

## PARÂMETROS E SÍMBOLOS A SEREM UTILIZADOS EM RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Comitê de Tradução da AUREMN\*

Dorila Piló Veloso

Departamento Química/ICEx - UFMG - Belo Horizonte

Peter R. Seidl

EQ/UFRJ - Rio de Janeiro - RJ

Sonia Maria Cabral de Menezes

PETROBRAS/CENPES - Divisão de Química - Cidade Universitária - Ilha do Fundão - 21949-900 - Rio de Janeiro - RJ

Recebido em 15/3/99

**PARAMETERS AND SYMBOLS FOR USE IN NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE (IUPAC RECOMMENDATIONS 1997):** NMR is now frequently the technique of choice for determination of chemical structure in solution. Its uses also span structure in solids and mobility at the molecular level in all phases. The research literature in the subject is vast and ever-increasing. Unfortunately, many articles do not contain sufficient information for experiments to be repeated elsewhere, and there are many variations in the usage of symbols for the same physical quantity. It is the aim of the present recommendations to provide simple check-lists that will enable such problems to be minimised in a way that is consistent with general IUPAC formulation. The area of medical NMR and imaging is not specifically addressed in these recommendations, which are principally aimed at mainstream use of NMR by chemists (of all sub-disciplines) and by many physicists, biologists, material scientists and geologists etc. working with NMR.

**Keywords:** Nuclear Magnetic Resonance; NMR experimental parameters; NMR symbols and terms.

Este documento apresenta a notação recomendada para uso em publicações, constituindo uma contribuição significativa para a espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). As recomendações estão divididas em três partes:

A - Parâmetros experimentais, que devem ser apresentados para que o trabalho em questão possa ser reproduzido em qualquer outro laboratório.

B - Uma lista de símbolos (empregando caracteres romanos e gregos) a serem usados para parâmetros relevantes de RMN.

C - Recomendações da IUPAC

## A - PARÂMETROS EXPERIMENTAIS DE RMN

### Para redação de publicações

#### 1. Introdução

O objetivo desta lista é o de introduzir um grau de uniformidade no modo como os resultados de RMN são relatados nas revistas de química, de modo a assegurar que os experimentos possam ser repetidos com precisão. Ela é para ser considerada como uma lista mínima, posto que nem todos os parâmetros são relevantes para um dado experimento. Pode-se notar que as condições da amostra (ex.: solvente, concentração, etc.) não fazem parte da lista, ainda que seja absolutamente necessário que estes sejam especificados com clareza.

#### \*Colaboradores:

Alberto Passos Guimarães (CBPF); Anita J. Marsaioli (IQ/UNICAMP); Carlos Roberto Nogueira Pacheco (PETROBRAS/CENPES); José Daniel Figueroa Villar (IME); Ney V. Vugman (IF/UFRJ); Valentim E. Costa (IQ/FRGS)

Tradução de recomendações da IUPAC publicadas em *Pure and Applied Chemistry*, 1997, 69, 2489.

Tradução aprovada pelo Comitê Brasileiro para Assuntos de Química junto à IUPAC

#### 2. Geral

- O núcleo ou núcleos estudados.
- O fabricante e o modelo do equipamento.
- A frequência de ressonância ou frequências (preferencialmente da amostra ou amostras de referência).
- O campo magnético [opcional se as frequências são fornecidas].
- A (s) seqüência (s) de pulsos utilizada (s).
- Os procedimentos de referência para os deslocamentos químicos.
- O tamanho/natureza do tubo de amostra ou do recipiente.
- A temperatura da amostra no momento da medida.

#### 3. Condições do pulso

- O campo magnético do pulso de radiofrequência ou equivalente em unidades de frequência e/ou duração equivalente do pulso de 90°. [Observe-se a palavra não ambígua "duração" em vez de "largura" ou "comprimento".]
- Ângulo (s) de rotação (nutation) e fases relativas de todos os pulsos.
- A largura espectral (ou tempo de amostragem, se definido inequivocamente).
- Tempo de aquisição (ou número de pontos de dados adquiridos, se o tempo de amostragem é fornecido).
- Número de transientes (aquisições).
- Tempo de espera da reciclagem.

[Notar que trata-se do intervalo de tempo que se segue ao término de um ciclo de uma seqüência de pulsos e o início do próximo, algumas vezes também chamado de intervalo de relaxação. Este intervalo de tempo é distinto do tempo de ciclagem, que é o tempo entre pontos análogos de ciclos de seqüências de pulsos sucessivas].

- Quaisquer outros intervalos de tempo relevantes.
- Condições do desacoplamento ou método de ressonância dupla/múltipla, incluindo o campo magnético da radiofrequência

- (ou equivalente em unidades de frequência e/ou a duração equivalente do pulso de 90°).
- Formas dos pulsos e frequências relevantes (para experimentos com pulsos seletivos).
  - As magnitudes, direções, formas e durações de quaisquer gradientes de campo magnético utilizados.

#### 4. Parâmetros de processamento

- Extensão por preenchimento com zeros.
- Qualquer função de janela (apodização, tempo de espera de pré-aquisição, intensificação da resolução, alargamento de linha).
- Qualquer correção especial de linha de base ou procedimentos para ajuste de fase.
- Qualquer detalhe adicional de processamento, tal como predição linear ou entropia máxima.
- Qualquer procedimento especial para quantificação do sinal (Ex.: deconvolução).

#### 5. Espectros no estado sólido (exigências adicionais)

- Tempo de contato. [Para experimentos que utilizam polarização cruzada.]
- Ângulo de rotação da amostra.
- Velocidade de rotação da amostra.
- Uso de técnicas especiais tais como RDU (Rotação Dupla - "DOR") ou ADR (Ângulo dinâmico de rotação - "DAS").

#### 6. Medidas de relaxação (exigências adicionais)

- Número de pontos de medida utilizados.
- Método de análise (exponencial, etc.).
- Magnitude do campo de radiofrequência (ou equivalente expresso em unidades de frequência). [Para medidas de  $T_{1\rho}$ .]

#### 7. Espectros multidimensionais

- Os incrementos de tempo e o número de pontos e/ou a largura espectral e máxima duração dos períodos de evolução devem ser mencionados para cada dimensão bem como o tamanho dos dados após o processamento.
- Para figuras de espectros multidimensionais cada eixo deve explicitar inequivocamente, onde possível, a variável envolvida (Ex.:  $\delta_H$ ,  $\delta_C$ ,  $J_{CH}$ ) bem como a indicação de frequência tal como  $F_1$ ,  $F_2$ , etc.

#### 8. Notas adicionais

- As figuras de espectros devem ter indicação da direção do aumento da frequência e devem mencionar o núcleo envolvido nas legendas. Sempre que possível, assinalamentos dos deslocamentos químicos devem ser indicados ou ilustrados nos espectros.
- A ciclagem da fase de todos os pulsos de radiofrequência e do detetor devem ser especificadas quando for crucial para o experimento.
- Para seqüências de pulso novas ou pouco usuais, um diagrama completo da seqüência é altamente recomendável. Se em vez de diagramas são usadas siglas ou acrônimos para seqüências já estabelecidas, recomenda-se citar a(s) referência(s) bibliográfica(s).

### B. SÍMBOLOS PARA RMN E QUANTIDADES CORRELATAS

#### (i) Alfabeto Romano

$a$  ou  $A$  Constante de acoplamento hiperfino (elétron-núcleo)

