

Name	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Slope [e <sup>-4</sup> ppm/C]	Frequency shift STD	b [ppm]	PVWM	T2 [ms] +- STD		OCC		pACC
Ace	—	<sup>2</sup> CH <sub>3</sub>	1.904	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Ala	—	<sup>2</sup> CH	3.775	q	2-3	7.23	1.5402	0.2368	-0.0057	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>3</sup> CH <sub>3</sub>	1.467	d	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Asc	—	<sup>4</sup> CH	4.492	d	4-5	2.07	—	—	—	172	25	105	16	125	19
	—	<sup>5</sup> CH	4.002	m	5-6'	6.00	—	—	—	172	25	105	16	125	19
	—	<sup>6</sup> CH <sub>2</sub>	3.743	dd	6-6'	7.60	—	—	—	172	25	105	16	125	19
	—	—	3.716	dd	5-6'	-11.50	—	—	—	172	25	105	16	125	19
Asp	—	<sup>2</sup> CH	3.891	dd	2-3	3.65	-0.0691	0.1863	0.0003	148	21	90	27	111	20
	—	<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	2.801	dd	2-3'	9.11	4.1970	0.1913	-0.0155	148	21	90	27	111	20
	—	—	2.653	dd	3-3'	-17.43	4.1970	0.1913	-0.0155	148	21	90	27	111	20
Ch	—	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	3.185	s	—	—	—	—	—	213	25	221	51	274	60
	—	<sup>1</sup> CH <sub>2</sub>	4.054	m	1-2/1'-2'	3.15	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	3.501	m	1'-2/1-2'	6.99	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
Cr	—	CH <sub>3</sub>	3.027	s	—	—	—	—	—	166	11	144	17	148	22
	—	CH <sub>2</sub>	3.913	s	—	—	-6.2166	0.1158	0.0230	129	13	112	18	134	15
	—	NH	6.650	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Eth	—	<sup>1</sup> CH <sub>2</sub>	3.818	m	1-2/1'-2'	3.85	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	3.147	m	1'-2/1'-2'	6.75	—	—	—	—	—	—	—	—	—
GABA	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	2.283	t	2-3	7.30	-0.0211	0.0346	0.0001	n.a.	n.a.	75	25	102	19
	—	—	—	—	3-4	7.30	7.2800	0.1022	-0.0269	n.a.	n.a.	75	25	102	19
	—	<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	1.889	m	—	—	—	—	—	n.a.	n.a.	75	25	102	19
	—	<sup>4</sup> CH <sub>2</sub>	3.012	t	—	—	—	—	—	n.a.	n.a.	75	25	102	19
Glc-α 36%	—	<sup>1</sup> CH	5.216	d	1-2	3.80	—	—	—	155	23	88	25	117	22
	—	<sup>2</sup> CH	3.519	dd	2-3	9.60	—	—	—	155	23	88	25	117	22
	—	<sup>3</sup> CH	3.698	dd	3-4	9.40	—	—	—	155	23	88	25	117	22
	—	<sup>4</sup> CH	3.395	dd	4-5	9.90	—	—	—	155	23	88	25	117	22
	—	<sup>5</sup> CH	3.822	m	5-6	1.50	—	—	—	155	23	88	25	117	22
	—	<sup>6</sup> CH	3.826	dd	5-6'	6.00	—	—	—	155	23	88	25	117	22
	—	<sup>6'</sup> CH	3.749	dd	6-6'	-12.10	—	—	—	155	23	88	25	117	22
Glc-β 64%	—	<sup>1</sup> CH	4.630	d	1-2	8.00	—	—	—	156	28	90	25	128	20
	—	<sup>2</sup> CH	3.230	dd	2-3	9.10	—	—	—	156	28	90	25	128	20
	—	<sup>3</sup> CH	3.473	dd	3-4	9.40	—	—	—	156	28	90	25	128	20
	—	<sup>4</sup> CH	3.387	dd	4-5	8.90	—	—	—	156	28	90	25	128	20
	—	<sup>5</sup> CH	3.450	m	5-6	1.60	—	—	—	156	28	90	25	128	20
	—	<sup>6</sup> CH	3.882	dd	5-6'	5.40	—	—	—	156	28	90	25	128	20
	—	<sup>6'</sup> CH	3.707	dd	6-6'	-12.30	—	—	—	156	28	90	25	128	20
	—	<sup>2</sup> CH	3.746	dd	2-3/2-3'	7.33/4.65	-3.4740	0.2701	0.0129	124	37	122	32	135	28
	—	<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	2.042	m	3-3'	-14.85	—	—	—	124	37	122	32	135	28

Name	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift		T2 [ms] +- STD						
							Slope [e <sup>-4</sup> ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM	OCC	pACC			
Glu	—	—	2.120	—	3-4/3-4'	6.41/8.41	4.8710	0.1684	-0.0180	124	37	122	32	135	28
	—	<sup>4</sup> CH <sub>2</sub>	2.336	m	3'-4/3'-4'	8.48/6.88	-0.3854	0.1853	0.0014	124	37	122	32	135	28
	—	—	2.456	—	4-4'	-15.92	-3.4450	0.2829	0.0127	124	37	122	32	135	28
Gln	—	<sup>2</sup> CH	3.757	dd	2-3/2-3'	5.84/6.53	-0.5810	0.3044	0.0021	168	33	99	21	122	19
	—	<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	2.135	m	3-3'	-14.45	3.4090	0.2326	-0.0126	168	33	99	21	122	19
	—	—	2.115	—	3'-4/3-4	9.16/6.35	7.6150	0.2199	-0.0282	168	33	99	21	122	19
Gln	—	<sup>4</sup> CH <sub>2</sub>	2.434	m	3'-4/3'-4'	8.48/6.88	2.9690	0.1650	-0.0110	168	33	99	21	122	19
	—	—	2.456	—	4-4'	-15.92	—	—	—	168	33	99	21	122	19
GSH	Glycine moiety	<sup>10</sup> CH <sub>2</sub>	3.769	s	—	—	—	—	—	145	21	72	17	99	16
		<sup>9</sup> NH	7.154	s	—	—	—	—	—	145	21	72	17	99	16
		<sup>7</sup> CH	4.561	dd	7-7'	7.09	—	—	—	145	21	77	22	100	17
	Cysteine moiety	<sup>7</sup> CH <sub>2</sub>	2.926	dd	7-7"	4.71	—	—	—	145	21	77	22	100	17
		—	2.975	dd	7'-7"	-14.06	—	—	—	145	21	77	22	100	17
		<sup>6</sup> NH	8.177	s	—	—	—	—	—	145	21	77	22	100	17
	Glutamate moiety	<sup>2</sup> CH	3.769	dd	2-3/2-3'	6.34/6.36	—	—	—	165	30	76	21	102	20
		<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	2.159	m	3-3'	-15.48	—	—	—	165	30	76	21	102	20
		—	2.146	—	3-4/3-4'	6.7/7.6	—	—	—	165	30	76	21	102	20
		<sup>4</sup> CH <sub>2</sub>	2.510	m	3'-4/3'-4'	7.6/6.7	—	—	—	165	30	76	21	102	20
		—	2.560	—	4-4'	-15.92	—	—	—	165	30	76	21	102	20
Glycerol	—	<sup>1</sup> CH <sub>2</sub>	3.552	dd	1-2/2-3	4.43	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	3.640	dd	1'-2/2-3'	6.49	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>2</sup> CH	3.770	m	1-1'/3-3'	-11.72	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	3.640	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	3.552	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
GPC	Glycerol moiety	<sup>1</sup> CH <sub>2</sub>	3.605	dd	1-2/2-3	5.77	—	—	—	182	22	213	56	257	57
		—	3.672	dd	1'-2/2-3'	4.53	—	—	—	182	22	213	56	257	57
		<sup>2</sup> CH	3.903	m	—	—	—	—	—	182	22	213	56	257	57
		<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	3.871	m	—	—	—	—	—	182	22	213	56	257	57
		—	3.946	m	—	—	—	—	—	182	22	213	56	257	57
		(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	3.212	s	—	—	—	—	—	218	22	222	49	274	61
	Choline moiety	<sup>7</sup> CH <sub>2</sub>	4.312	m	7-8/7'-8'	3.10	—	—	—	178	20	222	49	274	61
		<sup>8</sup> CH <sub>2</sub>	3.659	m	7'-8/7-8'	5.90	—	—	—	178	20	222	49	274	61
Gly	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	3.547	s	—	5.90	—	—	—	152	27	72	22	100	17
Hom	—	αCH	4.467	dd	α-β	5.02	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	βCH <sub>2</sub>	3.191	dd	α-β	8.64	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	3.013	dd	β-β'	-15.30	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	Imidazole moiety	<sup>2</sup> CH	7.08d	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		<sup>5</sup> CH	8.08d	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Name	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift				T2 [ms] +- STD				
							Slope [e <sup>-4</sup> ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM	OCC	pACC			
Hom	GABA moiety	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	2.969	m	2-2'	-12.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		—	2.944	m	2-3/2-3'	7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	
		<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	1.896	m	2-3'/2'-3	8.0	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	1.881	m	3-3'	-13.9	—	—	—	—	—	—	—	—	
		<sup>4</sup> CH <sub>2</sub>	2.378	m	3-4/3'-4'	7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	1.348	m	3-4'/3'-4	7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	—	—	4-4'	-15.2	—	—	—	—	—	—	—	—	
Lac	—	<sup>2</sup> CH	4.097	q	2-3	6.93	-3.1866	0.1977	0.0118	159	26	99	19	110	24
	—	<sup>3</sup> CH <sub>3</sub>	1.313	d	—	—	—	—	—	159	26	99	19	110	24
m-Ins	—	<sup>1</sup> CH	3.522	dd	1-2	2.89	—	—	—	161	37	229	105	244	61
	—	<sup>2</sup> CH	4.054	dd	2-3	3.01	3.5590	0.0483	-0.0132	161	37	229	105	244	61
	—	<sup>3</sup> CH	3.522	dd	3-4	10.00	—	—	—	161	37	229	105	244	61
	—	<sup>4</sup> CH	3.614	dd	4-5	9.49	3.1430	0.1217	-0.0116	161	37	229	105	244	61
	—	<sup>5</sup> CH	3.269	dd	5-6	9.48	-3.1710	0.0725	0.0117	161	37	229	105	244	61
	—	<sup>6</sup> CH	3.614	dd	1-6	10.00	31.4300	0.1217	-0.1163	161	37	229	105	244	61
