



SVENSKT NMR-CENTRUM VID GÖTEBORGS UNIVERSITET

Verksamhetsrapport 2021

DATUM:

2022-02-28

Göran Karlsson
Föreståndare

Sammanfattning

Under 2021 har Svenskt NMR-centrum gett stöd till mer än 130 projekt och 63 forskare (PIs) från Göteborgs universitet, nationella och internationella universitet, 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 36 000 timmar vilket är avsevärt mer än föregående år. Den utåtriktade verksamheten har varit begränsad pga Covid19-pandemin och har växlat mellan zoom-aktivitet och fysisk sammankomst. Internt utvecklingsarbete har varit fokuserat på metodik inom metabolomik, småmolekyl-NMR och strukturbiologi. Under 2021 har Svenskt NMR-centrum fått extern finansiering som enhet vid plattformen för integrerad strukturbiologi (ISB) inom SciLifeLab, tillhandahållit bioinformatikstöd inom NBIS samt varit en partner inom EU-forskningsinfrastrukturen PANACEA. Verksamheten genomgick en internationell utvärdering under hösten 2021. Verksamheten uppfyller de kriterier som ställs på en GU-forskningsinfrastruktur och rekommenderas få förnyat mandat. De vetenskapliga resultaten presenterades i 35 artiklar i internationella granskade tidskrifter. Omsättningen var 15.1 MKr och resultatet -459 kkr.

Abstract

In 2021, the Swedish NMR Center has provided support to more than 130 projects and 63 researchers (PIs) from the University of Gothenburg, national and international universities, 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 just over 36,000 hours, which is considerably more than the previous year. The outward activity has been limited due to the Covid19 pandemic and has alternated between zoom activities and physical gathering. Internal development work has been focused on methodology in metabolomics, small molecule NMR and structural biology. In 2021, the Swedish NMR Center has received external funding as a unit at the Integrated Structural Biology (ISB) platform within SciLifeLab, provided bioinformatics support within NBIS and been a partner within the EU research infrastructure PANACEA. The operation underwent an international evaluation in the autumn of 2021. The operation meets the criteria set for a GU research infrastructure and is recommended to receive a renewed mandate. The scientific results were presented in 35 articles in international peer-reviewed journals. Turnover was SEK 15.1 million and revenue SEK -459 thousand.

Innehållsförteckning:

Sammanfattning	3
Summary	3
Innehållsförteckning	5
Instrumentanvändning och instrumentstatus	7
Användare och applikationsområden	7
Personresurser och infrastruktur	9
Publikationer, outreach och undervisning	10
Organisation och internationell utvärdering	10
Svenskt NMR-centrum som nationell och internationell forskningsinfrastruktur	11
Ansökningar om deltagande som forskningsinfrastruktur	11
Ekonomiskt utfall 2021	12
Bilagor	
1. Publikationslista för 2021	13

Instrumentanvändning och instrumentstatus.

Trots pandemin har den totala användningen varit god. En konsekvens har varit att en större del av instrumenttiden har använts internt, i samband med metodutveckling eller benchmarking.

Installationer av 400 MHz-DNP resp 900 MHz pågick under större delen av 2020. Båda systemen har varit operativa under 2021, men båda kryoproberna på 900 MHz-magneten reparerades under första kvartalet. Reparationen av 5mm-proben var oväntad och kostsam. Övriga högfältsmagneter (700 MHz, 2 x 800 MHz) har varit operativa och använts i stor omfattning. De tre magneter som opererar vid 600 MHz har använts i mindre omfattning, och 500 MHz-magneten har inte använts. Givet den obefintliga användningen av 500 MHz-instrumentet är det tveksamt om magneten fortsatt ska hållas på fält. Upphandling av ny konsol och kryoprob till en 600 MHz-magnet slutfördes i december. Leverans av konsol planeras till augusti 2022 men proben dröjer till slutet av året. Kostnaderna ska delas med institutionen för kemi och molekylär biologi, som därefter får tillgång till 50% av instrumenttiden, enligt separat avtal.

Den totala användningen har varit 36 190 h, vilket är en avsevärd ökning jämfört med föregående år (30 230 h). Ökningen beror till stor del på att 900 MHz-magneten under nästan hela 2021 har varit i full användning, på årsbasis 80%. Användningen av 800 MHz-magneterna är dock fortfarande något högre (95% resp 83%), liksom för 700 MHz-magneten (90%). Två 600 MHz-magneter har använts ca 30% (Bruker, metabolomik & diffusion) resp 12% (fastfas-NMR). DNP-instrumentet har använts ca 2000 timmar. Systemet har inte automatisk insättning av prov och varierande tillgång på flytande kväve har också bidragit till en suboptimal användning.