|                                |   |
|--------------------------------|---|
| $A_q^{(l,m)}$                  | A $q$ -ésima componente de um tensor irreduzível de ordem $l$ representando o operador de spin nuclear para uma interação do tipo $q$   |
| $B$                            | Campo magnético (a rigor, densidade de fluxo magnético ou indução magnética)  |
| $B_0$                          | Campo magnético estático de um espectrômetro de RMN   |
| $B_1, B_2$                     | Campos magnéticos de radiofrequência associados com $\nu_1, \nu_2$  |
| $B_L$                          | Campo magnético local (componentes $B_{xL}, B_{yL}, B_{zL}$ ) do campo flutuante ou de origem dipolar   |
| $C$                            | Tensor de interação spin - rotação  |
| $C_X$                          | Constante de acoplamento spin-rotação do núcleo X   |
| $D$                            | Tensor de interação dipolar   |
| $D$                            | Constante de acoplamento dipolar entre dois núcleos (digamos 1 e 2) $(\mu_0/4\pi)\gamma_1\gamma_2(\hbar/2\pi)r_{12}^{-3}$ , em unidades de frequência. (Ver Nota 1)   |
| $D^C$                          | Receptividade nuclear relativa àquela do núcleo de carbono-13   |
| $D^P$                          | Receptividade nuclear relativa àquela do núcleo de hidrogênio-1   |
| $E$                            | Intensidade de campo elétrico   |
| $F$                            | Largura espectral   |
| $F_1, F_2$<br>(ou $f_1, f_2$ ) | As respectivas dimensões de frequências de um espectro bi-dimensional (usar $F_3$ , etc, para ordens maiores)   |
| $\hat{F}_G$                    | Operador de spin nuclear para um grupo, G, de núcleos (componentes $\hat{F}_{Gx}, \hat{F}_{Gy}, \hat{F}_{Gz}, F_{G+}, \hat{F}_{G-}$ )   |
| $F_G$                          | Número quântico magnético associado a $\hat{F}_G$   |
| $g$                            | Fator $g$ nuclear ou eletrônico (fator de desdobramento de Landé)   |
| $G$                            | Amplitude do gradiente de campo magnético   |
| $H_{ij}$                       | Elemento da representação matricial do operador Hamiltoniano (em unidades de energia); subscritos indicam a natureza do operador  |
| $\hat{I}_j$                    | Operador de spin nuclear para o núcleo $j$ (componentes $\hat{I}_{jx}, \hat{I}_{jy}, \hat{I}_{jz}$ )  |
| $\hat{I}_{j+}, \hat{I}_{j-}$   | Operadores de spin de "subida" e de "descida" para núcleos $j$  |
| $I_j$                          | Número quântico magnético associado com $\hat{I}_j$   |
| $J$                            | Tensor de acoplamento indireto  |
| ${}^nJ$                        | Constante de acoplamento nuclear spin-spin através de $n$ ligações (normalmente dado em unidades de frequência). Parênteses podem ser usados (por exemplo) para indicar as espécies de núcleos que estão acoplados, ex.: $J(^{13}C, ^1H)$ ou adicionalmente, o caminho do acoplamento $J(\text{POCF})$ . Onde não existir ambiguidade, os elementos envolvidos podem, alternativamente, ser fornecidos como subscritos, ex.: $J_{CH}$ . O núcleo de massa maior deve vir primeiro |
| $J(\omega)$                    | Densidade espectral das flutuações na frequência angular $\omega$ . Subscritos e superescritos para $J$ podem ser usados para indicar a mudança relevante do número quântico (0, 1 ou 2) ou a ordem e componente das quantidades tensoriais relevantes  |
| ${}^nK$                        | Constante de acoplamento spin-spin nuclear reduzida (ver notas sobre ${}^nJ$ ), $K_{jk} = 4\pi^2 J_{jk} / h\gamma_j\gamma_k$  |
| $L$                            | Momento angular   |
| $m_j$                          | Autovalor de $\hat{I}_{jz}$ (número quântico de componente magnética) (Ver Nota 2)  |
| $m_{tot}$                      | Número quântico da componente magnética total de um sistema de spin (autovalor de $\sum_j \hat{I}_{jz}$ ) (Ver Nota 2)  |
| $m_{tot}(X)$                   | Número quântico da componente magnética total de núcleos do tipo X (Ver Nota 2)   |
| $M_0$                          | Magnetização macroscópica de equilíbrio por unidade de volume de um sistema de spin na presença de $B_0$  |

|                            |   |                               |   |
|----------------------------|---|-------------------------------|---|
| $M_x, M_y, M_z$            | Componentes da magnetização macroscópica por unidade de volume  |                               |   |
| $M_n$                      | Enésimo momento do espectro ( $M_2 =$ segundo momento, etc.)  | $\Delta n$                    | Diferença de população entre estados nucleares ( $\Delta n_0$ no equilíbrio de Boltzmann)   |
| $n_\alpha, n_\beta$        | População dos estados de spin $\alpha$ e $\beta$  | $\Delta \delta$               | Variação ou diferença em $\delta$   |
| $N$                        | Número total de núcleos de um dado tipo por unidade de volume da amostra  | $\Delta \nu_{1/2}$            | Largura total, em unidades de frequência, de uma linha de ressonância a meia altura.  |
| $q$                        | Tensor de gradiente de campo elétrico em unidades de carga elementar (componentes principais $q_{xx}, q_{yy}, q_{zz}$ ). (Ver também $V$ )  | $\Delta \sigma$               | Anisotropia em $\sigma$ [ $\Delta \sigma = \sigma_{zz} - 1/2 (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$ ]. (Ver Nota 4) (Ver também $\xi$ )   |
| $Q$                        | $eQ$ é o momento de quadrupolo nuclear onde $e$ é a carga elementar   | $\Delta \chi$                 | (i) Anisotropia da susceptibilidade magnética ( $\Delta \chi = \chi_{  } - \chi_{\perp}$ ); (ii) diferença em eletronegatividades   |
| $R_1^X$                    | Taxa de relaxação spin-rede (longitudinal) para o núcleo X  | $\epsilon_0$                  | Permissividade do vácuo   |
| $R_2^X$                    | Taxa de relaxação spin-spin (transversal) para o núcleo X   | $\zeta$                       | Anisotropia na blindagem (Ver Nota 4), expressa como $\sigma_{zz} - \sigma_{iso}$ . (Ver também $\Delta \sigma$ )   |
| $R_{1\rho}^X$              | Taxa de relaxação no sistema de eixos rotatórios para o núcleo X  | $\eta$                        | (i) Variação de intensidade com o efeito Overhauser nuclear (de maneira que o efeito Overhauser nuclear seja $1 + \eta$ ); (ii) tensor do fator de assimetria. (Ex.: em $\sigma$ ); (iii) viscosidade |
| $S$                        | Intensidade do sinal  | $\kappa$                      | Distorção de um tensor (Ver também Nota 7)  |
| $\hat{S}$                  | Operador de spin do elétron (ou, ocasionalmente, do núcleo) cf. $\hat{I}$   | $\theta$                      | Ângulo, especialmente aquele entre um dado vetor e $B_0$  |
| $t_1, t_2$                 | Dimensões de tempo para RMN em duas dimensões   | $\mu$                         | (i) Momento de dipolo magnético (componente $\mu_z$ na direção de $B_0$ ); (ii) momento de dipolo elétrico  |
| $T_c$                      | Temperatura de coalescência para os sinais em um espectro de RMN  | $\mu_0$                       | Permeabilidade do vácuo   |
| $T_1^X$                    | Tempo de relaxação spin-rede (longitudinal) do núcleo X (demais subscritos referem-se ao mecanismo de relaxação)  | $\mu_B$                       | Magneton de Bohr  |
| $T_2^X$                    | Tempo de relaxação spin-spin (transversal) do núcleo X (demais subscritos referem-se ao mecanismo de relaxação)   | $\mu_N$                       | Magneton Nuclear  |
| $T_2^*$                    | Tempo de defasagem aparente para $M_x$ ou $M_y$ (incluindo a contribuição da inhomogeneidade do campo magnético)  | $\nu_j$                       | Frequência de precessão de Larmor do núcleo $j$ (usualmente dada em MHz)  |
| $T_{1\rho}^X$              | Tempo de relaxação spin-rede de um núcleo X no sistema de referência em rotação com $B_1$   | $\nu_0$                       | (i) Frequência de operação do espectrômetro; (ii) frequência de precessão de Larmor (geral ou do núcleo isolado)  |
| $T_d$                      | Tempo de espera entre os ciclos de pulsos   | $\nu_1$                       | Frequência do campo magnético de radiofrequência do canal de observação $B_1$ (a ser distinguido de sua intensidade, $\gamma B_1$ , para o qual o símbolo $\Omega_1$ é recomendado)                   |
| $T_{ac}$                   | Tempo de aquisição  | $\nu_2$                       | Frequência do campo magnético de radiofrequência do canal de irradiação ou desacoplamento $B_2$ (a ser distinguido de sua intensidade, $\gamma B_2$ , para o qual o símbolo $\Omega_2$ é recomendado) |
| $T_q^{(l,m)}$              | A $m$ -ésima componente de um tensor irreduzível de ordem $l$ representando a intensidade de uma interação do tipo $q$  | $\Xi_X$                       | Frequência de ressonância do núcleo de um elemento X em um campo magnético tal que os hidrogênios do tetrametilsilano (TMS) apresentem ressonância exatamente em 100 MHz                              |
| $V$                        | Tensor de gradiente de campo elétrico $V = eq$ , onde $e$ é a carga elementar   | $\rho$                        | Matriz de densidade   |
| $V_{\alpha\beta}$          | Elementos do tensor do gradiente de campo elétrico cartesiano   | $\hat{\rho}$                  | Operador de densidade   |
| $W_0, W_1, W_2$            | Taxa de relaxação (probabilidades de transição por unidade de tempo) entre níveis de energia que diferem de 0, 1 e 2 (respectivamente) em $m_{tot}$ ; especialmente, mas não unicamente, para sistemas de dois núcleos de spin 1/2  | $\rho_{ij}$                   | Elemento da representação matricial de $\hat{\rho}$   |
| $W_{rs}$                   | Probabilidade de transição entre estados de spin $r$ e $s$  | $\sigma$                      | Tensor de blindagem (Ver notas 5 e 6)   |
|                            |   | $\sigma_j$                    | Constante de blindagem (isotrópica) do núcleo $j$ . Usualmente dada em ppm. Subscritos podem indicar alternativamente as contribuições para $\sigma$  |
|                            |   | $\sigma_{  }, \sigma_{\perp}$ | Componentes do tensor de blindagem $\sigma$ paralelo ou perpendicular ao eixo de simetria (caso de simetria axial) (Ver nota 5)   |
| <b>(ii) Alfabeto Grego</b> |   | $\hat{\sigma}$                | Operador de densidade reduzida  |
| $\alpha$                   | Função de onda de spin nuclear (auto função de $\hat{I}_{jz}$ ) para o estado $m_I = +1/2$ de um núcleo de spin 1/2   | $\tau$                        | (i) Tempo entre pulsos de radiofrequência (símbolo geral); (ii) tempo de vida usado em RMN dinâmica   |
| $\alpha_E$                 | Ângulo de Ernst (para sensibilidade ótima).   | $\tau_c$                      | Tempo de correlação para movimentos a nível molecular, especialmente para movimento molecular isotrópico  |
| $\beta$                    | Função de onda de spin nuclear (auto função de $\hat{I}_{jz}$ ) para o estado $m_I = -1/2$ de um núcleo de spin 1/2   | $\tau_d$                      | Tempo de amostragem entre dois pontos sucessivos do decaimento livre induzido   |
| $\gamma_X$                 | Razão (ou constante) magnetogírica do núcleo X  | $\tau_{null}$                 | Tempo de recuperação suficiente para proporcionar sinal nulo após um pulso de 180°  |
| $\delta_X$                 | Deslocamento químico (para a ressonância) do núcleo de um elemento X (positivo quando a amostra experimenta ressonância em frequências maiores que a referência). Usualmente em ppm (Ver Nota 3). Outras informações relativas a solvente, referências ou núcleo de interesse | $\tau_p$                      | Duração do pulso  |
|                            |   | $\tau_{sc}$                   | Tempo de correlação para relaxação pelo mecanismo escalar   |
|                            |   | $\tau_{sr}$                   | Tempo de correlação para relaxação por rotação de spin  |

