

1D-NMR: Zusammenfassung der strukturanalytischen Aussagen

^1H : Chemische Verschiebung, indirekte Kopplung ($^{2,3}J_{H,H}$) und relative Intensitäten durch Integration

^1H -sel. NOE: in räumlicher Nähe (4-5 Å) befindliche Spins erfahren durch selektive Einstrahlung Signalverstärkung

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$: Chemische Verschiebung, keine indirekte Kopplung, keine Integration. Relative Intensitäten nur, wenn ein „*inverse gated decoupled*“-Experiment verwendet wird (kein NOE). $^1J_{H,C}$ -Multipletts nur bei „*gated decoupled*“-Variante

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -DEPT135: Nur noch selten genutzt, liefert Multiplizitäten (CH, CH₂, CH₃). C_q nicht sichtbar, daher nur zusammen mit $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ eingesetzt

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -APT und -DEPTQ: Chem. Versch., Multiplizitäten (C_q, CH, CH₂, CH₃)

Hetero-(X-)Kerne: Oft ebenfalls ^1H -Breitbandentkopplung. Sonst Detektion über l.r.-Korrelationsexperimente

2D-NMR: Zusammenfassung der strukturanalytischen Aussagen

H,H-COSY: H-H-Korrelation über Bindung (indirekte Kopplung), liefert $^{2,3}J_{HH}$ -Konnektivitäten (seltener auch l.r. wie $^4J_{HH}$)

H,H-TOCSY: H-H-Korrelation über Bindung (indirekte Kopplung), $^{2,3,\dots}J_{HH}$ (komplettes gekoppeltes Spinsystem)

H,H-NOESY: H-H-Korrelation über Raum (direkte Kopplung), liefert Informationen über räumlich benachbarte Protonen

H,C-HMQC/HSQC: H-C-Korrelation über Bindung (indirekte Kopplung), inverse Detektion auf „*high-γ*“-Kern, liefert $^1J_{HC}$ -Konnektivitäten („Bio“-Variante: H,C-HSQC). Phasensensitives HSQC für Multiplizitäten (CH, CH₂, CH₃)

H,C-HMBC: H-C-Korrelation über Bindung (indirekte Kopplung), inverse Detektion auf „*high-γ*“-Kern, liefert $^{2,3,\dots}J_{HC}$ -Konnektivitäten (l.r., seltener auch $^1J_{HC}$ und $^4J_{HC}$)