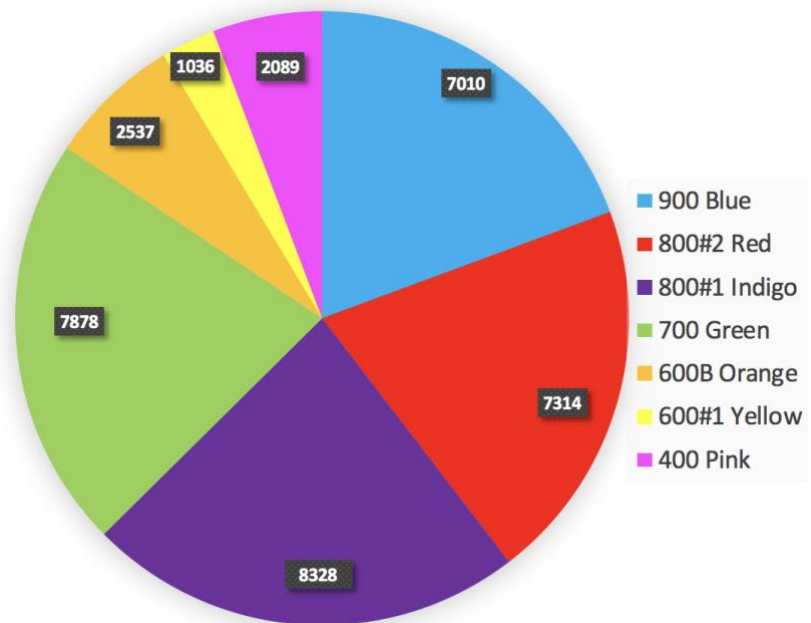
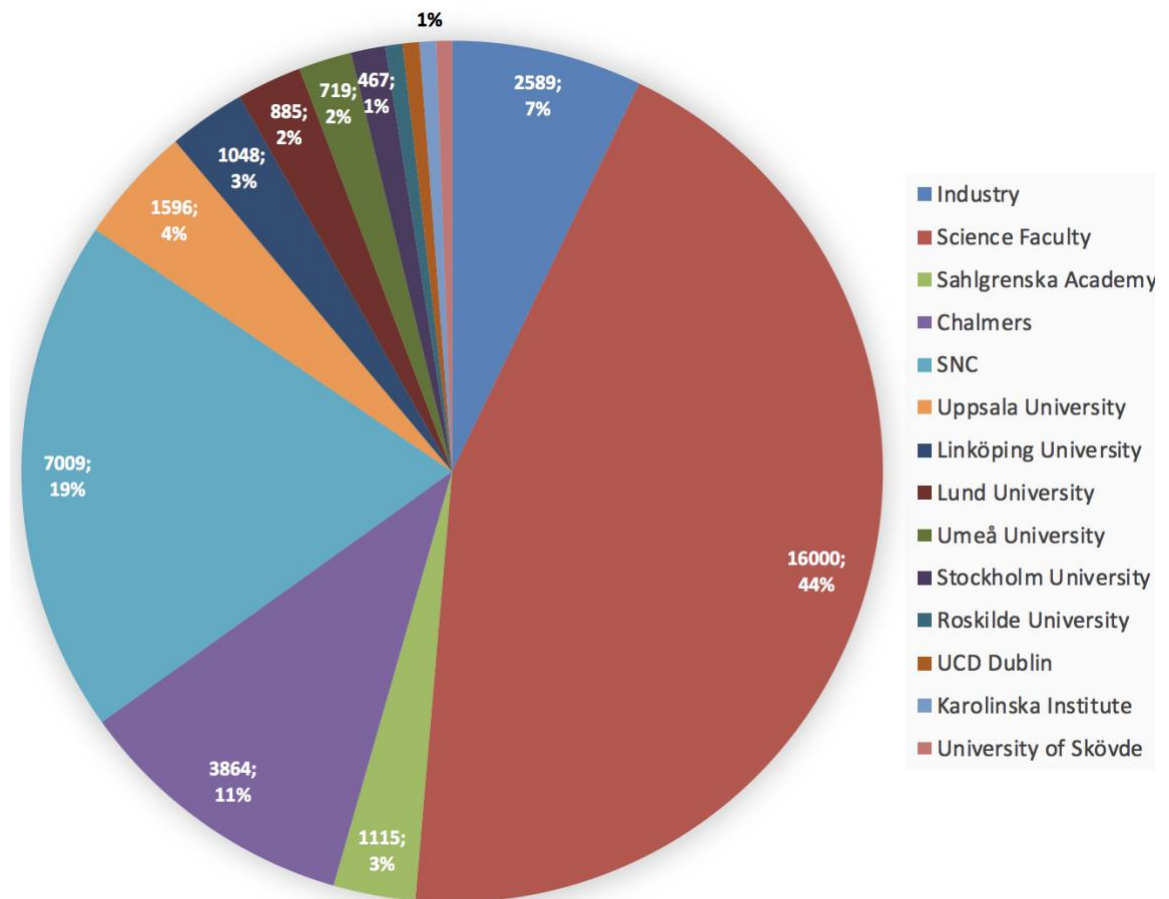


Fig. 1 Användning av magneter (timmar) under 2021.

Användare och applikationsområden

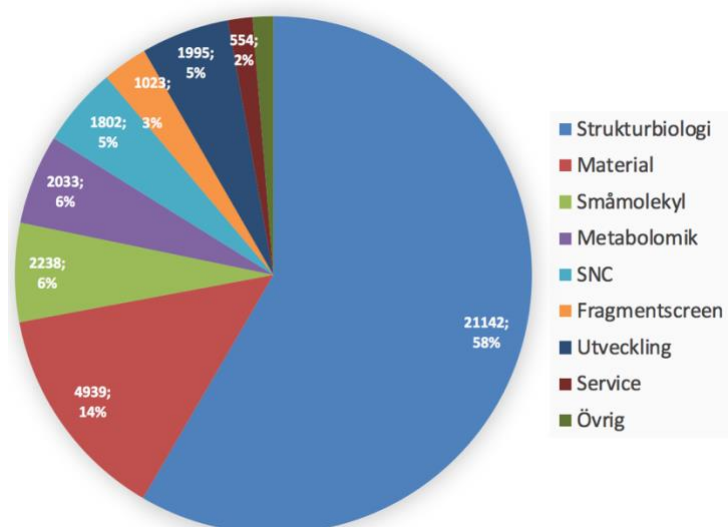
Användares affiliering

Användning baserat på affiliering hos användaren redovisas i figur 2. Användningen vid Göteborgs universitet är omfattande och naturvetenskapliga fakulteten dominerar.



Figur 2. Användares affiliering (i timmar och procent av total tid). Användning < 1% visas inte i figuren.

Sahlgrenska akademien använder infrastrukturen i mindre omfattning, men användning vid Chalmers är betydande (11). Den interna användningen vid Svenskt NMR-centrum har varit relativt omfattande, och inkluderar tidskrävande utvecklingsprojekt bl a standardisering av experimentella parametrar och undertryckning av t_1 -brus. Industrianvändning är stor och inkluderar även AstraZenecas användning av DNP-instrumentet. Tårtbitarna är mindre för övriga universitet, men återspeglar ändå en omfattande användning. Så motsvarar t ex Uppsalas 4% (1596 h) knappt 10 veckors användning dygnet runt. Användningen är spridd över hela landet och inkluderar även Uppsala, Linköping, Lund, Umeå, Stockholm, KI, och Skövde, samt i mindre omfattning Jönköping och SLU. Användning finns även inom VGR samt universiteten i Dublin och Roskilde.



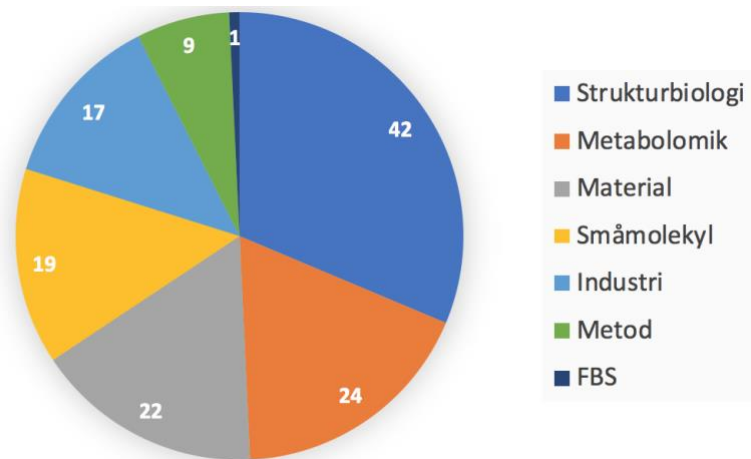
Figur 3. Användning inom olika applikationsområden.

Applikationsområden

Användning på olika applikationsområden redovisas i figur 3. Strukturbiologi står för knappt 60% av all spektrometertid följt av materialvetenskap (14%), småmolekyler (6%) och metabolomik (6%). I mindre omfattning finns intern användning, fragmentbaserad screen och service.

Projekt

Under året har 134 projekt fått tillgång till magnettid vid Svenskt NMR-centrum, fördelat på strukturbiologi (42 projekt), metabolomik (24), materialvetenskap (22), små molekyler (19), och industriprojekt (17). Intern metodutveckling och implementering (9), utgör bl a provblandning av metabolomikprover och benchmarking av pulssekvenser. Ett projekt har haft fokus på fragmentscreen. I samverkan med CBCS och SciLifeLab har screening av Covid 19 Nsp5-proteinet för bindare i SPECS-biblioteket pågått under hela 2021.



Figur 4 Antal projekt inom olika applikationsområden.

Under 2021 använde 63 forskningsgrupper eller företag svenskt NMR-centrum. Bland ansvariga forskare (PI) var 44 män och 19 kvinnor.

Personresurser och infrastruktur

Personresurser

Under 2021 har totalt motsvarande 6 forskningsingenjörer varit aktiva, fördelat på ca 1,5 FTE inom metabolomik, 1,5 FTE inom strukturbiologi och Fragmentbaserad screen, och 1,5 FTE för småmolekyl-NMR och materialvetenskap, inkl DNP-tillämpningar. Resterande tid har använts internt för administration, underhåll, kalibrering och tester samt metod- och kompetensutveckling.

Infrastruktur:

Under perioden har skett en anpassning av infrastrukturen vid svenskt NMR-centrum.

Bygglovsansökan från Akademiska Hus, i syfte att installera ytterligare en kvävetank samt för konstnärlig installation, har godkänts av stadsbyggnadskontoret.

Under 2021 har drygt 3 600 L flytande helium producerats. Att köpa samma mängd skulle ha kostat ca 600 kkr. Vissa driftstörningar har uppstått i samband med att akademiska Hus har modifierat kylsystemet för NMR-utrustningen. Den förväntade volymen hade annars varit ca drygt 30 % högre. Den nuvarande förvätskaren är dimensionerad för en förbrukning på ca 6000 L, men eftersom avkoket från magneterna uppgår till ca 9000 L / år kommer förvätskaren att uppgraderas under 2022.

Publikationer, outreach och undervisning

Publikationer

För 2021 rapporteras 35 publikationer som antingen har medförfattare från NMR-centrum (8) eller där NMR-centrum får erkännande i egenskap av forskningsinfrastruktur (27). Listor över publikationer finns tillgängligt (www.gu.se/nmr/om-oss/publikationer) och uppdateras kontinuerligt.

Outreach och undervisning

Av naturliga skäl har utåtriktade aktiviteter haft lägre prioritet under 2021. Under hela perioden har hemarbete varit norm vid Göteborgs Universitet. En majoritet av medarbetarna arbetar således hemifrån. Dagliga zoom-möten, kl 9 resp kl 13 under våren, kl 9 under senhösten, samlar medarbetarna till samtal. Undervisning har skett via zoom, liksom nationella (SweProt) och internationella (EUROMAR) möten. Verksamheten presenterades dock via zoom på SweProt-mötet. Trots pandemin har ett flertal aktiviteter arrangerats av Svenskt NMR-centrum under 2021:

- I juni hölls en en-dags workshop med fokus på DNP-tillämpningar.
- Under perioden 27 september till 8 oktober arrangerades en avancerad strukturbilogikurs med huvudsakligen internationella deltagare.
- Ett invigningssymposium för DNP-instrumentet arrangerades den 26 oktober och samlade ett 40-tal deltagare. Prof. Lyndon Emsley, EFLF Lausanne, presenterade "Structure Activity Relations in Materials from DNP-NMR" I en hybridföreläsning med deltagare bl a från Umeå.
- Svenskt NMR-centrum arrangerade ett användarmöte för användare vid ISB-plattformen vid SciLifeLab. Mötet arrangerades den 14 december i Stockholm, "back-to-back" med användarmöte för CryoEM-enheten, och samlade ett 30 deltagare på plats och ett liknande antal via zoom.

Verksamheten har varit involverad i sedvanlig undervisning på grund- och på avancerad nivå, bl a vid apotekarprogrammet (KEM840) och funktionell genomik (BIO410).

Organisation och internationell utvärdering

Organisation och status vid Göteborgs Universitet

Svenskt NMR-centrum har fortsatt institutionen för kemi och molekylär biologi som värdenhet, trots rekommendationer från bla RED19-utvärderingen. Värdenhetens utvärdering av Svenskt NMR-centrum har försenats och föreståndaren har interimsförordnats för perioden 2021-07-01 - 2022-06-30. T.f.prefekt anser att styrgruppen har fortsatt mandat.

