



# Advanced Certificate in Powder Diffraction on the Web

## Course Material Master Index

[School of Crystallography, Birkbeck College, University of London](#)



[Welcome Page](#)



[Course Index](#)



[Navigation](#)

## Contents

### • [Internet Skills](#)

[The Internet Part-time Study via the Web](#) Web

#### Authoring

- [Creating and Editing HTML \(Hypertext Mark-up Language\)](#)

- [HTML Topics](#)

- [Starting a Document](#)

- [Tag Order](#)

- [Spacing](#)

- [Layout](#)

- [Headings and Fonts](#)

- [Symbols](#)

- [Special Characters](#)

- [Subscripts and Superscripts](#)

- [Lists](#)

- [Tables](#)

- [Images and Icons](#)

- [Colours](#)

- [Document Links](#)

- [Miscellaneous](#)

- [External Links](#)

### • [Introduction to Powder Diffraction](#)

- [In the Beginning](#)

- [What is Diffraction?](#)

- [What is a Powder?](#)

- [What is Powder Diffraction?](#)

- [Bragg's Law](#)

- [A little more on Crystal Planes](#)

- [Laue versus Monochromatic Methods](#)

- [A little more on Wavelength and Monochromatic Radiation](#)

- [Single Crystal versus Powder Specimens](#)

- [Landmarks](#)

- [External Links](#)

### • Instrumentation

## **Laboratory Methods**

- **Introduction**
- **Generation of X-rays**
- **Choice of X-ray Target**
- **Laboratory X-ray Sources**
- **Filters**
- **Monochromators**
- **Mirrors**
- **X-ray Detectors**
- **Instrument X-ray Optics**
  - [Reflection Geometry](#)
  - [Transmission Geometry](#)
- **Samples**
  - [Preparation](#)
  - [Holders](#)
- **Data Acquisition**
  - [Preferred Orientation](#)
  - [Texture](#)
  - [Sample Spinning](#)
  - [Transparency](#)
- **External Links**

## **Synchrotron Sources and Methods**

- **Background to the Synchrotron**
- **How do Synchrotrons Work?**
- **Properties of Synchrotron Radiation**
- **Insertion Devices**
- **Beam Conditioners**
- **Introduction to Synchrotron Powder Diffraction**
- **Instrument X-ray Optics**
  - [Mode \(1\): Flat Plate with/without Analyser Crystal](#)
  - [Mode \(2\): Multiple Foil \(Hart-Parrish\)](#)
  - [Mode \(3\): Debye-Scherrer](#)
  - [Mode \(4\): Use of Line/Area Detectors](#)
  - [Mode \(5\): Energy-dispersive](#)
- **Data Acquisition on a Synchrotron Powder Diffractometer**
  - [Ultra-High-Resolution Angle-Dispersive Data](#)
  - [Energy-Dispersive Detector Energy Calibration](#)
  - [Energy-Dispersive Detector Angle](#)
  - [Comparison of Laboratory and Energy-Dispersive Diffraction Data](#)
- **External Links**

## **Neutron Sources and Methods**

- **Introduction**
- **Properties of the Neutron**
- **Neutron Detectors**
- **Samples & Sample Holders**
- **Steady-State Sources**
  - [Nuclear Reactors](#)
  - [Guide Halls & Guide Tubes](#)
  - [Monochromators](#)
  - [High-Resolution Diffractometers](#)
  - [High-Flux Diffractometers](#)
  - [Data Acquisition](#)

- **Pulsed Sources**

- [Time-of-Flight Concepts](#)
  - [Spallation Neutrons](#)
  - [TOF Diffractometers](#)
  - [TOF Data Collection](#)

- **Future**

- **External Links**

- **Diffraction Theory**

- [From Electron Scattering to Structure Factors](#)**

- [Scattering of X-rays by a Single Electron](#)
    - [Scattering of X-rays by Two Electrons](#)
    - [Scattering of X-rays by a Collection of Electrons as in an Atom](#)
      - [Anomalous Scattering](#)
    - [Scattering of X-rays by a 1-Dimensional Chain of Atoms or Molecules](#)
    - [A Geometrical Representation](#)
    - [Scattering of X-rays by 2- and 3-Dimensional Units](#)
      - [The Reciprocal Lattice](#)
    - [Further Interpretations of Diffraction](#)
    - [Intensity of Diffraction: the Structure Factor Equation](#)
    - [A Dimensional Summary](#)

- [From Structure Factors to Diffraction Intensities](#)**

- [Kinematic versus Dynamic Diffraction](#)
    - [Powder Diffraction](#)
    - [Calculating the Intensity of Diffraction Using the Structure Factor Equation](#)
    - [From the Structure Factor to Measured Intensities](#)
    - [Multiplicity](#)
    - [Polarisation Factor](#)
    - [Lorentz Factor](#)
    - [Absorption Factor](#)
    - [Agreement?](#)
    - [Temperature Effects](#)

- **Symmetry**

- [3-D Symmetry Elements](#)**

- [Introduction](#)
    - **Rotation Symmetry**
      - [Rotation Axes](#)
      - [Symmetry Operators](#)
    - **Rotary-Inversion Symmetry**
      - [Inversion Symmetry](#)
      - [Mirror Planes](#)
      - [Higher Order Axes](#)
    - **Translational Symmetry**
      - [Lattices and Unit Cells](#)
      - [Crystal Systems](#)
      - [Bravais Lattices](#)
    - **Screw Symmetry**
      - [Concepts](#)
      - [Two-one Screw Axis](#)

