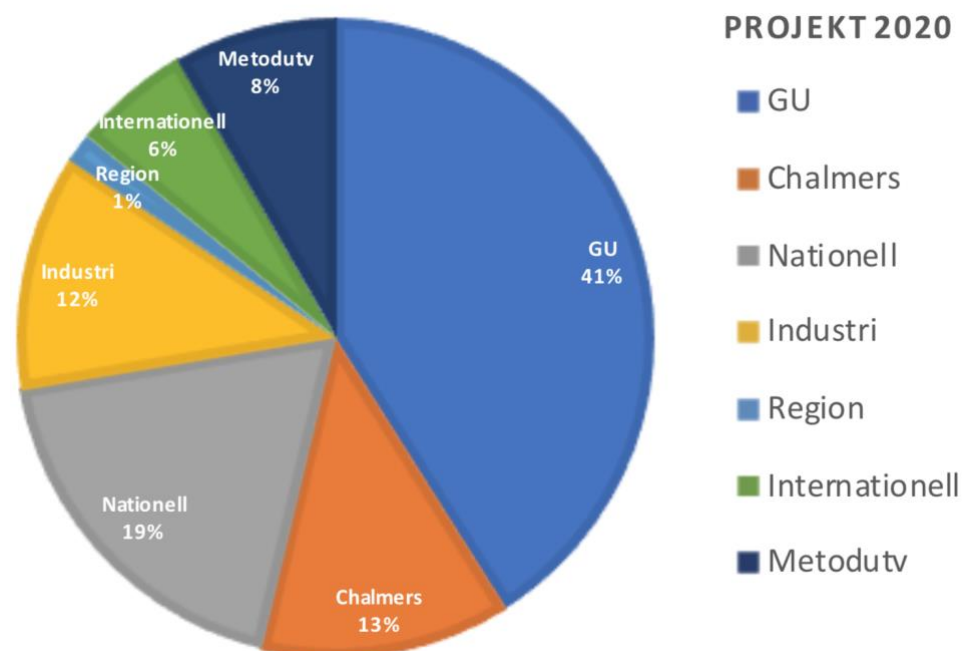


**Figur 3.** Fördelning av spektrometertid på universitet. GU (SA+NF) står för 41 % och Göteborg inkl Chalmers 49 %. Övriga svenska universitet står för 17%. Användning inom SNC (30%) fördelas på Covid-19 (7%), metod- och kompetensutveckling (10%) och service och underhåll (13).

## Nationell fördelning av användning

Användarna kommer från samtliga svenska stora universitet, dvs GU (Sahlgrenska akademien och naturvetenskapliga fakulteten), Lunds universitet, Chalmers, Jönköping, Linköping, Karolinska Institutet, KTH, Stockholms universitet, Uppsala universitet, SLU och Umeå universitet. Därutöver finns användare från VGR (Sahlgrenska Universitetssjukhuset och Södra Älvsborg Sjukhus), samt Aarhus, Roskilde, UCD Dublin Madrid, och San Diego. Bland industrianvändare och statliga institut återfinns AstraZeneca, RISE, Nouryon, Saromics och IRL.

Under 2020 använde 60 PIs, (varav 28 kvinnor), åtta företag, ett statligt institut och en region verksamheten vid svenskt NMR-centrum. De fick tillgång till NMR-tid och varierande grad av support inom 124 projekt. Med utgångspunkt från användarens affiliering ser vi en relativt bred användning i Sverige, även om Göteborg är dominerande och står för mer än 50% av den totala användningen när det gäller spektrometertid (Fig. 3). Uppdelat på projekt (Fig 4) är bilden likartad. Göteborgs Universitet står för ca hälften av projekten.



Figur 4. Fördelning av projekt 2020 på lokal, nationell, internationell, och industri-användning. GU står för 55 projekt (NatFak 41 resp SA 14), Chalmers 17 projekt, övriga nationella universitet 25, industri 16, regioner 2 och internationella akademiska användare 8 projekt. Intern metod- och kompetensutveckling står för 11 projekt, bl a multi-solvent suppression och utveckling och implementering av relaxationsmetodik.

## Publikationer och out-reach

### Publikationer

Under 2020 finns 26 publikationer (48 under 2019), som antingen har medförfattare från NMR-centrum eller där NMR-centrum får erkännande i egenskap av forskningsinfrastruktur (se bilaga 1).

## **Outreach och övriga aktiviteter**

Corona-pandemin har effektivt satt stopp för nästan all utåtriktad verksamhet under 2020. Den 19 mars gick den avancerad kursen för apotekare (KEM840) abrupt från salsundervisning till distansundervisning. Den planerade internationella workshopen i oktober omvandlades till en zoom-workshop vid vilken ett 20-tal doktorander och post-docs deltog. Workshopen hade föreläsare bl a från USA:s östkust vilket ställde utmanande logistiska krav på tidsplanering. NMR-centrum har deltagit i Covid-19-relaterade diskussioner inom SciLifeLab och inom Covid-19-NMR, organiserat av Harald Schwalbe, Frankfurt.

## **Ekonomi och resultat**

### **Extern finansiering av forskningsinfrastrukturen:**

Faciliteter inom **SciLifeLab** fick 2019 i uppdrag att beskriva pågående verksamhet samt hur man avsåg att utvecklas under perioden 2021-2024. Svenskt NMR-centrum fick i uppdrag att beskriva hur man avsåg att utveckla en plattform för integrerad strukturbologi (ISB), som inkluderade verksamhet vid infrastrukturerna CryoEM, MAX IV och ESS. I spåren av Corona-pandemin så genomfördes den internationella utvärderingen digitalt, via zoom. Både den internationella expertpanelen och de svenska universiteten ansåg att ISB-plattformen skulle stödjas. Från 2021 är SNC en del av denna plattform. Det formella styrelsebeslutet fattas i februari 2021.

Svenskt NMR-centrum var medsökande i två **EU H2020**-ansökningar, INFLECT med fokus på metabolomik, samt PANACEA, med fokus på DNP-tillämpningar. PANACEA fick stöd från EU, men Corona-pandemin har gjort att startdatum skjuts till Maj 2021.

### **Ekonomi- utfall för perioden**

Resultaträkning för Svenskt NMR-centrum under 2020 redovisas i tabell 1. Resultatet är enligt budget. Anslag och försäljning (11 månader) samt interna bidrag stämmer väl med budget. Bidrag (inkl periodisering pågående projekt) ligger högt, dessa medel har till stor del använts för att finansiera omstart av 900 MHz-magneterna. Planerad avskrivning är också nära budget.

På utgiftssidan ligger lön enligt budget, övriga personalkostnader avspeglar att resande helt upphört Corona-pandemins. Driftskostnaderna är avsevärt högre än budget, främst beroende på kostnader som uppstod i samband med installationen av 900 MHz-magneterna. Avskrivningar och lokalkostnader är också mycket nära budget.

Försäljning utgörs helt av användaravgifter. Användaravgifterna synliggörs på NMR-centrums hemsida och har beräknats efter direkta kostnader för kryogener samt kostnader för service och underhåll. Under 2020 har denna kostnad varit 80 kr/h för instrument med kryoprob. Tillämpningar inom strukturbologi har betalat 20% av denna kostnad, för att i någon mån harmonisera 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. Industrianvändare 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 2020 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	658	82%	
Interna bidrag	3 250	3 237	100%	
Bidrag	4 552	2 446	130%*	Inkl per pp
Finansiella intäkter	40	102	%	
Periodisering påg proj	0	3 556		
Täckn. avs BF anlägg.	898	983	109%	
<b>Intäkter</b>	<b>12 571</b>	<b>16 181</b>	<b>129%</b>	
Lönekostnader	5 613	5 688	101%	
Förändr. semesterskuld	20	-54	-270%	
Övr personalkost	250	16	6%	
Övrig Drift	2 551	6 541	256%	+3.99 MKr
Lokalkostnader	1 787	1 619	90%	
Ind.kost.	0	103		
Avskrivningar	2 707	2 943	109%	
<b>Kostnader</b>	<b>12 815</b>	<b>16 425</b>	<b>128%</b>	
<b>Totalt</b>	<b>-244</b>	<b>-244</b>	<b>100%</b>	