|  |   |
|--|---|
| $\tau_{\parallel}, \tau_{\perp}$         | Tempos de correlação para o movimento molecular paralelo ou perpendicular aos eixos de simetria (caso de simetria axial)  |
| $\chi$                                   | (i) Susceptibilidade magnética (Ver nota 7);(ii) constante de acoplamento quadrupolar nuclear ( $\chi=e^2q_{zz} Q/h$ )  |
| $\omega_j, \omega_0, \omega_1, \omega_2$ | O mesmo que $\nu_j, \nu_0, \nu_1, \nu_2$ , porém para frequências angulares   |
| $\Omega$                                 | Abrangência de um tensor  |
| $\Omega_1, \Omega_2$                     | Campos magnéticos de radiofrequência, expressos em unidades de frequência angular de um núcleo de razão magnetogrfica $\gamma$ ( $\Omega_1 = -\gamma B_1, \Omega_2 = -\gamma B_2$ ) |

#### Notas:

1 - Notar que uma certa confusão pode surgir à medida que uma expansão alfabética é usada para  $D$  e que sua definição inclui um termo  $D$  que não é a constante de acoplamento dipolar.

2 -  $M$  em vez de  $m$  é freqüentemente recomendado, mas a maioria dos usuários de RMN utiliza para evitar confundir com magnetização.

3 - Embora nas recomendações preliminares da IUPAC<sup>1,2</sup> a definição de  $\delta$  requeria que a "unidade" ppm não apareça quando são apresentados valores, este fato é amplamente ignorado e uma recomendação para alterá-las está no momento sob consideração.

4 -  $\zeta = 2\Delta\sigma/3$

5 - Os símbolos  $\sigma$  (e termos correlatos para os componentes),  $\sigma_j, \sigma_{\parallel}, \sigma_{\perp}$  devem se referir à blindagem em uma escala absoluta (em trabalhos teóricos). Para blindagem relativa a uma referência, símbolos como  $\sigma_{\parallel} - \sigma_{ref}$  devem ser usados.

6 - Para tensores, subscritos duplos e com letras *maiúsculas* X, Y e Z devem ser geralmente usados para componentes principais. Ex.:  $\sigma_{XX}, \sigma_{YY}$  e  $\sigma_{ZZ}$  para blindagem. Alternativamente, subscritos numéricos podem ser usados (Ex.:  $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$ ).

7 - O símbolo  $\kappa$  pode também ser usado para susceptibilidade magnética, sendo  $\chi$  reservado para unidades não racionalizadas.

### C - RECOMENDAÇÕES DA IUPAC

Abaixo estão listadas as recomendações dos dois artigos publicados anteriormente pela IUPAC<sup>1,2</sup> em RMN, que tratam de deslocamentos químicos (incluindo apresentação de espectros) além de outras. Essas recomendações são relativas à notação e são particularmente dirigidas às publicações em revistas de química.

1. O núcleo que origina o espectro em análise deve ser sempre especificado explicitamente por extenso ou abreviado (ex.: RMN de <sup>10</sup>B ou RMN de boro-10). O número de massa do isótopo deve ser dado, exceto nos casos em que não há ambigüidade. No caso da RMN de hidrogênio o uso de fato é RMN de hidrogênio, RMN de deutério ou RMN de trítio, apesar da inconsistência da notação. Abreviações tais como RMP para designar RMN de próton não são recomendadas. No termo RMN multinuclear a palavra "nuclear" fica repetida e portanto, é também desaconselhado. Quando for necessário se referir a vários núcleos, deve-se escrever por extenso ressonância magnética multinuclear.
2. A apresentação gráfica do espectro deve mostrar o aumento da frequência para a esquerda na horizontal e o aumento de intensidade na vertical.
3. A escala adimensional para deslocamentos químicos deve estar ligada a uma referência, que deve ser claramente apresentada. Os procedimentos utilizados devem ser cuidadosamente definidos.

4. O fator da escala adimensional para deslocamento químico deve ser em partes por milhão, para o qual ppm é a abreviação apropriada. A radiofrequência da referência, apropriada ao núcleo em questão e ao espectrômetro usado, deve sempre ser apresentada com bastante exatidão em relação aos valores numéricos dos deslocamentos listados. Infelizmente, os *softwares* fornecidos pelos fabricantes para converter unidades de frequência para ppm em RMN com Transformada de Fourier, usam, às vezes, a frequência portadora no denominador, em vez da verdadeira frequência da referência, o que pode ocasionar erros significativos.

5. A escala de deslocamento químico deve ser definida em relação às frequências de ressonância, com a conversão de sinal apropriada (isto é, sinal positivo deve implicar que a amostra sofre ressonância em frequência maior que a referência). A fim de evitar ambigüidades de sinal, o termo "deslocamento químico" não deve ser usado para descrever variações na blindagem.

6. O símbolo  $\delta$  (delta grego) deve ser usado para escalas de deslocamentos químicos com a convenção de sinal dada acima. Tal símbolo não deve nunca ser usado para se referir a blindagem. Estas recomendações estão coerentes com a definição da escala  $\delta$  adotada nas referências 1 e 2. Embora as recomendações anteriores sugiram que os valores numéricos de deslocamentos, medidos nestas escalas, não incluam o termo ppm (isto é  $\delta = 5,00$  e não  $\delta = 5,00$  ppm), esta convenção é simplesmente ignorada. Estamos portanto, recomendando abaixo, que a unidade apropriada de deslocamento químico (usualmente ppm) seja incluída, porém, com a definição revisada de modo a estar em conformidade com as convenções IUPAC.

Assim, recomenda-se para estar de acordo com o que vem sendo praticado que a escala  $\delta$  do núcleo X seja definida por:

$$\delta_x, \text{ amostra} = \left( \frac{\nu_x, \text{ amostra} - \nu_x, \text{ referência}}{\nu_x, \text{ referência}} \right) \quad (1)$$

e que a notação ppm apareça com o valor numérico apropriado, quando relevante. Esta definição pode ser alternativamente escrita:

$$\delta_x, \text{ amostra} / \text{ppm} = \left( \frac{\nu_x, \text{ amostra} - \nu_x, \text{ referência}}{\nu_x, \text{ referência}} \right) \times 10^6 \quad (2)$$

ou

$$\delta_x, \text{ amostra} / \text{ppm} = \left( \frac{\nu_x, \text{ amostra} - \nu_x, \text{ referência} / \text{Hz}}{\nu_x, \text{ referência} / \text{MHz}} \right) \quad (3)$$

Esta redefinição (Equação (1) ou as alternativas (2) e (3)) permite que valores possam ser escritos em ppb (como é apropriado para alguns efeitos de isótopos) ou % (relevante para alguns deslocamentos de metais pesados), ou ainda em ppm (que sem dúvida alguma permanecerá como o uso mais comum).

7. O núcleo em questão deve ser indicado subscrito ou entre parênteses, ex.:  $\delta_C$  ou  $\delta(^{13}\text{C})$ , a menos que não haja ambigüidade.
8. Tanto quanto possível, a informação completa deve ser fornecida nas publicações em relação a qualquer parâmetro que possa influenciar nos deslocamentos químicos, tais como: (1) Estado físico da amostra, isto é, sólido, líquido, solução ou gás, e outros fatos adicionais relevantes, quando necessário.

