

относительного химического сдвига ядра вещества ($\delta_{\text{в-во}}$) определяется следующим выражением:

$$\delta_{\text{в-во}} = (v_{\text{в-во}} - v_{\text{эталон}}) / v_{\text{прибора}}$$

где $v_{\text{в-во}}$ – частота резонанса ядра вещества, Гц;

$v_{\text{эталон}}$ – частота резонанса ядра эталона, Гц;

$v_{\text{прибора}}$ – рабочая частота ЯМР-спектрометра (частота, на которой выполняются условия резонанса для ядер водорода при данном B_0 , МГц).

Для растворов в органических растворителях химический сдвиг в спектрах ^1H и ^{13}C измеряется относительно сигнала тетраметилсилана, положение которого принято за 0 м.д. Отсчет химических сдвигов ведется в сторону слабого поля (влево) от сигнала тетраметилсилана (дельта – шкала химических сдвигов). Для водных растворов в качестве эталона в спектрах ЯМР ^1H используется 2,2-диметил-2-силанпентан-5-сульфонат натрия, химический сдвиг протонов метильной группы которого равен 0,015 м.д. Для спектров ^{13}C водных растворов в качестве эталона используют диоксан, химический сдвиг которого равен 67,4 м.д.

При калибровке спектров ^{19}F в качестве первичного эталона с нулевым значением химического сдвига используют трифторуксусную кислоту или трихлорфторметан; спектров ^{31}P – 85 % раствор ортофосфорной кислоты или триметилфосфат; спектров ^{15}N – нитрометан либо насыщенный раствор аммиака. В ^1H и ^{13}C ЯМР, как правило, используют внутренний эталон, который непосредственно прибавляют к испытуемому образцу. В ^{15}N , ^{19}F и ^{31}P ЯМР часто используют внешний эталон, который находится отдельно в коаксиальной цилиндрической пробирке или капилляре.

При описании спектров ЯМР необходимо указывать растворитель, в котором растворено вещество, и его концентрацию. В качестве растворителей используют легкоподвижные жидкости, в которых для уменьшения интенсивности сигналов растворителей атомы водорода заменены атомами дейтерия. Дейтерированный растворитель выбирают, исходя из следующих критериев: