Übersicht: Methoden und (Struktur)-Informationen

Methode	Bindungstyp	elektronische Struktur	Elementaranalyse	polykr. Textur	Oberflächenstruktur	Kristalldefekte	Lokale Struktur	Kristallstruktur	Elementarzelle, Raumgruppe	amorph/kristallin	Phasenbestimmung
Optische Mikroskopie				□	(□)	(□)				□	□
Elektronenbeugung/mikroskopie			□	□	□	□		□	□	□	□
Röntgenbeugung	(□)			(□)		(□)	(□)	□	□	□	□
Neutronenbeugung						□		□	□	(□)	(□)
NMR/ESR-Spektroskopie	(□)	(□)	(□)			(□)	□				(□)
IR/Raman-Spektroskopie	(□)		(□)		□		□				□
UV/VIS-Spektroskopie	□	□	(□)			(□)	□				
Elektronenspektroskopie (ESCA, XPS. UPS, AES, EELS)	□	□	□		□	(□)	□				
Röntgenspektroskopie (XRF, AEFS, EXAFS)	(□)	(□)	□		□	(□)	□				
Mößbauer-Spektroskopie	(□)		(□)				□				

<table>
<tr><th></th><th>??</th><th>gas</th><th>flüssig</th><th>fest</th></tr>
<tr><td rowspan="14">Zusammensetzung</td><td rowspan="9">Identifizierung von Substanzen ('Fingerprint')</td><td colspan="3">IR, Raman ①</td></tr>
<tr><td colspan="3">UV/VIS ①</td></tr>
<tr><td>Mikrowellen②</td><td>NMR ①</td><td>MAS-NMR ②</td></tr>
<tr><td>UPS ②</td><td colspan="2"></td></tr>
<tr><td colspan="2">MS ①</td><td>MS/SIMS ②</td></tr>
<tr><td colspan="2" rowspan="4"></td><td>Pulver-Diffraktometrie ①</td></tr>
<tr><td>Mikroskopie ①, Elektronenmikroskopie ②</td></tr>
<tr><td>AFM/STM ②</td></tr>
<tr><td>Thermoanalyse (TG/DTA/DSC) ①</td></tr>
<tr><td rowspan="5">funktionelle Gruppen</td><td colspan="3">IR, Raman ①</td></tr>
<tr><td colspan="3">UV/VIS ①</td></tr>
<tr><td colspan="2">NMR ①</td><td>MAS-NMR ②</td></tr>
<tr><td colspan="2"></td><td>Mößbauer ②</td></tr>
<tr><td colspan="2">MS ①</td><td>MS/SIMS ②</td></tr>
<tr><td rowspan="14">Statische Molekül/FK-Struktur</td><td rowspan="6">Symmetrie</td><td colspan="3">IR, Raman ①</td></tr>
<tr><td>Mikrowellen ②</td><td>NMR ①</td><td>MAS-NMR ②</td></tr>
<tr><td colspan="2"></td><td>NQR ③</td></tr>
<tr><td>Elektronenbeugung ③</td><td></td><td>Röntgenbeugung ①</td></tr>
<tr><td colspan="2" rowspan="2"></td><td>Neutronenbeugung ④</td></tr>
<tr><td>EXAFS ④</td></tr>
<tr><td rowspan="3">Geometrie (Abstände, Winkel)</td><td>Mikrowellen ②</td><td>LC-NMR ①</td><td></td></tr>
<tr><td>Elektronenbeugung③</td><td colspan="2">EXAFS ④</td></tr>
<tr><td colspan="2"></td><td>Einkr.-Beugung (Röntgen ①, Neutronen ④)</td></tr>
<tr><td rowspan="5">Elektronenstruktur</td><td colspan="3">UV/VIS ①</td></tr>
<tr><td>UPS ②</td><td>XPS ②</td><td>UPS, XPS ②</td></tr>
<tr><td colspan="3">ESR</td></tr>
<tr><td colspan="2" rowspan="2"></td><td>Mößbauer ②</td></tr>
<tr><td>Einkr.-Beugung (Röntgen ①, Neutronen ④)</td></tr>
<tr><td rowspan="3">Dynam.</td><td rowspan="3">Schwingungen, Phononen</td><td colspan="3">IR, Raman ①</td></tr>
<tr><td></td><td>NMR ①</td><td>MAS-NMR ②</td></tr>
<tr><td colspan="2"></td><td>inelast. Neutronenstreuung ④</td></tr>
<tr><td>⋮</td><td colspan="4">physikalische und chemische Eigenschaften: div. Methoden</td></tr>
</table>

①: in den meisten Labors/Instituten verfügbar; ②: in einigen Instituten verfügbar; ③: in wenigen Instituen verfügbar; ④: teure Spezialausrüstung erforderlich.