Tabela 1. Propriedades de spin dos núcleos de spin 1/2<sup>a</sup>.

| Isótopo <sup>b</sup>           | Abundância Natural, <sup>c</sup><br>C % | Momento Magnético, <sup>d</sup><br>$\mu/\mu_N$ | Razão Magnetográfica, <sup>d</sup><br>$\gamma/10^7 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | Frequência de RMN, <sup>e</sup><br>$\Xi/\text{MHz}$ | Composto de Referência             | Condições da amostra <sup>f</sup>      | Receptividade Relativa <sup>g</sup> |                         |
|--------------------------------|---|--|---|---|------------------------------------|--|-------------------------------------|-------------------------|
|                                |   |  |   |   |                                    |  | D <sup>p</sup>                      | D <sup>c</sup>          |
| <sup>1</sup> H                 | 99,985                                  | 4,837353570                                    | 26,7522128  | 100,000000 <sup>h</sup>                             | Me <sub>4</sub> Si                 | (i)                                    | 1,000                               | 5,71 x 10 <sup>3</sup>  |
| <sup>3</sup> H <sup>j</sup>    | -                                       | 5,159714367                                    | 28,5349779  | 106,663974  | Me <sub>4</sub> Si-t <sub>1</sub>  | (k)                                    | -                                   | -                       |
| <sup>3</sup> He                | 1,37 x 10 <sup>-4</sup>                 | -3,685154336                                   | -20,3801587   | 76,178965   | He                                 | gás                                    | 6,06 x 10 <sup>-7</sup>             | 3,46 x 10 <sup>-3</sup> |
| <sup>13</sup> C                | 1,10                                    | 1,216613                                       | 6,728284  | 25,145004   | Me <sub>4</sub> Si                 | CDCl <sub>3</sub> , 27m                | 1,75 x 10 <sup>-4</sup>             | 1,00                    |
| <sup>15</sup> N                | 0,366                                   | -0,49049746                                    | -2,71261804   | 10,136783   | MeNO <sub>2</sub>                  | CDCl <sub>3</sub> (l)                  | 3,82 x 10 <sup>-6</sup>             | 2,18 x 10 <sup>-2</sup> |
| <sup>19</sup> F                | 100                                     | 4,553333                                       | 25,18148  | 94,094000   | CCl <sub>3</sub> F                 | (k)                                    | 0,834                               | 4,77 x 10 <sup>3</sup>  |
| <sup>29</sup> Si               | 4,67                                    | -0,96179                                       | -5,3190   | 19,867187   | Me <sub>4</sub> Si                 | CDCl <sub>3</sub> , 27m                | 3,67 x 10 <sup>-4</sup>             | 2,10                    |
| <sup>31</sup> P                | 100                                     | 1,95999  | 10,8394   | 40,480737   | H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>     | (k)                                    | 0,0665                              | 3,80 x 10 <sup>2</sup>  |
| <sup>57</sup> Fe               | 2,2                                     | 0,1569636                                      | 0,8680624   | 3,237778  | Fe(CO) <sub>5</sub>                | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (m)      | 7,52 x 10 <sup>-7</sup>             | 4,30 x 10 <sup>-3</sup> |
| <sup>77</sup> Se               | 7,63                                    | 0,92677577                                     | 5,1253857   | 19,071535   | Me <sub>2</sub> Se                 | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 5,37 x 10 <sup>-4</sup>             | 3,07                    |
| <sup>89</sup> Y                | 100                                     | -0,23801049                                    | -1,3162791  | 4,900200  | Y(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>   | H <sub>2</sub> O/ D <sub>2</sub> O (n) | 1,19 x 10 <sup>-4</sup>             | 0,681                   |
| <sup>103</sup> Rh              | 100                                     | -0,1531  | -0,8468   | 3,186447 <sup>o,p,q</sup>                           | Rh(acac) <sub>3</sub>              | CDCl <sub>3</sub> , sat.               | 3,17 x 10 <sup>-5</sup>             | 0,181                   |
| ( <sup>107</sup> Ag)           | 51,839                                  | -0,19689893                                    | -1,0889181  | 4,047819 <sup>p</sup>                               | AgNO <sub>3</sub>                  | D <sub>2</sub> O, sat.                 | 3,50 x 10 <sup>-5</sup>             | 0,200                   |
| <sup>109</sup> Ag              | 48,161                                  | -0,22636279                                    | -1,2518634  | 4,653533 <sup>p</sup>                               | AgNO <sub>3</sub>                  | D <sub>2</sub> O, sat.                 | 4,94 x 10 <sup>-5</sup>             | 0,282                   |
| ( <sup>111</sup> Cd)           | 12,80                                   | -1,0303729                                     | -5,6983131  | 21,215478   | CdMe <sub>2</sub>                  | puro                                   | 1,24 x 10 <sup>-3</sup>             | 7,07                    |
| <sup>113</sup> Cd <sup>r</sup> | 12,22                                   | -1,0778568                                     | -5,9609153  | 22,193173   | CdMe <sub>2</sub>                  | puro                                   | 1,35 x 10 <sup>-3</sup>             | 7,72                    |
| ( <sup>115</sup> Sn)           | 0,34                                    | -1,5915  | -8,8013   | 32,718746   | Me <sub>4</sub> Sn                 | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 1,21 x 10 <sup>-4</sup>             | 0,694                   |
| ( <sup>117</sup> Sn)           | 7,68                                    | -1,73385                                       | -9,58879  | 35,632256   | Me <sub>4</sub> Sn                 | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 3,54 x 10 <sup>-3</sup>             | 20,2                    |
| <sup>119</sup> Sn              | 8,59                                    | -1,81394                                       | -10,0317  | 37,290629   | Me <sub>4</sub> Sn                 | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 4,53 x 10 <sup>-3</sup>             | 25,9                    |
| ( <sup>123</sup> Te)           | 0,908                                   | -1,276431                                      | -7,059098   | 26,169765   | Me <sub>2</sub> Te                 | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 1,67 x 10 <sup>-4</sup>             | 0,953                   |
| <sup>125</sup> Te              | 7,139                                   | -1,5389360                                     | -8,5108404  | 31,549786   | Me <sub>2</sub> Te                 | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 2,30 x 10 <sup>-3</sup>             | 13,1                    |
| <sup>129</sup> Xe              | 26,4                                    | -1,347494                                      | -7,452103   | 27,811005 <sup>s,p,t</sup>                          | XeOF <sub>4</sub>                  | puro                                   | 5,71 x 10 <sup>-3</sup>             | 32,6                    |
| <sup>183</sup> W               | 14,3                                    | 0,20400919                                     | 1,1282403   | 4,166398  | Na <sub>2</sub> WO <sub>4</sub>    | D <sub>2</sub> O, 1M                   | 1,07 x 10 <sup>-5</sup>             | 6,13 x 10 <sup>-2</sup> |
| <sup>187</sup> Os              | 1,6                                     | 0,1119804                                      | 0,6192895   | 2,282331  | OsO <sub>4</sub>                   | CCl <sub>4</sub> , 0,98M               | 1,99 x 10 <sup>-7</sup>             | 1,13 x 10 <sup>-3</sup> |
| <sup>195</sup> Pt              | 33,8                                    | 1,0557   | 5,8385  | 21,496750 <sup>o,p</sup>                            | [PtCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup> | D <sub>2</sub> O, 1,2M                 | 3,51 x 10 <sup>-3</sup>             | 20,1                    |
| <sup>199</sup> Hg              | 16,87                                   | 0,87621937                                     | 4,8457916   | 17,910323   | Me <sub>2</sub> Hg <sup>u</sup>    | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 1,00 x 10 <sup>-3</sup>             | 5,73                    |
| ( <sup>203</sup> Tl)           | 29,524                                  | 2,80983305                                     | 15,5393338  | 57,123200 <sup>v</sup>                              | Tl(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>  | q (k)                                  | 0,0578                              | 3,31 x 10 <sup>2</sup>  |
| <sup>205</sup> Tl              | 70,476                                  | 2,83747094                                     | 15,6921808  | 57,633833 <sup>p</sup>                              | Tl(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>  | q (k)                                  | 0,142                               | 8,13 x 10 <sup>2</sup>  |
| <sup>207</sup> Pb              | 22,1                                    | 1,00906  | 5,58046   | 20,920597   | Me <sub>4</sub> Pb                 | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> (l)      | 2,01 x 10 <sup>-3</sup>             | 11,5                    |