## Publikationer 2020

### Artiklar med tack till Svenskt NMR-centrum

1. Zhou S, Pettersson P, Huang J, Brzezinski P, Pomès R, Mäler L, Ädelroth P. NMR Structure and Dynamics Studies of Yeast Respiratory Supercomplex Factor 2. *Structure* 2020, [doi.org/10.1016/j.str.2020.08.008](https://doi.org/10.1016/j.str.2020.08.008).
2. Woo J, Bernin D, Ahari H, Shost M, Zammit M, Olsson L. Regeneration of water-deactivated Cu/SAPO-34(MO) with acids. *Catalysis Science & Technology* 2020, 10:1539-1550, [doi.org/10.1039/C9CY02031D](https://doi.org/10.1039/C9CY02031D).
3. Wang A, Xie K, Bernin D, Kumar A, Kamasamudram K, Olsson L. Deactivation mechanism of Cu active sites in Cu/SSZ-13 — Phosphorus poisoning and the effect of hydrothermal aging. *Applied Catalysis B: Environmental* 2020, 269:118781, [doi.org/10.1016/j.apcatb.2020.118781](https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2020.118781).
4. Thoma J, Burmann BM. High-resolution in-situ NMR spectroscopy of bacterial envelope proteins in outer membrane vesicles. *Biochemistry* 2020, [doi.org/10.1021/acs.biochem.9b01123](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.9b01123).
5. Svenningsson L, Bengtsson J, Jedvert K, Schlemmer W, Theliander H, Evenäs L. Disassociated molecular orientation distributions of a composite cellulose-lignin carbon fiber precursor A study by rotor synchronized NMR spectroscopy and X-ray scattering. *Carbohydrate Polymers* 2020:117293, [doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.117293](https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.117293).
6. Šulskis D, Thoma J, Burmann BM. Structural basis of DegP-protease temperature-dependent activation. *bioRxiv*2020:2020.2007.2014.202507, [doi:10.1101/2020.07.14.202507](https://doi.org/10.1101/2020.07.14.202507)
7. Sanchez-Fernandez A, Diehl C, Houston JE, Leung AE, Tellam JP, Rogers SE, Prevost S, Ulvenlund S, Sjögren H, Wahlgren M. An integrative toolbox to unlock the structure and dynamics of protein–surfactant complexes. *Nanoscale Advances* 2020, [doi:10.1039/D0NA00194E](https://doi.org/10.1039/D0NA00194E).
8. Rogne P, Dulko-Smith B, Goodman J, Rosselin M, Grundstrom C, Hedberg C, Nam K, Sauer-Eriksson AE, Wolf-Watz M. Structural basis for GTP versus ATP selectivity in the NMP kinase AK3. *Biochemistry* 2020, [doi:10.1021/acs.biochem.0c00549](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.0c00549).
9. Mohotti S, Rajendran S, Muhammad T, Stromstedt AA, Adhikari A, Burman R, de Silva ED, Goransson U, Hettiarachchi CM, Gunasekera S. Screening for bioactive secondary metabolites in Sri Lankan medicinal plants by microfractionation and targeted isolation of antimicrobial flavonoids from *Derris scandens*. *J Ethnopharmacol* 2020, 246:112158, [doi.org/10.1016/j.jep.2019.112158](https://doi.org/10.1016/j.jep.2019.112158).
10. 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* 2020, 29:169-183, [doi.org/10.1002/pro.3754](https://doi.org/10.1002/pro.3754).
11. Matecko-Burmann I, Burmann BM. Recording In-Cell NMR-Spectra in Living Mammalian Cells. *Methods Mol Biol* 2020, 2141:857-871, [doi:10.1007/978-1-0716-0524-0\\_44](https://doi.org/10.1007/978-1-0716-0524-0_44).

