



Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN): Como reportar os dados

Para reportar os dados de RMN deve-se, primeiramente, indicar o núcleo de estudo, por exemplo ^1H ou ^{13}C . Após, entre parênteses, deve-se indicar a frequência do experimento e o solvente utilizado. Na sequência, usa-se o símbolo de deslocamento (δ) e lista-se os deslocamentos dos sinais observados em ordem crescente ou decrescente a depender da revista científica ou das regras de determinado curso ou programa de pós-graduação. Quando o RMN for de ^1H , coloca-se entre parênteses a abreviação da multiplicidade, a constante de acoplamento observada em Hz (J - em itálico) e, o indicativo de quantos prótons geraram aquele sinal. Observação: Quando os dados são reportados em Inglês, usa-se ponto. Quando os dados são reportados em Português, usa-se vírgula, quando necessário.

Exemplo:

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ = 7.30 (m, 5 H), 4.86 (q, J = 6.00 Hz, 1 H), 1.43 (d, J = 6.00 Hz, 3 H), 0.94 (m, 9 H), 0.54 (m, 6 H).

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3): δ = 147.2, 128.4, 127.1, 125.6, 70.9, 27.3, 7.1, 5.2.

Para multipletos mais complexos, derivados de acoplamentos com diferentes constantes de acoplamento, listam-se as constantes de

acoplamento em ordem decrescente. Para o sinal abaixo a citação ficaria:

$\delta = 4,3$, (qd, $J = 6,6$ e $3,8$ Hz, 1H).