(a) Uma lista completa de núcleos estáveis mas, excluindo os lantanídeos, os actinídeos e a maioria dos isótopos radioativos. (b) Núcleos entre parênteses não são considerados os mais favoráveis dos elementos para estudos por RMN. (c) Dados da Ref. 4 p. 98 - 104. Para limites de erros ver Ref. 4. (d) Dados provenientes da compilação da Ref. 4 p. 98 - 104, que lista valores de  $\mu_{max}/\mu_N = \gamma \hbar / \mu_N$ . Para limites de erros ver Ref. 4. (e) Frequência de ressonância num campo magnético tal que os hidrogênios do TMS entram em ressonância exatamente em 100 MHz. Os valores escritos são para as ressonâncias dos compostos de referência listados na coluna seguinte e são tirados de uma compilação feita por Granger<sup>5</sup>. Frequentemente, uma pequena quantidade de solvente deuterado (ex.: C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>) será incluída para fornecer uma trancagem (*lock*) do campo magnético com a frequência do deutério, mas nem sempre isto está especificado nesta coluna. (f) M≡Molaridade em mol dm<sup>-3</sup> (solução); m≡molalidade em mol kg<sup>-1</sup> (solvente). (g) D<sup>p</sup> é a receptividade relativa à do <sup>1</sup>H enquanto D<sup>c</sup> é relativa ao <sup>13</sup>C. (h) Por definição. (i) Resultados obtidos pela Ref.6 onde usaram uma concentração de 3,62M. (j) Radioativo (meia-vida 12 anos). (k) Ver referências 7, 8, 9, 10 respectivamente para <sup>3</sup>H, <sup>19</sup>F, <sup>31</sup>P e <sup>205</sup>Tl. (l) Uma gota. (m) Amostra 80/20 v/v em C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>. (n) Solução de H<sub>2</sub>O/ D<sub>2</sub>O, concentração não reportada. (o) Alternativamente, os valores exatos: 3,160000 MHz e 21,400000 têm sido sugeridos<sup>11</sup> como as referências para <sup>103</sup>Rh e <sup>195</sup>Pt, respectivamente. (p) Valor revisado do encontrado na Enciclopédia (Ref.12). (q) Sujeito a variações consideráveis com a temperatura. (r) Isótopo radioativo de vida longa. (s) Valor modificado por P. Granger para o da Ref. 13. (t) Calculado a partir da Ref. 13 usando informação da Ref. 14. (u) A elevada toxidez deste composto não recomenda sua utilização. (v) Deduzido das referências 15 e 10.

Tabela 2. Propriedades de spin dos núcleos quadrupolares<sup>a</sup>.