s-Ins	—	<sup>1-6</sup> CH	3.430	s	—	—	—	—	—	170	28	107	17	125	19
NAA	Acetyl moiety	<sup>2</sup> CH <sub>3</sub>	2.008	s	—	—	—	—	—	343	34	263	43	253	64
	Aspartate moiety	<sup>2</sup> CH	4.382	m	2-3	3.86	-0.0234	0.0450	0.0001	310	33	229	38	223	57
		<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	2.673	dd	2-3'	9.82	2.5070	0.3126	-0.0093	310	33	229	38	223	57
		—	2.486	dd	3-3'	-15.59	-5.9990	0.0505	0.0222	310	33	229	38	223	57
	—	NH	7.820	s	NH-2	7.90	—	—	—	—	—	—	—	—	—
NAAG	Acetyl moiety	<sup>2</sup> CH <sub>3</sub>	2.042	s	—	—	—	—	—	185	22	107	19	128	18
	Aspartate moiety	<sup>2</sup> CH	4.607	dd	2-3/2-3'	4.41	—	—	—	180	27	87	30	108	25
		<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	2.720	dd	2-3'	9.52	—	—	—	180	27	87	30	108	25
		—	2.519	dd	—	-15.91	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	Glutamate moiety	<sup>2</sup> CH	4.129	dd	2-3/2-3'	n.m.	—	—	—	157	23	78	21	110	25
		<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	1.881	m	3-3'	n.m.	—	—	—	157	23	78	21	110	25
		—	2.049	m	—	n.m.	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		<sup>4</sup> CH <sub>2</sub>	2.190	m	3'-4/3'-4'	n.m.	—	—	—	157	23	78	21	110	25
		—	2.180	m	—	n.m.	—	—	—	—	—	—	—	—	—
PA	—	αCH	3.975	dd	α-β	5.21	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	βCH <sub>2</sub>	3.273	dd	α-β	8.01	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	3.105	dd	β-β'	-14.57	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>2</sup> CH	7.322	m	2-3/2-4	7.9/1.6	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>3</sup> CH	7.420	m	2-5/2-6	0.5/1.4	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>4</sup> CH	7.369	m	3-4/3-5	7.2/1.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>5</sup> CH	7.420	m	3-4/4-5	0.5/7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>6</sup> CH	7.322	m	4-6/5-6	1.0/7.4	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Name	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift				T2 [ms] +- STD				
							Slope [e <sup>-4</sup> ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM	OCC	pACC			
PCh	—	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	3.209	s	—	—	—	—	—	213	25	221	51	274	60
	—	<sup>1</sup> CH <sub>2</sub>	4.282	m	1-2	2.28	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
	—	—	—	—	1-2'	7.23	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	3.643	m	1'-2	7.33	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
	—	—	—	—	1'-2'	2.24	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
PCr	—	CH <sub>3</sub>	3.029	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	3.930	s	—	—	-6.6944	0.1891	0.0248	—	—	—	—	—	—
	—	NH	6.58^d	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	NH	7.30^d	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
PE	—	<sup>1</sup> CH <sub>2</sub>	3.977	m	1-2	3.18	—	—	—	158	25	86	26	119	25
	—	—	—	—	1-2'	6.72	—	—	—	158	25	86	26	119	25
	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	3.216	m	1'-2	7.20	—	—	—	158	25	86	26	119	25
	—	—	—	—	1'-2'	2.98	—	—	—	158	25	86	26	119	25
Pyr	—	<sup>3</sup> CH <sub>3</sub>	2.358	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Ser	—	CH	3.835	dd	2-3	5.98	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>3</sup> CH <sub>2</sub>	3.937	dd	2-3'	3.56	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	3.976	dd	3-3'	-12.25	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Suc	—	CH <sub>2</sub>	2.394	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Tau	—	<sup>1</sup> CH <sub>2</sub>	3.420	dd	1-2	6.74	3.2098	0.0612	-0.0119	n.a.	n.a.	102	18	123	23
	—	—	—	—	1-2'	6.46	—	—	—	n.a.	n.a.	102	18	123	23
	—	<sup>2</sup> CH <sub>2</sub>	3.246	dd	1'-2	6.40	—	—	—	n.a.	n.a.	102	18	123	23
	—	—	—	—	1'-2'	6.79	—	—	—	n.a.	n.a.	102	18	123	23
