

Name	Abbr.	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift			T2 [ms] +- STD					
								Slope [e ⁻⁴ ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM	OCC	pACC			
Acetate	Ace	—	² CH ₃	1.904	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
N-acetyl aspartate	NAA	Acetyl moiety	² CH ₃	2.008	s	—	—	—	—	—	343	34	263	43	253	64
		Aspartate moiety	² CH	4.382	dd	2-3	3.86	-0.0234	0.0450	0.0001	310	33	229	38	223	57
			³ CH ₂	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	d	2-NH	7.90	—	—	—	—	—	—	—	—	—
N-acetyl aspartyl glutamate	NAAG	Acetyl moiety	² CH ₃	2.042	s	—	—	—	—	—	185	22	107	19	128	18
		Aspartate moiety	² CH	4.607	dd	2-3/2-3'	4.41	—	—	—	180	27	87	30	108	25
			³ CH ₂	2.721	dd	2-3'	9.52	—	—	—	180	27	87	30	108	25
			—	2.519	dd	—	-15.91	—	—	—	180	27	87	30	108	25
			NH	8.260	—	2-NH	7.32	—	—	—	180	27	87	30	108	25
		Glutamate moiety	² CH	4.128	dd	2-3/2-3'	4.61/8.42	—	—	—	157	23	78	21	110	25
			³ CH ₂	1.881	m	3-3'	-14.28	—	—	—	157	23	78	21	110	25
			—	2.049	—	3-4/3-4'	10.56/6.09	—	—	—	157	23	78	21	110	25
			⁴ CH ₂	2.190	m	3'-4/3'-4'	4.90/11.11	—	—	—	157	23	78	21	110	25
			—	2.180	—	4-4'	-15.28	—	—	—	157	23	78	21	110	25
			NH	7.950	—	2-NH	7.46	—	—	—	157	23	78	21	110	25
Alanine	Ala	—	² CH	3.775	q	2-3	7.23	1.5402	0.2368	-0.0057	—	—	—	—	—	—
		—	³ CH ₃	1.467	d	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Ascorbic Acid	Asc	—	⁴ CH	4.492	d	4-5	2.07	—	—	—	172	25	105	16	125	19
		—	⁵ CH	4.002	m	5-6	6.00	—	—	—	172	25	105	16	125	19
		—	⁶ CH ₂	3.743	m	5-6'	7.60	—	—	—	172	25	105	16	125	19
		—	—	3.716	—	6-6'	-11.50	—	—	—	172	25	105	16	125	19
γ-Aminobutyric acid	GABA	—	² CH ₂	2.287	t	2-3/2-3'	7.66/7.10	-0.0211	0.0346	0.0001	n.a.	n.a.	75	25	102	19
		—	—	2.287	—	2'-3/2'-3'	7.06/7.69	7.2800	0.1022	-0.0269	n.a.	n.a.	75	25	102	19
		—	³ CH ₂	1.892	m	3-3'	-10.82	—	—	—	n.a.	n.a.	75	25	102	19
		—	—	1.895	—	3-4/3-4'	5.70/8.02	—	—	—	n.a.	n.a.	75	25	102	19
		—	⁴ CH ₂	3.003	t	3'-4/3'-4'	10.03/6.53	—	—	—	n.a.	n.a.	75	25	102	19
		—	—	3.005	—	4-4'	-9.93	—	—	—	n.a.	n.a.	75	25	102	19
Aspartate	Asp	—	² CH	3.891	dd	2-3	3.65	-0.0691	0.1863	0.0003	148	21	90	27	111	20
		—	³ CH ₂	2.804	dd	2-3'	9.11	4.1970	0.1913	-0.0155	148	21	90	27	111	20
		—	—	2.670	dd	3-3'	-17.43	4.1970	0.1913	-0.0155	148	21	90	27	111	20
Choline	Ch	—	(CH ₃) ₃	3.185	s	—	—	—	—	—	213	25	221	51	274	60
		—	¹ CH ₂	4.054	m	1-2/1-2'	3.14/6.98	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
		—	—	—	—	1'-2/1'-2'	7.01/3.17	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
		—	² CH ₂	3.501	m	1-1'	-14.10	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
		—	—	—	—	2-2'	-14.10	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
Creatine	Cr	—	CH ₃	3.027	s	—	—	—	—	—	166	11	144	17	148	22
		—	CH ₂	3.913	s	—	—	-6.2166	0.1158	0.0230	129	13	112	18	134	15
		—	NH	6.65	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Ethanolamine	Eth	—	¹ CH ₂	3.818	m	1-2/1'-2'	3.85	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		—	—	—	—	1'-2/1'-2'	6.75	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		—	² CH ₂	3.147	m	1-1'/2-2'	-10.20	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Name	Abbr.	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift			T2 [ms] +- STD					
								Slope [e ⁻⁴ ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM		OCC		pACC	