| Isótopo <sup>b</sup>            | Spin <sup>c</sup> | Abundância Natural <sup>c</sup><br>C(%) | Momento Magnético <sup>d</sup><br>$\mu/\mu_N$ | Razão Giromagnética <sup>d</sup><br>$\gamma/10^7 \text{ radT}^{-1}\text{s}^{-1}$ | Momento de Quadrupolo <sup>e</sup><br>$Q/\text{Barn}$ | Frequência de RMN <sup>f</sup><br>$\Xi/\text{MHz}$ | Composto de Referência  | Condições da amostra <sup>g</sup> | Fator de largura de linha <sup>h</sup> ,<br>$10^{56} \text{ l/m}^4$ | Receptividade relativa <sup>i</sup> |                       |
|---------------------------------|-------------------|---|---|--|---|--|---|-----------------------------------|---|-------------------------------------|-----------------------|
|                                 |                   |   |   |  |   |  |   |                                   |   | $D^p$                               | $D^c$                 |
| <sup>2</sup> Hj                 | 1                 | 0,015                                   | 1,21260077                                    | 4,10662791   | $2,860 \times 10^{-3}$                                | 15,350608  | (CD <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> Si                            | puro                              | $4,1 \times 10^{-5}$  | $1,45 \times 10^{-6}$               | $8,27 \times 10^{-3}$ |
| <sup>6</sup> Li                 | 1                 | 7,5                                     | 1,1625637                                     | 3,9371709  | $-8,2 \times 10^{-4}$                                 | 14,716105  | LiCl  | D <sub>2</sub> O, 9,7m            | $3,4 \times 10^{-6}$  | $6,38 \times 10^{-4}$               | 3,64                  |
| <sup>7</sup> Li                 | 3/2               | 92,5                                    | 4,20407505                                    | 10,3977013   | $-4,01 \times 10^{-2}$                                | 38,863786  | LiCl  | D <sub>2</sub> O, 9,7m            | $2,1 \times 10^{-3}$  | 0,272                               | $1,55 \times 10^3$    |
| <sup>9</sup> Be                 | 3/2               | 100                                     | -1,520136                                     | 3,759666   | $5,288 \times 10^{-2}$                                | 14,051819 <sup>k</sup>                             | BeSO <sub>4</sub>   | D <sub>2</sub> O, 0,43m           | $3,7 \times 10^{-3}$  | $1,39 \times 10^{-2}$               | 79,3                  |
| <sup>10</sup> B                 | 3                 | 19,9                                    | 2,0792055                                     | 2,8746786  | $8,459 \times 10^{-2}$                                | 10,743657  | BF <sub>3</sub> .Et <sub>2</sub> O                            | CDCl <sub>3</sub> (l)             | $1,4 \times 10^{-3}$  | $3,95 \times 10^{-3}$               | 22,6                  |
| <sup>11</sup> B                 | 3/2               | 80,1                                    | 3,4710308                                     | 8,5847044  | $4,059 \times 10^{-2}$                                | 32,083971 <sup>k</sup>                             | BF <sub>3</sub> .Et <sub>2</sub> O                            | CDCl <sub>3</sub> (l)             | $2,2 \times 10^{-3}$  | 0,132                               | $7,56 \times 10^2$    |
| <sup>14</sup> Nj                | 1                 | 99,634                                  | 0,57100428                                    | 1,9337792  | $2,01 \times 10^{-2}$                                 | 7,226329   | CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>                               | puro (m)                          | $2,0 \times 10^{-3}$  | $1,00 \times 10^{-3}$               | 5,73                  |
| <sup>17</sup> O                 | 5/2               | 0,038                                   | -2,24077                                      | -3,62808   | $-2,558 \times 10^{-2}$                               | 13,556429  | D <sub>2</sub> O  | puro                              | $2,1 \times 10^{-4}$  | $1,11 \times 10^{-5}$               | $6,32 \times 10^{-2}$ |
| <sup>21</sup> Ne                | 3/2               | 0,27                                    | -0,854376                                     | -2,11308   | 0,10155   | 7,894530 <sup>k, n</sup>                           | Ne  | gás                               | $1,4 \times 10^{-2}$  | $6,65 \times 10^{-6}$               | $3,80 \times 10^{-2}$ |
| <sup>23</sup> Na                | 3/2               | 100                                     | 2,8629811                                     | 7,0808493  | 0,1006  | 26,451919 <sup>k</sup>                             | NaBr  | D <sub>2</sub> O, 9,9m            | $1,3 \times 10^{-2}$  | $9,27 \times 10^{-2}$               | $5,30 \times 10^2$    |
| <sup>25</sup> Mg                | 5/2               | 10,00                                   | -1,01220                                      | -1,63887   | 0,1994  | 6,121642   | MgCl <sub>2</sub>   | D <sub>2</sub> O, 15m             | $1,3 \times 10^{-2}$  | $2,68 \times 10^{-4}$               | 1,53                  |
| <sup>27</sup> Al                | 5/2               | 100                                     | 4,3086865                                     | 6,9762715  | 0,1403  | 26,056888  | Al(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>                             | D <sub>2</sub> O, 1,1m            | $6,3 \times 10^{-3}$  | 0,207                               | $1,18 \times 10^3$    |
| <sup>33</sup> S                 | 3/2               | 0,75                                    | 0,8311696                                     | 2,055685   | $-6,78 \times 10^{-2}$                                | 7,67019 <sup>k</sup>                               | (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>               | D <sub>2</sub> O, sat.            | $6,1 \times 10^{-3}$  | $1,70 \times 10^{-5}$               | $9,72 \times 10^{-2}$ |
| <sup>35</sup> Cl                | 3/2               | 75,77                                   | 1,061035                                      | 2,624198   | $-8,11 \times 10^{-2}$                                | 9,797930   | KCl   | D <sub>2</sub> O, 2,2m            | $8,8 \times 10^{-2}$  | $3,58 \times 10^{-3}$               | 20,4                  |
| <sup>37</sup> Cl                | 3/2               | 24,23                                   | 0,8831998                                     | 2,184368   | $-6,39 \times 10^{-2}$                                | 8,155763   | KCl   | D <sub>2</sub> O, 2,2m            | $5,4 \times 10^{-3}$  | $6,60 \times 10^{-4}$               | 3,77                  |
| <sup>39</sup> K                 | 3/2               | 93,2581                                 | 0,50543376                                    | 1,2500608  | $5,9 \times 10^{-2}$                                  | 4,666423   | KI  | D <sub>2</sub> O, 3,8m            | $4,6 \times 10^{-3}$  | $4,76 \times 10^{-4}$               | 2,72                  |
| ( <sup>40</sup> K)              | 4                 | 0,0117                                  | -1,4513203                                    | -1,5542854   | $-7,3 \times 10^{-2}$                                 | 5,801987 <sup>k, o</sup>                           | KI  | D <sub>2</sub> O                  | $6,12 \times 10^{-7}$   | $3,50 \times 10^{-3}$               |                       |
| ( <sup>41</sup> K)              | 3/2               | 6,7302                                  | 0,27739609                                    | 0,68606808   | $7,2 \times 10^{-2}$                                  | 2,561332 <sup>p</sup>                              | KI  | D <sub>2</sub> O                  | $6,9 \times 10^{-3}$  | $5,68 \times 10^{-6}$               | $3,24 \times 10^{-2}$ |
| <sup>43</sup> Ca                | 7/2               | 0,135                                   | -1,494067                                     | -1,803069  | $-4,09 \times 10^{-2}$                                | 6,729996 <sup>q</sup>                              | CaCl <sub>2</sub>   | D <sub>2</sub> O                  | $2,3 \times 10^{-4}$  | $8,68 \times 10^{-6}$               | $4,96 \times 10^{-2}$ |
| <sup>45</sup> Sc                | 7/2               | 100                                     | 5,3933489                                     | 6,5087973  | -0,22   | 24,291700  | ScCl <sub>3</sub>   | D <sub>2</sub> O, 1M              | $6,6 \times 10^{-3}$  | 0,302                               | $1,73 \times 10^3$    |
| <sup>47</sup> Ti                | 5/2               | 7,3                                     | -0,93294                                      | -1,5105  | 0,29  | 5,637583   | TiCl <sub>4</sub>   | puro                              | $2,7 \times 10^{-2}$  | $1,53 \times 10^{-4}$               | 0,867                 |
| <sup>49</sup> Ti                | 7/2               | 5,5                                     | -1,25201                                      | -1,51095   | 0,24  | 5,639091   | TiCl <sub>4</sub>   | puro                              | $7,8 \times 10^{-3}$  | $2,08 \times 10^{-4}$               | 1,19                  |
| ( <sup>50</sup> V) <sup>r</sup> | 6                 | 0,250                                   | 3,6137570                                     | 2,6706490  | 0,209   | 9,970314   | VOCl <sub>3</sub>   | puro (s)                          | $1,7 \times 10^{-3}$  | $1,39 \times 10^{-4}$               | 0,796                 |
| <sup>51</sup> V                 | 7/2               | 99,750                                  | 5,8380835                                     | 7,0455117  | $-5,2 \times 10^{-2}$                                 | 26,302961  | VOCl <sub>3</sub>   | puro (s)                          | $3,7 \times 10^{-4}$  | 0,383                               | $2,19 \times 10^3$    |
| <sup>53</sup> Cr                | 3/2               | 9,501                                   | -0,61263                                      | -1,5152  | -0,15   | 5,652510 <sup>k</sup>                              | (NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> CrO <sub>4</sub>              | D <sub>2</sub> O, 1M              | $3,0 \times 10^{-2}$  | $8,63 \times 10^{-5}$               | 0,493                 |
| <sup>55</sup> Mn                | 5/2               | 100                                     | 4,1042437                                     | 6,6452546  | 0,33  | 24,789060  | KMnO <sub>4</sub>   | D <sub>2</sub> O, 0,82m           | $3,5 \times 10^{-2}$  | 0,179                               | $1,02 \times 10^3$    |
| <sup>59</sup> Co                | 7/2               | 100                                     | 5,247   | 6,332  | 0,404   | 23,727072  | K <sub>3</sub> [Co(CN) <sub>6</sub> ]                         | D <sub>2</sub> O, 0,56m           | $2,2 \times 10^{-2}$  | 0,278                               | $1,59 \times 10^3$    |
| <sup>61</sup> Ni                | 3/2               | 1,140                                   | -0,96827                                      | -2,3948  | 0,162   | 8,936050   | Ni(CO) <sub>4</sub>   | puro                              | $3,5 \times 10^{-2}$  | $4,09 \times 10^{-5}$               | 0,234                 |
| <sup>63</sup> Cu                | 3/2               | 69,17                                   | 2,8754908                                     | 7,1117890  | -0,211  | 26,515471 <sup>k</sup>                             | [Cu(CH <sub>3</sub> CN) <sub>4</sub> ]<br>[ClO <sub>4</sub> ] | CH <sub>3</sub> CN, sat(t)        | $5,9 \times 10^{-2}$  | $6,50 \times 10^{-2}$               | $3,71 \times 10^2$    |
| <sup>65</sup> Cu                | 3/2               | 30,83                                   | 3,07465                                       | 7,60435  | -0,195  | 28,403658  | [Cu(CH <sub>3</sub> CN) <sub>4</sub> ]<br>[ClO <sub>4</sub> ] | CH <sub>3</sub> CN, sat(t)        | $5,1 \times 10^{-2}$  | $3,54 \times 10^{-2}$               | $2,02 \times 10^2$    |
| <sup>67</sup> Zn                | 5/2               | 4,1                                     | 1,035556                                      | 1,676688   | 0,150   | 6,256819   | Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>                             | D <sub>2</sub> O, sat.            | $7,2 \times 10^{-3}$  | $1,18 \times 10^{-4}$               | 0,673                 |
| ( <sup>69</sup> Ga)             | 3/2               | 60,108                                  | 2,603405                                      | 6,438855   | 0,168   | 24,001253  | Ga(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>                             | D <sub>2</sub> O, 1,1m            | $3,8 \times 10^{-2}$  | $4,19 \times 10^{-2}$               | $2,39 \times 10^2$    |
| <sup>71</sup> Ga                | 3/2               | 39,892                                  | 3,307871                                      | 8,181171   | 0,106   | 30,496576  | Ga(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>                             | D <sub>2</sub> O, 1,1m            | $1,5 \times 10^{-2}$  | $5,71 \times 10^{-2}$               | $3,26 \times 10^2$    |
| <sup>73</sup> Ge                | 9/2               | 7,73                                    | -0,9722881                                    | -0,9360303   | -0,173  | 3,488315 <sup>u</sup>                              | (CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> Ge                            | puro                              | $2,2 \times 10^{-3}$  | $1,09 \times 10^{-4}$               | 0,624                 |
| <sup>75</sup> As                | 3/2               | 100                                     | 1,858354                                      | 4,596163   | 0,314   | 17,122710  | NaAsF <sub>6</sub>  | CH <sub>3</sub> CN(v)             | 0,13  | $2,54 \times 10^{-2}$               | $1,45 \times 10^2$    |
| ( <sup>79</sup> Br)             | 3/2               | 50,69                                   | 2,719351                                      | 6,725616   | 0,331   | 25,054452  | NaBr  | D <sub>2</sub> O, 9,9m            | 0,15  | $4,03 \times 10^{-2}$               | $2,30 \times 10^2$    |
| <sup>81</sup> Br                | 3/2               | 49,31                                   | 2,931283                                      | 7,249776   | 0,276   | 27,007026  | NaBr  | D <sub>2</sub> O, 9,9m            | 0,10  | $4,91 \times 10^{-2}$               | $2,80 \times 10^2$    |
| <sup>83</sup> Kr                | 9/2               | 11,5                                    | -1,07311                                      | -1,03310   | 0,253   | 3,847600 <sup>k, w</sup>                           | Kr  | gás                               | $4,7 \times 10^{-3}$  | $2,19 \times 10^{-4}$               | 1,25                  |
| ( <sup>85</sup> Rb)             | 5/2               | 72,165                                  | 1,6013071                                     | 2,5927050  | 0,228   | 9,655172   | RbCl  | D <sub>2</sub> O, 5,7m            | $1,7 \times 10^{-2}$  | $7,66 \times 10^{-3}$               | 43,8                  |
| <sup>87</sup> Rb <sup>r</sup>   | 3/2               | 27,835                                  | 3,552582                                      | 8,786400   | 0,132   | 32,721215  | RbCl  | D <sub>2</sub> O, 5,7m            | $2,3 \times 10^{-2}$  | $4,93 \times 10^2$                  | $2,82 \times 10^2$    |
| <sup>87</sup> Sr                | 9/2               | 7,00                                    | -1,2090236                                    | -1,1639376   | 0,335   | 4,333800   | SrCl <sub>2</sub>   | D <sub>2</sub> O, 0,5M            | $8,3 \times 10^{-3}$  | $1,90 \times 10^{-4}$               | 1,09                  |

Cont. Tabela 2.