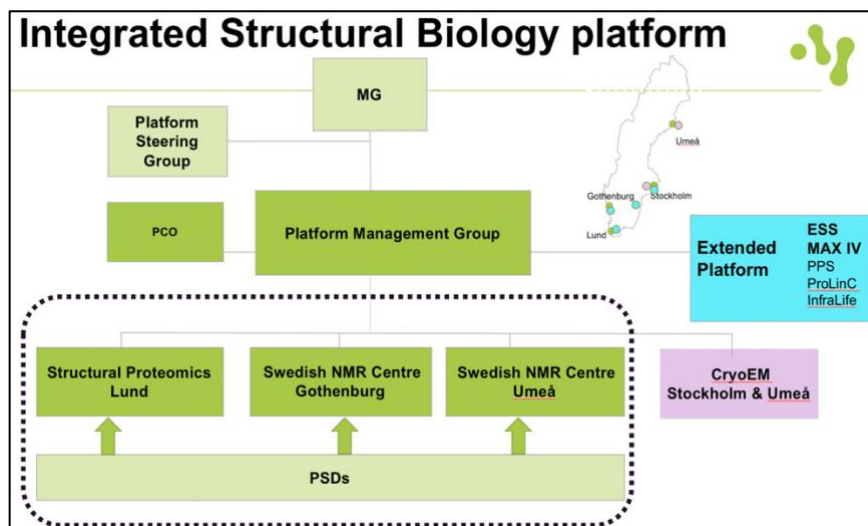
Internationell utvärdering

En internationell utvärdering genomfördes i oktober och november. Utvärderingsgruppen bestod av Michael Sattler, TUM, München, och Tone Bathen, NTNU, Trondheim. Underlag

för utvärderingen var självvärdering från verksamheten, intervjuer med föreståndare, ordförande i styrgrupp, användare samt representanter från värdenheten. I rapporten (dnr V 2021/xxx) kommer man fram till att verksamheten uppfyller kriterierna för en GU-forskningsinfrastruktur bör få förnyat mandat.

Svenskt NMR-centrum som nationell och internationell forskningsinfrastruktur

Inom SciLifeLab är Svenskt NMR-centrum är en enhet vid ISB- plattformen ”Integrated Structural Biology” (Figur 5) för perioden 2021-2024. Övriga enheter vid plattformen är NMR-centrum i Umeå samt Strukturell Proteomik vid Lunds universitet. ISB-Plattformen förväntas ha gemensam styrgrupp med GU-forskningsinfrastrukturen och ska bl a koordinera området ISB tillsammans med bl a CryoEM-enheten vid SciLifeLab samt MAX IV, ESS och övriga relevanta intressenter. Under 2021 har plattformens operativa gruppen hållit möten varannan vecka och månatliga möten har arrangerats inom den sk EMG-gruppen.



Figur 4. Schematisk organisation av ISB-plattformen inom SciLifeLab. CryoEM är virtuellt associerad. ISB-plattformen ska också samverka med bl a MAX IV och

Svenskt NMR-centrum är en partner inom PANACEA, ett konsortium med stöd från EU H2020 för att utveckla och tillgängliggöra fastfas-NMR och DNP-NMR för europeiska användare. Projektstart senarelades till 2021-09-01 pga Covid-pandemin, och löper under 4 år. Adress till web-portalen är www.panacea-nmr.eu. Svenskt NMR-centrum har också varit den av den nationella forskningsinfrastrukturen för bioinformatik, NBIS som stöds av VR-RFI

Ansökningar om deltagande som forskningsinfrastruktur

VR-RFI

Svenskt NMR-centrum vid Göteborgs universitet koordinerade en ansökan till VR-RFI som avser ett nationell NMR-nätverk, SwedNMR. Ansökan för perioden 2022-2026 beviljades och SwedNMR startade 2022-01-01. Budget- och verksamhetsdiskussioner pågår. I konsortiet ingår, förutom Göteborgs universitet nio andra svenska universitet (Lund, Chalmers, Linköping, Uppsala, Stockholm, KTH, KI, SLU och Umeå).

Svenskt NMR-centrum har varit partner i ytterligare två ansökningar till VR-RFI. En ansökan rörde proteinproduktion (PPS) och en ansökan rörde kemisk biologi (CBCS). Båda ansökningarna bifölls av VR-RFI för perioden 2022-2026. CBCS koordineras av KI och PPS

koordineras av Göteborgs Universitet. Budget- och verksamhetsdiskussioner pågår, liksom anställning av en forskningsingenjör vid resp verksamhet.

SciLifeLab

Inom ramen för SciLifeLab utlystes projektmedel för teknikutveckling resp dyrbar utrustning. Från ISB-plattformen lämnades två ansökningar in. En ansökan om 1 MKr avser teknikutveckling av "Inside-cell NMR" och en ansökan om 2 MKr avser uppgradering av en NMR-konsol med kryoprob. Svenskt NMR-centrum var också medsökande på en TDP-ansökan (huvudsökande: NBIS) som avsåg användning av AlphaFold2 tillsammans med NMR-data.

Ansökan för uppgradering av NMR-konsol bifölls med 2 MKr, liksom teknikutvecklingsprojektet som syftar till att integrera data från NMR och CryoEM i AlphaFold2.