Glucose, α -anomer (36%)	GlcA	—	¹ CH	5.216	d	1-2	3.80	—	—	—	155	23	88	25	117	22
		—	² CH	3.519	dd	2-3	9.60	—	—	—	155	23	88	25	117	22
		—	³ CH	3.698	dd	3-4	9.40	—	—	—	155	23	88	25	117	22
		—	⁴ CH	3.395	dd	4-5	9.90	—	—	—	155	23	88	25	117	22
		—	⁵ CH	3.822	m	5-6	1.50	—	—	—	155	23	88	25	117	22
		—	⁶ CH	3.826	dd	5-6'	6.0	—	—	—	155	23	88	25	117	22
		—	^{6'} CH	3.749	dd	6-6'	-12.1	—	—	—	155	23	88	25	117	22
Glucose, β -anomer (64%)	GlcB	—	¹ CH	4.630	d	1-2	8.00	—	—	—	156	28	90	25	128	20
		—	² CH	3.230	dd	2-3	9.10	—	—	—	156	28	90	25	128	20
		—	³ CH	3.473	dd	3-4	9.40	—	—	—	156	28	90	25	128	20
		—	⁴ CH	3.387	dd	4-5	8.90	—	—	—	156	28	90	25	128	20
		—	⁵ CH	3.450	m	5-6	1.60	—	—	—	156	28	90	25	128	20
		—	⁶ CH	3.882	dd	5-6'	5.40	—	—	—	156	28	90	25	128	20
		—	^{6'} CH	3.707	dd	6-6'	-12.3	—	—	—	156	28	90	25	128	20
Glutamate	Glu	—	² CH	3.748	dd	2-3/2-3'	7.33/4.65	-3.4740	0.2701	0.0129	124	37	122	32	135	28
		—	³ CH ₂	2.046	m	3-3'	-14.76	—	—	—	124	37	122	32	135	28
		—	—	2.120	—	3-4/3-4'	6.28/8.70	4.8710	0.1684	-0.0180	124	37	122	32	135	28
		—	⁴ CH ₂	2.334	m	3'-4/3'-4'	8.77/6.73	-0.3854	0.1853	0.0014	124	37	122	32	135	28
		—	—	2.352	—	4-4'	-16.03	-3.4450	0.2829	0.0127	124	37	122	32	135	28
Glutamine	Gln	—	² CH	3.767	dd	2-3/2-3'	6.71/5.91	-0.5810	0.3044	0.0021	168	33	99	21	122	19
		—	³ CH ₂	1.121	m	3-3'	-14.45	3.4090	0.2326	-0.0126	168	33	99	21	122	19
Glutamine	Gln	—	—	2.137	—	3-4/3-4'	6.18/9.40	7.6150	0.2199	-0.0282	168	33	99	21	122	19
		—	⁴ CH ₂	2.431	m	3'-4/3'-4'	9.34/6.32	2.9690	0.1650	-0.0110	168	33	99	21	122	19
		—	—	2.458	—	4-4'	-15.61	—	—	—	168	33	99	21	122	19
Glutathione	GSH	Glycine moiety	² CH ₂	3.769	s	—	—	—	—	—	145	21	72	17	99	16
			NH	7.154	s	—	—	—	—	—	145	21	72	17	99	16
		Cysteine moiety	² CH	4.561	dd	2-3	7.09	—	—	—	145	21	77	22	100	17
			³ CH ₂	2.926	dd	2-3'	4.71	—	—	—	145	21	77	22	100	17
			—	2.975	—	3-3'	-14.06	—	—	—	145	21	77	22	100	17
			NH	8.177	s	—	—	—	—	—	145	21	77	22	100	17
		Glutamate moiety	² CH	3.769	dd	2-3/2-3'	6.34/6.36	—	—	—	165	30	76	21	102	20
			³ CH ₂	2.146	m	3-3'	-15.48	—	—	—	165	30	76	21	102	20
			—	2.159	—	3-4/3-4'	6.70/7.60	—	—	—	165	30	76	21	102	20
			⁴ CH ₂	2.510	m	3'-4/3'-4'	7.60/6.70	—	—	—	165	30	76	21	102	20
—	2.560	—	4-4'	-15.92	—	—	—	165	30	76	21	102	20			

Name	Abbr.	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift			T2 [ms] +- STD						
								Slope [e ⁻⁴ ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM	OCC	pACC				
Glycerol	Glycerol	—	¹ CH ₂	3.552	dd	1-2/2-3	4.43	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	—	3.640	dd	1'-2/2-3'	6.49	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	² CH	3.770	m	1-1'/3-3'	-11.72	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	³ CH ₂	3.522	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	—	3.640	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
Glycerophosphocholine	GPC	Glycerol moiety	¹ CH ₂	3.605	dd	1-2/1'-2	5.77/4.56	—	—	—	182	22	213	56	257	57	
			—	3.672	dd	1-1'	-14.78	—	—	—	182	22	213	56	257	57	
			² CH	3.903	m	2-3/2-3'	5.77/4.56	—	—	—	182	22	213	56	257	57	
			³ CH ₂	3.871	m	3-3'	-14.78	—	—	—	182	22	213	56	257	57	
			—	3.946	m	3,3'-P	6.03	—	—	—	182	22	213	56	257	57	
		Phosphocholine moiety	(CH ₃) ₃	3.212	s	—	—	—	—	218	22	222	49	274	61		
			¹ CH ₂	4.312	m	1-2/1'-2'	3.10/5.90	—	—	—	178	20	222	49	274	61	
			—	—	—	1'-2/1'-2'	5.90/3.10	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
			² CH ₂	3.659	m	1-1'/2-2'	-9.32	—	—	—	178	20	222	49	274	61	
—	—	—	1,1'-P	6.03	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—			
Glycine	Gly	—	² CH ₂	3.547	s	—	—	—	—	—	152	27	72	22	100	17	
Homocarnosine	Hom	Alanine moiety	² CH	4.467	dd	2-3	5.02	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
			³ CH ₂	3.191	dd	2-3'	8.64	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
			—	3.013	dd	3-3'	-15.30	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
			² CH ₂	2.944	m	2-2'	-12.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
			—	2.969	m	2-3/2-3'	8.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		GABA moiety	³ CH ₂	1.881	m	2-3'/2'-3	7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			—	1.896	m	3-3'	-13.9	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			⁴ CH ₂	2.348	m	3-4/3-4'	7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			—	2.378	m	3-4'/3-4'	7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
			—	—	—	4-4'	-15.2	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		Imidazole moiety	² CH	8.08d	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
⁴ CH	7.08d		s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—		
2-Hydroxyglutarate	2HG	—	² CH	4.008	dd	2-3/2-3'	7.65/4.04	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	³ CH ₂	1.822	m	3-3'	-14.00	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	—	1.980	m	3-4/3-4'	5.25/10.66	—	—	—	—	—	—	—	—		
		—	⁴ CH ₂	2.221	m	3'-4/3'-4'	10.84/5.86	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	—	2.270	m	4-4'	-14.91	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
myo-Inositol	m-Ins	—	¹ CH	3.522	dd	1-2	2.89	—	—	—	161	37	229	105	244	61	
		—	² CH	4.054	dd	2-3	3.01	3.5590	0.0483	-0.0132	161	37	229	105	244	61	
		—	³ CH	3.522	dd	3-4	10.00	—	—	—	161	37	229	105	244	61	
		—	⁴ CH	3.614	dd	4-5	9.49	3.1430	0.1217	-0.0116	161	37	229	105	244	61	
		—	⁵ CH	3.269	dd	5-6	9.48	-3.1710	0.0725	0.0117	161	37	229	105	244	61	
		—	⁶ CH	3.614	dd	1-6	10.00	31.4300	0.1217	-0.1163	161	37	229	105	244	61	
scyllo-Inositol	s-Ins	—	¹⁻⁶ CH	3.340	s	—	—	—	—	—	170	28	107	17	125	19	
Lactate	Lac	—	² CH	4.097	q	2-3	6.93	-3.1866	0.1977	0.0118	159	26	99	19	110	24	
		—	³ CH ₃	1.313	d	—	—	—	—	—	159	26	99	19	110	24	

Name	Abbr.	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift			T2 [ms] +- STD					
								Slope [e ⁻⁴ ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM		OCC		pACC	
Phenylalanine	PA	Alanine moiety	² CH	3.975	dd	2-3/2-3'	8.01/5.21	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			³ CH ₂	3.105	dd	3-3'	-14.57	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			—	3.273	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		Phenyl moiety	¹ CH	7.369	m	1-2/1-2'	7.2/7.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			² CH	7.420	m	1-3/1-3'	1.6/1.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			³ CH	7.322	m	2-3/2-3'	7.9/0.5	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			—	—	—	2'-3/2'-3'	0.5/7.4	—	—	—	—	—	—	—	—	
			—	—	—	3-3'	1.4	—	—	—	—	—	—	—	—	
Phosphocholine	PCh	—	(CH ₃) ₃	3.209	s	—	—	—	—	—	213	25	221	51	274	60
		—	¹ CH ₂	4.282	m	1-2/1-2'	2.28/7.23	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
		—	—	—	m	1'-2/1'-2'	7.33/2.24	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
