

- I. соотнесение сигналов спектров ^1H и ^{13}C к конкретным углеводородным фрагментам (метильным, метиленовым, метиновым, ароматическим группам) на основе данных спектра ^1H - ^{13}C HSQC;
- II. определение соседних углеводородных фрагментов, связанных ковалентной связью, и составление последовательности из углеводородных фрагментов на основе данных ^1H - ^1H COSY и при необходимости ^1H - ^1H TOCSY;
- III. объединение в молекулу углеводородных фрагментов (алифатических и ароматических) и амидных групп на основе данных спектра ^1H - ^{13}C HMBC.

Аминокислотную последовательность в олигопептиде устанавливают на основе данных спектра ^1H - ^{13}C HMBC по наличию кросс-пиков между сигналами α -CH групп и C=O групп соседних аминокислот.