EU

Svenskt NMR-centrum är en partner (beneficiary) tillsammans med övriga deltagare i SwedNMR i konsortiet R-NMR. En ansökan om projektmedel inom EU H2021 för att utveckla "remote access" lämnades in. Projektet koordineras från Frankfurt, och beviljades i början av januari 2022.

Ekonomiskt utfall för 2021

Resultaträkning för 2021 redovisas i tabell 1. Utfallet avviker något från budget. Preliminära kommentarer är att både anslag, bidrag och samfinansiering är högre än budget, liksom övrig drift. Underskottet, ca 460 kkr, beror huvudsakligen på obalans mellan verksamhetsgrupperna 20 och 24-25.

Det balanserade kapitalet för Svenskt NMR-centrum är +711 kkr 2021-12-31.

Resultaträkning	Budget	Utfall	%
Anslag	4 872	5 361	110%
Försäljning	1 500	1 371	91%
Interna bidrag	1 500	1 732	115%
Bidrag	2 500	6 853	274%
Samfinansiering	685	1 873	273%
Finansiella intäkter	56	1	2%
Periodisering påg proj	869	-2 764	320%
Täckn. Avs BF anlägg.	230	230	100%
Avsättn BF anlägg			
Intäkter	12 212	14 607	%
Lönekostnader	5 656	5 469	97%
Förändr. Semesterskuld	0	55	-%
Övr personalkost	225	31	14%
Övrig Drift	2 573	3 679	143%
Samfinansiering		891	
Indirekta Kostnader	0	151	
Lokalkostnader	1 591	1 999	126%
Avskrivningar	2 167	2 792	129%
Kostnader	12 212	15 067	123%
Totalt	-0	-459	

Tabell 1. Ekonomisk utfall

Publikationslista 2021.

Publikationer med medförfattare från Svenskt NMR-centrum.

1. Wallerstein J, Ekberg V, Ignjatović MM, Kumar R, Caldararu O, Peterson K, Wernersson S, Brath U, Leffler H, Oksanen E, Logan DT, Nilsson UJ, Ryde U, Akke M. Entropy–Entropy Compensation between the Protein, Ligand, and Solvent Degrees of Freedom Fine-Tunes Affinity in Ligand Binding to Galectin-3C. *JACS Au* 2021. doi: [10.1021/jacsau.0c00094](https://doi.org/10.1021/jacsau.0c00094)
2. Veskovski L, Andersson P-O, Turesson I, Malmodin D, Pedersen A, Mellqvist U-H. Serum Metabolomic Profiling Correlated with ISS and Clinical Outcome for Multiple Myeloma Patients Treated with High-dose Melphalan and Autologous Stem Cell Transplantation. *Experimental Hematology* 2021, doi:[10.1016/j.exphem.2021.02.007](https://doi.org/10.1016/j.exphem.2021.02.007).
3. Mushtaq AU, Ådén J, Clifton LA, Wacklin-Knecht H, Campana M, Dingeldein APG, Persson C, Sparrman T, Gröbner G. Neutron reflectometry and NMR spectroscopy of full-length Bcl-2 protein reveal its membrane localization and conformation. *Communications Biology* 2021, doi:[10.1038/s42003-021-02032-1](https://doi.org/10.1038/s42003-021-02032-1).
4. Murillo-Saich JD, Diaz-Torne C, Ortiz MA, Coras R, Gil-Alabarse P, Pedersen A, Corominas H, Vidal S, Guma M. Metabolomics profiling predicts outcome of tocilizumab in rheumatoid arthritis: an exploratory study. *Metabolomics* 2021, 17:74, doi:[10.1007/s11306-021-01822-2](https://doi.org/10.1007/s11306-021-01822-2).
5. Lesovoy DM, Georgoulia PS, Diercks T, Matečko-Burmann I, Burmann BM, Bocharov EV, Bermel W, Orekhov VY. Unambiguous tracking of protein phosphorylation by fast high-resolution FOSY NMR. *Angewandte Chemie International Edition* 2021, n/a, doi:[10.1002/anie.202102758](https://doi.org/10.1002/anie.202102758).
6. Isaksson L, Gustavsson E, Persson C, Brath U, Vrhovac L, Karlsson G, Orekhov V, Westenhoff S. Signaling Mechanism of Phytochromes in Solution. *Structure* 2021, 29:151-160.e153, doi:[10.1016/j.str.2020.08.009](https://doi.org/10.1016/j.str.2020.08.009).
7. Havsed K, Stensson M, Jansson H, Carda-Diéguez M, Pedersen A, Neilands J, Svensäter G, Mira A. Bacterial Composition and Metabolomics of Dental Plaque From Adolescents. *Frontiers in Cellular and Infection Microbiology* 2021, 11, doi:[10.3389/fcimb.2021.716493](https://doi.org/10.3389/fcimb.2021.716493).
8. Cravcenco A, Yu Y, Edhborg F, Goebel JF, Takacs Z, Yang Y, Albinsson B, Börjesson K. Exciton Delocalization Counteracts the Energy Gap: A New Pathway toward NIR-Emissive Dyes. *Journal of the American Chemical Society* 2021, doi:[10.1021/jacs.1c10654](https://doi.org/10.1021/jacs.1c10654).

