

Generelles Vorgehen bei der Interpretation von NMR-Spektren (Strukturbeweis):

1. Bei gegebener Summenformel wird zunächst die Anzahl von DBÄ berechnet (sog. Ringzahl).
2. $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR-Spektrum: **Anzahl** unterschiedlicher Kohlenstoffsignale (Symmetrie!), Intensitäten nicht direkt mit relativer Anzahl korrelierbar, **chemische Verschiebung** (sp^2 , sp^3 , Substituenten etc.).
3. HMQC/HSQC: ^1H , ^{13}C -Korrelation über eine Bindung ($^1\text{J}_{\text{CH}}$) dient zur Zuordnung der H's an entsprechende Kohlenstoffe.
4. ^1H -NMR-Spektrum: Rückschlüsse aus **chemischer Verschiebung**, Auswertung der **Integrale**, Analyse der skalaren (indirekten) **Kopplung** über 2-3 Bindungen (Multipletts).
5. ^1H , ^1H -COSY: Korrelation zwischen über 2-3 Bindungen ($^{2,3}\text{J}_{\text{HH}}$) gekoppelten Protonen (seltener auch long range-Korrelationen, d.h. 4 oder mehr Bindungen) – dient zur Bestätigung der im ^1H -NMR gefundenen gekoppelten „**Spinsysteme**“, oft einfacher zu interpretieren als Multipletts.
6. **Zwischenbilanz** erstellen, dabei gefundene Fragmente/Strukturbausteine auflisten und aus Spektren begründen, „Befund“ mit DBÄ abgleichen.
7. HMBC: ^1H , ^{13}C -Korrelation über 2,3 oder mehr Bindungen ($^{2,3,4}\text{J}_{\text{CH}}$). Liefert die Verknüpfung der Fragmente („Rückgrat“, bzw. C-Skelett des Moleküls).
8. „**Zusammensetzen**“ des Zielmoleküls, Begründung der Verknüpfungen über Korrelationen und chemische Verschiebungen.