| Isótopo <sup>b</sup>           | Spin <sup>c</sup> | Abundância Natural <sup>c</sup><br>C(%) | Momento Magnético <sup>d</sup><br>$\mu/\mu_N$ | Razão Giromagnética <sup>d</sup><br>$\gamma/10^7 \text{ radT}^{-1}\text{s}^{-1}$ | Momento de Quadrupolo <sup>e</sup><br>$Q/\text{Barn}$ | Frequência de RMN <sup>f</sup><br>$\Xi/\text{MHz}$ | Composto de Referência  | Condições da amostra <sup>g</sup>          | Fator de largura de linha <sup>h</sup> ,<br>$10^{56} \ell/\text{m}^4$ | Receptividade relativa <sup>i</sup> |                       |
|--------------------------------|-------------------|---|---|--|---|--|---|--|---|-------------------------------------|-----------------------|
|                                |                   |   |   |  |   |  |   |  |   | $D^p$                               | $D^c$                 |
| <sup>91</sup> Zr               | 5/2               | 11,22                                   | -1,54246                                      | -2,49743   | -0,206  | 9,296297   | Zr(C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> | CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> , sat. (x) | $1,4 \times 10^{-2}$  | $1,07 \times 10^{-3}$               | 6,09                  |
| <sup>93</sup> Nb               | 9/2               | 100                                     | 6,8217  | 6,5674   | -0,32   | 24,476193  | K[NbCl <sub>6</sub> ]   | CH <sub>3</sub> CN                         | $7,6 \times 10^{-3}$  | 0,488                               | $2,79 \times 10^3$    |
| <sup>95</sup> Mo               | 5/2               | 15,92                                   | -1,082  | -1,751   | $2,2 \times 10^{-2}$                                  | 6,516942   | Na <sub>2</sub> MoO <sub>4</sub>                                | sat. (y)                                   | $1,5 \times 10^{-4}$  | $5,21 \times 10^{-4}$               | 2,98                  |
| ( <sup>97</sup> Mo)            | 5/2               | 9,55                                    | -1,105  | -1,788   | 0,255   | 6,653711   | Na <sub>2</sub> MoO <sub>4</sub>                                | D <sub>2</sub> O, 2M(z)                    | $2,1 \times 10^{-3}$  | $3,33 \times 10^{-4}$               | 1,90                  |
| <sup>99</sup> Tc <sup>f</sup>  | 9/2               | -                                       | 6,281   | 6,046  | 0,3   | 22,508314  | NH <sub>4</sub> TcO <sub>4</sub>                                | D <sub>2</sub> O, 2M(z)                    | $6,7 \times 10^{-3}$  | -                                   | -                     |
| <sup>99</sup> Ru               | 5/2               | 12,7                                    | -0,7588                                       | -1,229   | $7,9 \times 10^{-2}$                                  | 4,605151   | K <sub>4</sub> [Ru(CN) <sub>6</sub> ]                           | D <sub>2</sub> O(A)                        | $2,0 \times 10^{-3}$  | $1,44 \times 10^{-4}$               | 0,821                 |
| <sup>101</sup> Ru              | 5/2               | 17,0                                    | -0,8505                                       | -1,377   | 0,457   | 5,161369   | K <sub>4</sub> [Ru(CN) <sub>6</sub> ]                           | D <sub>2</sub> O, 0,3M                     | $6,7 \times 10^{-2}$  | $2,71 \times 10^{-4}$               | 1,55                  |
| <sup>105</sup> Pd              | 5/2               | 22,33                                   | -0,760  | -1,23  | 0,660   | 4,576100   | K <sub>2</sub> PdCl <sub>6</sub>                                | D <sub>2</sub> O, 0,3M                     | 0,14  | $2,53 \times 10^{-4}$               | 1,45                  |
| ( <sup>113</sup> In)           | 9/2               | 4,3                                     | 6,1124  | 5,8845   | 0,799   | 21,865654  | In(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>                               | D <sub>2</sub> O, sat.                     | $4,7 \times 10^{-2}$  | $1,51 \times 10^{-2}$               | 86,3                  |
| <sup>115</sup> In <sup>f</sup> | 9/2               | 95,7                                    | 6,1256  | 5,8972   | 0,810   | 21,912525  | In(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>                               | D <sub>2</sub> O, 0,1M(B)                  | $4,9 \times 10^{-2}$  | 0,338                               | $1,93 \times 10^3$    |
| <sup>121</sup> Sb              | 5/2               | 57,36                                   | 3,9796  | 6,4435   | -0,36   | 23,930599  | KSbCl <sub>6</sub>  | D <sub>2</sub> O, 0,1M(B)                  | $4,1 \times 10^{-2}$  | $9,35 \times 10^{-2}$               | $5,34 \times 10^2$    |
| ( <sup>123</sup> Sb)           | 7/2               | 42,64                                   | 2,8912  | 3,4892   | -0,49   | 12,958902  | KSbCl <sub>6</sub>  | CH <sub>3</sub> CN                         | $3,3 \times 10^{-2}$  | $1,99 \times 10^{-2}$               | $1,14 \times 10^2$    |
| <sup>127</sup> I               | 5/2               | 100                                     | 3,328710                                      | 5,389573   | -0,78 <sup>k</sup>                                    | 20,008630  | KI  | sat. (y)                                   | 0,19  | $9,54 \times 10^{-2}$               | $5,45 \times 10^2$    |
| <sup>131</sup> Xe <sup>j</sup> | 3/2               | 21,2                                    | 0,8931899                                     | 2,209076   | -0,12   | 8,244885 <sup>k, c</sup>                           | XeOF <sub>4</sub>   | CH <sub>3</sub> CN                         | $1,9 \times 10^{-2}$  | $5,97 \times 10^{-4}$               | 3,41                  |
| <sup>133</sup> Cs              | 7/2               | 100                                     | 2,9277407                                     | 3,5332539  | $-3,71 \times 10^{-3}$                                | 13,116207  | CsNO <sub>3</sub>   | sat. (y)                                   | $1,9 \times 10^{-6}$  | $4,84 \times 10^{-2}$               | $2,76 \times 10^2$    |
| ( <sup>135</sup> Ba)           | 3/2               | 6,592                                   | 1,08178                                       | 2,67550  | 0,16  | 9,934414   | BaCl <sub>2</sub>   | D <sub>2</sub> O, 5,7m                     | $3,4 \times 10^{-2}$  | $3,30 \times 10^{-4}$               | 1,88                  |
| <sup>137</sup> Ba              | 3/2               | 11,23                                   | 1,21013                                       | 2,99295  | 0,245   | 11,112889  | BaCl <sub>2</sub>   | puro                                       | $8,0 \times 10^{-2}$  | $7,86 \times 10^{-4}$               | 4,49                  |
| <sup>138</sup> La <sup>f</sup> | 5                 | 0,0902                                  | 4,068095                                      | 3,557239   | 0,45  | 13,194267  | LaCl <sub>3</sub>   | D <sub>2</sub> O, 1,7m                     | $1,2 \times 10^{-2}$  | $8,48 \times 10^{-5}$               | 0,485                 |
| <sup>139</sup> La              | 7/2               | 99,9098                                 | 3,1556770                                     | 3,8083318  | 0,20  | 14,125605  | LaCl <sub>3</sub>   | D <sub>2</sub> O, 0,5M                     | $5,4 \times 10^{-3}$  | $6,05 \times 10^{-2}$               | $3,46 \times 10^2$    |
| <sup>177</sup> Hf              | 7/2               | 18,606                                  | 0,8997  | 1,086  | 3,365   | (4,007) <sup>k, n</sup>                            | -   | D <sub>2</sub> O, 0,5M                     | 1,5   | $2,61 \times 10^{-4}$               | 1,49                  |
| <sup>179</sup> Hf              | 9/2               | 13,629                                  | -0,7085                                       | -0,6821  | 3,793   | (2,517) <sup>k, n</sup>                            | -   | D <sub>2</sub> O/H <sub>2</sub> O(D)       | 1,1   | $7,46 \times 10^{-5}$               | 0,426                 |
| <sup>181</sup> Ta              | 7/2               | 99,988                                  | 2,6879  | 3,2438   | 3,28  | 11,989600  | KTaCl <sub>6</sub>  | D <sub>2</sub> O/H <sub>2</sub> O(D)       | 1,5   | $3,74 \times 10^{-2}$               | $2,14 \times 10^2$    |
| ( <sup>185</sup> Re)           | 5/2               | 37,40                                   | 3,7710  | 6,1057   | 2,18  | 22,524600 <sup>E</sup>                             | KReO <sub>4</sub>   | -  | 1,5   | $5,19 \times 10^{-2}$               | $2,96 \times 10^2$    |
| <sup>187</sup> Re <sup>k</sup> | 5/2               | 62,60                                   | 3,8096  | 6,1682   | 2,07  | 22,751600 <sup>E</sup>                             | KReO <sub>4</sub>   | -  | 1,4   | $8,95 \times 10^{-2}$               | $5,12 \times 10^2$    |
| <sup>189</sup> Os <sup>i</sup> | 3/2               | 16,1                                    | 0,851970                                      | 2,10713  | 0,856   | 7,765400   | OsO <sub>4</sub>  | CH <sub>3</sub> CN, sat.                   | 0,98  | $3,93 \times 10^{-4}$               | 2,25                  |
| ( <sup>191</sup> Ir)           | 3/2               | 37,3                                    | 0,1946  | 0,4812   | 0,816   | (1,718) <sup>k, n</sup>                            | -   | D <sub>2</sub> O                           | 0,89  | $1,09 \times 10^{-5}$               | $6,20 \times 10^{-2}$ |
| <sup>193</sup> Ir              | 3/2               | 62,7                                    | 0,2113  | 0,5227   | 0,751   | (1,871) <sup>k, n</sup>                            | -   | D <sub>2</sub> O                           | 0,75  | $2,34 \times 10^{-5}$               | 0,134                 |
| <sup>197</sup> Au              | 3/2               | 100                                     | 0,191271                                      | 0,473060   | 0,547   | (1,729) <sup>k, n</sup>                            | -   | CCl <sub>4</sub> , 0,98M                   | 0,29  | $2,77 \times 10^{-5}$               | 0,158                 |
| <sup>201</sup> Hg <sup>j</sup> | 3/2               | 13,18                                   | -0,7232483                                    | -1,788769  | 0,385   | 6,611400 <sup>F</sup>                              | (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> Hg <sup>G</sup>                 | puro                                       | 0,20  | $1,97 \times 10^{-4}$               | 1,13                  |
| <sup>209</sup> Bi <sup>f</sup> | 9/2               | 100                                     | 4,5444  | 4,3750   | -0,37   | 16,069287  | Bi(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>                               | D <sub>2</sub> O(H)                        | $1,0 \times 10^{-2}$  | 0,144                               | $8,25 \times 10^2$    |

(a) Excluindo os lantanídeos e os actinídeos. (b) Ver nota (b) da Tabela 1. (c) Dados da Ref. 4 p. 98 - 104. Para limites de erros, ver Ref. 4. (d) Dados provenientes da compilação da Ref. 4 p. 98 - 104, que lista valores de  $\mu_{\text{max}}/\mu_N = \gamma h / \mu_N$ . Para limites de erros ver Ref. 4. (e) Dados da Ref. 4 p. 98 - 104 (tomados majoritariamente das Ref. 16 e 17). Deve ser observado que valores relatados para  $Q$  devem conter erros de no máximo 20 a 30%. Para limites de erros ver Ref. 4. (f) Ver nota (e) da Tabela 1. (g) M=Molaridade em mol dm<sup>-3</sup> (solução); m=molalidade em mol kg<sup>-1</sup> (solvente). (h)  $\ell = (2I+3) Q^2 / I^2(2I-1)$  (Ref. 18). (i)  $D^p$  é a receptividade relativa à do <sup>1</sup>H, enquanto  $D^c$  é relativa ao <sup>13</sup>C. Os valores são dados com apenas três algarismos significativos. (j) Existe um isótopo com  $I=1/2$ . (k) Valor revisado do encontrado na Enciclopédia (Ref. 12). (l) 15% v/v a 21°C. (m) Com adição de uma gota de CDCl<sub>3</sub>. (n) Valores calculados a partir de dados de momentos magnéticos nucleares obtidos da literatura. (o) Deduzido de dados da Ref. 19. (p) Deduzido de uma razão obtida na Ref. 20. (q) Deduzido de uma razão obtida na Ref. 21. (r) Radioativo, com uma longa meia-vida. (s) Com adição de uma gota de C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>. (t) Contendo um pouco de C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>. (u) Com fatores de conversão aplicados por P. Granger. (v) Solução semi-saturada. (w) O dado obtido da Ref. 22 tem precisão de apenas 4 casas decimais. A proposta aqui é mostrar que  $\Xi(^{83}\text{Kr})$  está definido com as 6 casas decimais apresentadas na tabela. (x) Com adição de 10% de C<sub>6</sub>D<sub>6</sub> v/v. (y) Em CH<sub>3</sub>CN / CD<sub>3</sub>CN. (z) Com adição de pequena quantidade de NaOH.

(A) Solução semi-saturada em H<sub>2</sub>O/D<sub>2</sub>O. (B) Com adição de 0,5M de DNO<sub>3</sub>. (C) Calculado a partir do valor de <sup>129</sup>Xe, medido por P. Granger em uma amostra de Xe gás, através da razão de frequências entre <sup>129</sup>Xe/<sup>131</sup>Xe. (D) Para as condições da solução, ver Ref. 23. (E) A proposta aqui é definir o valor até a sexta casa decimal, mas as larguras de linha são de tal ordem que este número não é necessariamente preciso. (F) Deduzido a partir da razão <sup>201</sup>Hg/<sup>199</sup>Hg, dada pela Ref. 24. (G) A elevada toxidez deste composto, não recomenda sua utilização. (H) Saturado em HNO<sub>3</sub> concentrado e depois diluído com igual volume de D<sub>2</sub>O.

(II) Para soluções, o nome do solvente e a concentração do soluto.

(III) A natureza do procedimento de referência, ex.: interna, externa (tubos co-axiais ou substituição), frequência absoluta.

(IV) O nome do composto de referência e, se usado internamente na solução, sua concentração.

(V) A temperatura e a pressão da amostra.

(VI) Se oxigênio ou outros gases foram removidos da amostra.

(VII) Qualquer produto químico presente na amostra além da substância sob investigação e do composto de referência.

9. O sinal do  $^1\text{H}$  de uma solução diluída ( $\approx 1\%$  vol. em  $\text{CDCl}_3$ , preferencialmente) do tetrametilsilano, deve ser usado como referência interna primária para as frequências de ressonância (e também os deslocamentos químicos) de todos os núcleos. Entretanto, para soluções aquosas as recomendações da Ref. 3 são indicadas.

10. As referências secundárias listadas nas Tabelas 1 e 2 podem ser usadas para núcleos de vários elementos com suas frequências absolutas, tomando os valores fixados apresentados nestas mesmas tabelas (não sujeitos à revisão quando estas recomendações forem definitivamente adotadas).

## REFERÊNCIAS

1. "Recommendations for the Presentation of NMR Data for Publication in Chemical Journals - Commission on Molecular Structure and Spectroscopy" - *Pure Appl. Chem.* **1972**, *29*, 627.
2. "Presentation of NMR Data for Publication in Chemical Journals - B. Conventions Relating to Spectra from Nuclei Other than Protons" - Commission on Molecular Structure and Spectroscopy (Recommendations 1975) - *Pure Appl. Chem.* **1976**, *45*, 217.
3. "Recommendations for the Presentation of NMR Structures of Proteins and Nucleic Acids", Markley, J. L.; Bax, A.;

- Arata, Y.; Hilbers, C. W.; Kaptein, R.; Sykes, B.D.; Wright, P. E. and Wüthrich, K.; *Pure Appl. Chem.*, em publicação.
4. "Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry" - Mills, I.; Cvitas, T.; Homann, K.; Kallay, N. e Kuchitsu, K.; publicado para IUPAC pela Blackwell Scientific Publications, 1993.
  5. Granger, P.; a ser fornecido.
  6. Novas medidas efetuadas por P. Granger; (valores comparados com dados da literatura conforme o caso).
  7. Bloxside, J. P.; Elvidge, J. A.; Jones, J. R.; Mane, R. B. and Saljoughian, M.; *Magn. Reson. Chem.* **1979**, *12*, 574.
  8. Brownstein, S. and Bornais, J.; *J. Magn. Reson.* **1980**, *38*, 131.
  9. Edzes, H. T.; *Magn. Reson. Chem.* **1992**, *30*, 850.
  10. Hinton, J. F. and Briggs, R. W.; *J. Magn. Reson.* **1997**, *25*, 556.
  11. Mac Farlane, W.; *Proc. Roy. Soc. (London)* **1968**, *A306*, 185.
  12. "Nuclear Magnetic Resonance Encyclopedia", Grant, D. M.; Harris, R. K.; Volumes 1-8, John Wiley & Sons, 1996.
  13. Brows, T. H.; Whipple, E. B. and Verdier, P. H.; *J. Chem. Phys.* **1963**, *38*, 3029.
  14. Schumacker, G. A. and Schrobilgen, G. J.; *Inorg. Chem.* **1984**, *23*, 2923.
  15. Hinton, J. F.; Turner, G. L.; Young, G. and Metz, K. R.; *Pure Appl. Chem.* **1982**, *54*, 2359.
  16. Pyykko, P.; *Z. Naturforsch.* **1992**, *47A*, 189.
  17. Raghavan, P.; *At. Data Nucl. Data Tables* **1989**, *42*, 189.
  18. "NMR and the Periodic Table", Harris, R. K.; Mann, B. E.; Academic Press, 1978.
  19. Sahn, W. and Schwenk, A.; *Z. Naturforsch.* **1974**, *29a*, 1754.
  20. Sahn, W. and Schwenk, A.; *Z. Naturforsch.* **1974**, *29a*, 1763.
  21. Lutz, O.; Schwenk, A. and Uhl, A.; *Z. Naturforsch.* **1975**, *30a*, 1122.
  22. Brinkman, D.; *Helv. Phys. Acta* **1968**, *41*, 367.
  23. "Handbook of High Resolution Multinuclear NMR", Brevard, C. and Granger, P.; Wiley, 1981.
  24. Wu, G. and Wasylishen, R. E.; *Magn. Reson. Chem.* **1993**, *31*, 537.