		—	² CH ₂	3.643	m	1-1'/2-2'	-14.9/-14.2	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
		—	—	—	m	1,1'-P	6.27	—	—	—	1778	20	191	49	243	51
Phosphocreatine	PCr	—	CH ₃	3.029	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	² CH ₂	3.930	s	—	—	-6.6944	0.1891	0.0248	—	—	—	—	—	—
		—	NH	6.58/7.30	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
Phosphoethanol-amine	PE	—	¹ CH ₂	3.977	m	1-2/1-2'	3.18/6.72	—	—	—	158	25	86	26	119	25
		—	—	—	m	1'-2/1'-2'	7.20/2.98	—	—	—	158	25	86	26	119	25
		—	² CH ₂	3.216	m	1-1'/2-2'	-14.6/-14.7	—	—	—	158	25	86	26	119	25
		—	—	—	m	1,1'-P	7.18	—	—	—	158	25	86	26	119	25
Pyruvate	Pyr	—	³ CH ₃	2.358	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
Serine	Ser	—	² CH	3.835	dd	2-3/2-3'	5.98	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	³ CH ₂	3.937	dd	3-3'	3.56	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	—	3.976	dd	—	-12.3	—	—	—	—	—	—	—		
Succinate	Suc	—	² CH ₂	2.394	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—		
Taurine	Tau	—	¹ CH ₂	3.420	dd	1-2/1-2'	6.74/6.46	3.2098	0.0612	-0.0119	n.a.	n.a.	102	18	123	23
		—	² CH ₂	3.246	dd	1'-2/1'-2'	6.40/6.79	—	—	—	n.a.	n.a.	102	18	123	23
		—	—	—	—	1-1'/2-2'	-12.4/-12.9	—	—	—	n.a.	n.a.	102	18	123	23
Threonine	Thr	—	² CH	3.578	d	2-3	4.92	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	³ CH	4.246	m	3-4	6.35	—	—	—	—	—	—	—	—	
		—	⁴ CH ₃	1.316	d	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
Tryptophan	Try	Alanine moiety	² CH	4.047	dd	2-3/2-3'	8.15/4.85	—	—	—	—	—	—	—	—	
			³ CH ₂	3.290	dd	3-3'	-15.37	—	—	—	—	—	—	—	—	
			—	3.475	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—		
		Indole moiety	² CH	7.312	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
			⁴ CH	7.726	m	4-5/4-6	7.60/1.00	—	—	—	—	—	—	—	—	
			—	⁵ CH	7.278	m	4-7	0.95	—	—	—	—	—	—	—	
			—	⁶ CH	7.197	m	5-6/5-7	7.51/1.20	—	—	—	—	—	—	—	
			—	⁷ CH	7.536	m	6-7	7.68	—	—	—	—	—	—	—	

Name	Abbr.	Moieties	Group	Chemical Shift (ppm)	Multiplicity	Interaction	Scalar coupling (Hz)	Temperature-induced Frequency shift			T2 [ms] +/- STD					
								Slope [e^{-4} ppm/C]	STD	b [ppm]	PVWM	OCC	pACC			
Tyrosine	Tyr	Alanine moiety	^2CH	3.928	dd	2-3/2-3'	7.88/5.15	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			$^3\text{CH}_2$	3.037	dd	3-3'	-14.73	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			—	3.192	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	Tyr	Phenol moiety	^2CH	6.890	m	2-3/2-3'	7.98/0.46	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			^3CH	7.186	m	2'-3/2'-3'	0.31/8.65	—	—	—	—	—	—	—	—	—
			—	—	m	2-2'/3-3'	2.45/2.54	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Valine	Val	—	^2CH	3.595	dd	2-3	4.41	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		—	^3CH	2.259	m	3-4	6.97	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		—	$^4\text{CH}_3$	1.028	dd	3-4'	7.07	—	—	—	—	—	—	—	—	—
		—	$^4\text{CH}_3$	0.977	dd	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Water	Water	—	H ₂ O	4.65	s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Citations:

- 1 De Graaf, R. A. (2019). *In Vivo NMR Spectroscopy: Principles and Techniques*. Third Edition. John Wiley & Sons.
- 2 Wermter, F., Mitschke, N., Bock, C., & Dreher, W. (2017). Temperature dependence of ^1H 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