12. Magnani C, Idström A, Nordstierna L, Müller AJ, Dubois P, Raquez J-M, Lo Re G. Interphase Design of Cellulose Nanocrystals/Poly(hydroxybutyrate-ran-valerate) Bionanocomposites for Mechanical and Thermal Properties Tuning. *Biomacromolecules* 2020, [doi.org/10.1021/acs.biomac.9b01760](https://doi.org/10.1021/acs.biomac.9b01760).
13. Liebau J, Tersa M, Trastoy B, Patrick J, Rodrigo-Unzueta A, Corzana F, Sparrman T, Guerin ME, Mäler L. Unveiling the activation dynamics of a fold-switch bacterial glycosyltransferase by (19)F NMR. *J Biol Chem* 2020, [doi.org/10.1074/jbc.RA120.014162](https://doi.org/10.1074/jbc.RA120.014162).
14. Köhler C, Carlström G, Gunnarsson A, Weininger U, Tångefjord S, Ullah V, Lepistö M, Karlsson U, Papavoine T, Edman K, et al. Dynamic allosteric communication pathway directing differential activation of the glucocorticoid receptor. *Sci Adv* 2020, 6:eabb5277, [doi:10.1126/sciadv.abb5277](https://doi.org/10.1126/sciadv.abb5277).
15. Kawale AA, Burmann BM. UvrD helicase–RNA polymerase interactions are governed by UvrD’s carboxy-terminal Tudor domain. *Communications Biology* 2020, 3:607, [doi:10.1038/s42003-020-01332-2](https://doi.org/10.1038/s42003-020-01332-2).
16. Härdelin L, Bernin D, Börjesson M, Ström A, Larsson A. Altered Thermal and Mechanical Properties of Spruce Galactoglucomannan Films Modified with an Etherification Reaction. *Biomacromolecules* 2020, [doi.org/10.1021/acs.biomac.9b01730](https://doi.org/10.1021/acs.biomac.9b01730).
17. Hasani M, Varela LM, Martinelli A. Short-Range Order and Transport Properties in Mixtures of the Protic Ionic Liquid [C2HIm][TFSI] with Water or Imidazole. *The Journal of Physical Chemistry B* 2020, 124:1767-1777, [doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10454](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10454).
18. Gunasekera S, Muhammad T, Strömstedt AA, Rosengren KJ, Göransson U. Backbone Cyclization and Dimerization of LL-37-Derived Peptides Enhance Antimicrobial Activity and Proteolytic Stability. *Frontiers in Microbiology* 2020, 11, [doi.org/10.3389/fmicb.2020.00168](https://doi.org/10.3389/fmicb.2020.00168).
19. Engström O, Belda O, Kullman-Magnusson M, Rapp M, Böhm K, Paul R, Henderson I, Derbyshire D, Karlström S, Parkes KEB, et al. Discovery of USP7 small-molecule allosteric inhibitors. *Bioorg Med Chem Lett* 2020, 30:127471, [doi:10.1016/j.bmcl.2020.127471](https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2020.127471).
20. Danelius E, Poongavanam V, Peintner S, Wieske L, Erdelyi M, Kihlberg J. Solution conformations explain the chameleonic behaviour of macrocyclic drugs. *Chemistry* 2020, [doi.org/10.1002/chem.201905599](https://doi.org/10.1002/chem.201905599).
21. Atilaw Y, Muiva-Mutisya L, Bogaerts J, Duffy S, Valkonen A, Heydenreich M, Avery VM, Rissanen K, Erdélyi M, Yenesew A. Prenylated Flavonoids from the Roots of *Tephrosia rhodesica*. *Journal of Natural Products* 2020, 83:2390-2398, [doi:10.1021/acs.jnatprod.0c00245](https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.0c00245).

### Artiklar med medförfattare från NMR-centrum

22. Nilsson AK, Pedersen A, Malmödin D, Lund AM, Hellgren G, Lofqvist C, Pupp IH, Hellstrom A. Serum choline in extremely preterm infants declines with increasing parenteral nutrition. *Eur J Nutr* 2020, [doi:10.1007/s00394-020-02312-2](https://doi.org/10.1007/s00394-020-02312-2).
23. Lindqvist HM, Radjursöga M, Torstensson T, Jansson L, Ellegård L, Winkvist A. Urine Metabolite Profiles and Nutrient Intake Based on 4-Day Weighed Food

- Diary in Habitual Vegans, Vegetarians, and Omnivores. *J Nutr* 2020, [doi.org/10.1093/jn/nxaa019](https://doi.org/10.1093/jn/nxaa019).
24. Kazimierczuk K, Kasprzak P, Georgoulia PS, Matecko-Burmann I, Burmann BM, Isaksson L, Gustavsson E, Westenhoff S, Orekhov VY. Resolution enhancement in NMR spectra by deconvolution with compressed sensing reconstruction. *Chem Commun (Camb)* 2020, 56:14585-14588, [doi:10.1039/d0cc06188c](https://doi.org/10.1039/d0cc06188c).
  25. Isaksson L, Pedersen A. Cell-Free Protein Synthesis of Small Intrinsically Disordered Proteins for NMR Spectroscopy. *Methods Mol Biol* 2020, 2141:233-245, [doi:10.1007/978-1-0716-0524-0\\_11](https://doi.org/10.1007/978-1-0716-0524-0_11).
  26. Gustavsson E, Isaksson L, Persson C, Mayzel M, Brath U, Vrhovac L, Ihalainen JA, Karlsson BG, Orekhov V, Westenhoff S. Modulation of Structural Heterogeneity Controls Phytochrome Photoswitching. *Biophys J* 2020, 118:415-421, [doi.org/10.1016/j.bpj.2019.11.025](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2019.11.025).
  27. Ciudad S, Puig E, Botzanowski T, Meigooni M, Arango AS, Do J, Mayzel M, Bayoumi M, Chaignepain S, Maglia G, et al. A $\beta$ (1-42) tetramer and octamer structures reveal edge conductivity pores as a mechanism for membrane damage. *Nature Communications* 2020, 11:3014, [doi:10.1038/s41467-020-16566-1](https://doi.org/10.1038/s41467-020-16566-1)