Publikationer där NMR-centrum har använts

9. Zhou S, Pettersson P, Björck ML, Dawitz H, Brzezinski P, Mäler L, Ädelroth P. NMR structural analysis of the yeast cytochrome c oxidase subunit Cox13 and its interaction with ATP. *BMC Biology* 2021, 19:98, doi:[10.1186/s12915-021-01036-x](https://doi.org/10.1186/s12915-021-01036-x)
10. Woo J, Wang A, Bernin D, Ahari H, Shost M, Zammit M, Olsson L. Impact of Different Synthesis Methods on the Low-Temperature Deactivation of Cu/SAPO-34 for NH₃-

- SCR Reaction. *Emission Control Science and Technology* 2021, [doi:10.1007/s40825-020-00182-y](https://doi.org/10.1007/s40825-020-00182-y).
11. Wojtasz-Mucha J, Hasani M, Theliander H. Dissolution of wood components during hot water extraction of birch. *Wood Science and Technology* 2021, [doi:10.1007/s00226-021-01283-9](https://doi.org/10.1007/s00226-021-01283-9)
 12. Wieske LHE, Erdélyi M. NUS for NOESY? A case study on spiramycin. *Magnetic Resonance in Chemistry* 2021, n/a, doi.org/10.1002/mrc.5133.
 13. Wallenius V, Elebring E, Casselbrant A, Laurenius A, le Roux CW, Docherty NG, Björserud C, Björnfort N, Engström M, Marschall H-U, *et al.* Glycemic Control and Metabolic Adaptation in Response to High-Fat versus High-Carbohydrate Diets—Data from a Randomized Cross-Over Study in Healthy Subjects. *Nutrients* 2021, 13, [doi:10.3390/nu13103322](https://doi.org/10.3390/nu13103322).
 14. Vavra S, Elamin K, Evenäs L, Martinelli A. Transport Properties and Local Structure of an Imidazole/Protic Ionic Liquid Mixture Confined in the Mesopores of Hydrophobic Silica. *The Journal of Physical Chemistry C* 2021, 125:2607-2618, [doi:10.1021/acs.jpcc.0c08627](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c08627)
 15. Troussicot L, Burmann BM, Molin M. Structural determinants of multimerization and dissociation in 2-Cys peroxiredoxin chaperone function. *Structure* 2021, [doi:10.1016/j.str.2021.04.007](https://doi.org/10.1016/j.str.2021.04.007)
 16. Stenström O, Diehl C, Modig K, J. Nilsson U, Akke M. Mapping the energy landscape of protein–ligand binding via linear free energy relationships determined by protein NMR relaxation dispersion. *RSC Chemical Biology* 2021, 2:259-265, [doi:10.1039/DOCB00229A](https://doi.org/10.1039/DOCB00229A).
 17. Sebastian J, Cheah YW, Bernin D, Creaser D, Olsson L. The Promotor and Poison Effects of the Inorganic Elements of Kraft Lignin during Hydrotreatment over NiMoS Catalyst. *Catalysts* 2021, 11, [doi:10.3390/catal11080874](https://doi.org/10.3390/catal11080874).
 18. Rohde PD, Kristensen TN, Sarup P, Muñoz J, Malmendal A. Prediction of complex phenotypes using the *Drosophila melanogaster* metabolome. *Heredity* 2021, [doi:10.1038/s41437-021-00404-1](https://doi.org/10.1038/s41437-021-00404-1).
 19. Nybacka S, Simrén M, Störsrud S, Törnblom H, Winkvist A, Lindqvist HM. Changes in serum and urinary metabolomic profile after a dietary intervention in patients with irritable bowel syndrome. *PLOS ONE* 2021, 16:e0257331, [doi:10.1371/journal.pone.0257331](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0257331).
 20. Naserifar S, Swensson B, Bernin D, Hasani M. Aqueous N,N-dimethylmorpholinium hydroxide as a novel solvent for cellulose. *European Polymer Journal* 2021:110822, [doi:10.1016/j.eurpolymj.2021.110822](https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2021.110822).
 21. Ul Mushtaq A, Ådén J, Sparrman T, Hedenström M, Gröbner G. Insight into Functional Membrane Proteins by Solution NMR: The Human Bcl-2 Protein—A Promising Cancer Drug Target. *Molecules* 2021, 26, [doi:10.3390/molecules26051467](https://doi.org/10.3390/molecules26051467).
 22. Montoliu-Gaya L, Tietze D, Kaminski D, Mirgorodskaya E, Tietze AA, Sterky FH. CA10 regulates neurexin heparan sulfate addition via a direct binding in the secretory pathway. *EMBO reports* 2021, n/a:e51349, [doi:10.15252/embr.202051349](https://doi.org/10.15252/embr.202051349).