Thr	—	<sup>2</sup> CH	3.578	dd	2-3	4.92	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>3</sup> CH	4.246	m	3-4	6.35	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>4</sup> CH <sub>3</sub>	1.316	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Try	—	αCH	4.047	dd	α-β	4.85	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	βCH <sub>2</sub>	3.475	dd	α-β	8.15	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	3.290	dd	β-β'	-15.37	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>2</sup> CH	7.312	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>4</sup> CH	7.726	m	4-5	7.60	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>5</sup> CH	7.278	m	4-6	1.00	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>6</sup> CH	7.197	m	4-7	0.95	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	<sup>7</sup> CH	7.536	m	5-6	7.51	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	5-7	1.20	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	6-7	7.68	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Tyr	—	αCH	3.928	dd	α-β	5.15	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	βCH <sub>2</sub>	3.192	dd	α-β	7.88	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	3.037	dd	β-β'	-14.73	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Name	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift Slope [ $e^{-4}$ ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM	T2 [ms] +- STD	OCC	pACC
<b>Tyr</b>	—	$^2\text{CH}$	7.312	m	2-3	7.98	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^3\text{CH}$	7.726	m	2-5	0.31	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^5\text{CH}$	7.197	m	2-6	2.54	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^6\text{CH}$	7.536	m	3-5	2.45	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	3-6	0.46	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	5-6	8.65	—	—	—	—	—	—	—
<b>Val</b>	—	$^2\text{CH}$	3.595	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^3\text{CH}$	2.259	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^4\text{CH}_3$	1.028	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^4\text{CH}_3$	0.977	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
<b>Water</b>	—	$\text{H}_2\text{O}$	4.65	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—
<b>2HG</b>	—	$^2\text{CH}$	4.020	m or dd	2-3/2-3'	7.6*/4.1	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^3\text{CH}_2$	1.830	m	3-3'	-14	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	3-4/3-4'	5.3/10.4	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	1.980	—	3'-4/3'-4'	10.6/6.0	—	—	—	—	—	—	—
	—	$^4\text{CH}_2$	2.220	m	4-4'	-15	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	2.270	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—

**Citations:**

- 1 De Graaf, R. A. (2013). *In Vivo NMR Spectroscopy: Principles and Techniques*. John Wiley & Sons.
- 2 Wermter, F., Mitschke, N., Bock, C., & Dreher, W. (2017). Temperature dependence of  $^1\text{H}$  NMR chemical shifts and its influence on estimated metabolite concentrations. *Magnetic Resonance Materials in Physics Biology and Medicine*, 30(6), 579–590. <https://doi.org/10.1007/s10334-017-0642-z>
- 3 Wyss, P., Bianchini, C., Scheidegger, M., Giapitzakis, I., Hock, A., Fuchs, A., & Henning, A. (2018). In vivo estimation of transverse relaxation time constant ( $T_2$ ) of 17 human brain metabolites at 3T. *Magnetic Resonance in Medicine*, 80(2), 452–461. <https://doi.org/10.1002/mrm.27067>
- 4 Choi, C. G., Ganji, S. K., DeBerardinis, R. J., Hatanpaa, K. J., Rakheja, D., Kovacs, Z., Yang, X., Mashimo, T., Raisanen, J. M., Marin-Valencia, I., Pascual, J. M., Madden, C. J., Mickey, B. E., Malloy, C. R., Bachoo, R., & Maher, E. A. (2012). 2-hydroxyglutarate detection by magnetic resonance spectroscopy in IDH-mutated patients with gliomas. *Nature Medicine*, 18(4), 624–629. <https://doi.org/10.1038/nm.2682>

**Abbreviations**

PVWM	periventricular white matter
OCC	occipital cortex
pACC	pregenual anterior cingulate cortex