23. Llàcer Navarro S, Nakayama K, Idström A, Evenäs L, Ström A, Nypelö T. The effect of sulfate half-ester groups on cellulose nanocrystal periodate oxidation. *Cellulose* 2021, [doi:10.1007/s10570-021-04115-y](https://doi.org/10.1007/s10570-021-04115-y).
24. Kurzawa-Akanbi M, Tammireddy S, Fabrik I, Gliudelytė L, Doherty MK, Heap R, Matečko-Burmann I, Burmann BM, Trost M, Lucocq JM, et al. Altered ceramide metabolism is a feature in the extracellular vesicle-mediated spread of alpha-synuclein in Lewy body disorders. *Acta Neuropathologica* 2021, [doi:10.1007/s00401-021-02367-3](https://doi.org/10.1007/s00401-021-02367-3).
25. Kawale AA, Burmann BM. Characterization of backbone dynamics using solution NMR spectroscopy to discern the functional plasticity of structurally analogous proteins. *STAR Protocols* 2021, 2:100919, [doi:10.1016/j.xpro.2021.100919](https://doi.org/10.1016/j.xpro.2021.100919).
26. Kawale AA, Burmann BM. Inherent backbone dynamics fine-tune the functional plasticity of Tudor domains. *Structure* 2021, [doi: 10.1016/j.str.2021.06.007](https://doi.org/10.1016/j.str.2021.06.007).
27. Kasprzak P, Urbańczyk M, Kazimierczuk K. Clustered sparsity and Poisson-gap sampling. *Journal of Biomolecular NMR* 2021, [doi:10.1007/s10858-021-00385-7](https://doi.org/10.1007/s10858-021-00385-7).
28. Hynynen J, Riddell A, Achour A, Takacs Z, Wallin M, Parkås J, Bernin D. 'Lignin and extractives first' conversion of lignocellulosic residual streams using UV light from LEDs. *Green Chemistry* 2021, [doi:10.1039/D1GC02543K](https://doi.org/10.1039/D1GC02543K)
29. Hulander E, Bärebring L, Turesson Wadell A, Gjertsson I, Calder PC, Winkvist A, Lindqvist HM. Diet intervention improves cardiovascular profile in patients with rheumatoid arthritis: results from the randomized controlled cross-over trial ADIRA. *Nutr J* 2021, 20:9, [doi:10.1186/s12937-021-00663-y](https://doi.org/10.1186/s12937-021-00663-y).
30. Gunnarsson M, Bernin D, Hasani M, Lund M, Bialik E. Direct Evidence for Reaction between Cellulose and CO₂ from Nuclear Magnetic Resonance. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* 2021, [doi:10.1021/acssuschemeng.1c05863](https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c05863).
31. Gunnarsson M, Bernin D, Hasani M. On the interference of urea with CO₂/CO₃²⁻ chemistry of cellulose model solutions in NaOH(aq). *Carbohydrate Polymers* 2021, 251:117059, [doi:10.1016/j.carbpol.2020.117059](https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.117059).
32. Ekvall MT, Hedberg J, Odnevall Wallinder I, Malmendal A, Hansson L-A, Cedervall T. Adsorption of bio-organic eco-corona molecules reduces the toxic response to metallic nanoparticles in *Daphnia magna*. *Scientific Reports* 2021, 11:10784, [doi:10.1038/s41598-021-90053-5](https://doi.org/10.1038/s41598-021-90053-5)
33. Begnini F, Poongavanam V, Atilaw Y, Erdelyi M, Schiesser S, Kihlberg J. Cell Permeability of Isomeric Macrocycles: Predictions and NMR Studies. *ACS Medicinal Chemistry Letters* 2021, [doi:10.1021/acsmchemlett.1c00126](https://doi.org/10.1021/acsmchemlett.1c00126)
34. Ahlbom A, Maschietti M, Nielsen R, Hasani M, Theliander H. Towards understanding kraft lignin depolymerisation under hydrothermal conditions. *Holzforschung* 2021, [doi:10.1515/hf-2021-0121](https://doi.org/10.1515/hf-2021-0121).
35. Ahlbom A, Maschietti M, Nielsen R, Lyckeskog H, Hasani M, Theliander H. Using Isopropanol as a Capping Agent in the Hydrothermal Liquefaction of Kraft Lignin in Near-Critical Water. *Energies* 2021, 14, [doi:10.3390/en14040932](https://doi.org/10.3390/en14040932).