[Helical Screw Axes](#)

- [Glide Symmetry](#)
- [Symmetry Symbols](#)

[Point Groups](#)

- **Symmetry Diagrams**
  - [Flat Projection](#)
  - [Sterographic Projection](#)
- **Symmetry Groups**
  - [Concepts](#)
  - [Molecular Point Symmetry](#)
  - [Crystallographic Point Groups](#)
  - [Point-Group Diagrams](#)
  - [Diffraction Symmetry](#)
  - [Reflection Multiplicity](#)
  - [Polar Point Groups](#)
  - [Enantiomorphic Point Groups](#)
  - [Point-Group Determination](#)

[Space Groups](#)

- [Introduction to Space Groups](#)
- [The 230 3-Dimensional Space Groups](#)
- [Space-Group Frequencies](#)
- [Space-Group Diagrams](#)
- [Special Positions](#)
- [Asymmetric Unit](#)
- [Crystal Class](#)
- [Triclinic Space Groups](#)
  - [Clickable Space Group  \$P-1\$](#)
- [Monoclinic Space Groups](#)
  - [Clickable Space Group  \$P2\_1/c\$](#)
- [Orthorhombic Space Groups](#)
  - [Clickable Space Group  \$P2\_12\_12\_1\$](#)
- [Centred Space Groups](#)
  - [Clickable Space Group  \$C2/c\$](#)

[Space-Group Determination](#)

- [Introduction](#)
- [Reflection Conditions & Systematic Absences](#)
  - [Centred Lattices](#)
  - [Screw Axes](#)
  - [Glide Planes](#)
- [Single-Crystal versus Powder Diffraction](#)
- [Space-Group Determination in Practice](#)
- [Case Study](#)
- [Links](#)

- [Qualitative Analysis](#)

- [A Taster](#)
- [Back to the Beginning](#)
- [A Powder Diffraction File](#)
- [The Search Begins](#)
- [A Simple Question](#)
- [A Simple Answer](#)
- [And Something More](#)

- [So What About Multiple Phases?](#)
- [Present and Future Developments](#)
- [External Links](#)
- **[Quantitative Analysis](#)**
  - [Introduction](#)
  - **Single Peak type Methods**
    - [Diffracting Power](#)
    - [Multi-Component Systems](#)
  - **Absorption**
    - [The Absorption Problem](#)
    - [Dealing with the Absorption Problem](#)
  - **Whole-Pattern Quantitative Analysis**
    - [Principles](#)
    - [A Worked Example](#)
- [External Links](#)

## Indexing

### [Unit-Cell Refinement](#)

- [Introduction](#)
- [Generation of  \$hkl\$ ,  \$d\$ , and  \$2\theta\$  Values](#)
- [Standards](#)
- [Unit-Cell Refinement](#)
- [Wavelength Refinement](#)
- [Accuracy](#)
- **Interactive Programs**
  - [Program to Generate  \$hkl\$ ,  \$d\$ , and  \$2\theta\$  Values](#)
  - [Program to Refine Unit-Cell Parameters](#)
- [External Links](#)

### [Indexing Methods & Programs](#)

- [Principles](#)
- [Simple Methods](#)
- [Trial Methods](#)
- [Dichotomy Methods](#)
- [Zone Indexing Methods](#)
- [Monte Carlo Methods](#)
- [Pitfalls](#)
- **Interactive Program**
  - [Zone-Indexing Program](#)
- [External Links](#)

## [Peak Shapes](#)

- [The Concept of Peak Shape](#)
- **Peak Shape Functions**
  - [Gaussian](#)
  - [Lorentzian \(or Cauchy\)](#)
  - [Pearson VII](#)
  - [Others](#)
- [Variations Across a Pattern](#)

- [Sources of Peak Broadening](#)
- [Crystallite Size and Strain](#)
- [Determination of Size and Strain](#)

## Structure Refinement

### [Rietveld Method](#)

- [Introduction](#)
- [From Intensities to Structural Parameters](#)
- **Profile Fitting**
  - [Theory](#)
  - [Practice](#)
- [Least-Squares Fitting](#)
- [R-Factors](#)
- [Estimated Standard Deviations](#)
- [Case Study](#)

### [Tools](#)

- [Molecular Geometry](#)
  - [Interatomic Distances & Bond Lengths](#)
  - [Bond Angles](#)
  - [Torsion Angles](#)
- [Fourier Maps](#)
- [Constraints & Restraints](#)
  - [Coordinate](#)
  - [Geometry](#)
  - [Atomic Displacement](#)
  - [Composition](#)
- [Multiphase Refinements](#)
- [Phase Transitions](#)
- [Combined Data Sets](#)

### [Rietveld in Practice](#)

- **Using Rietica**
  - [Viewing the Data](#)
  - [Preferences](#)
  - [Getting Started](#)
  - [Backgrounds](#)
  - [Crystallographic Model](#)
  - [Refinement](#)
- **Practical Problems**
  - [Damping Parameters](#)
  - [Atomic Displacement Parameters](#)

## Structure Solution

- [Historical Overview](#)
- [Strategy](#)
- **Whole Pattern Fitting**
  - [Pawley Method](#)
  - [LeBail Method](#)
- **Structure Solution**
  - [Direct Methods](#)
  - [Global Optimisation Methods](#)

- [External Links](#)

## Modern Techniques & Applications

### [Pushing the Limits](#)

- [3 Terms and a Global Look](#)
- [Detectors](#)
  - [Point & Line Detectors](#)
  - [Area Detectors](#)
  - [Neutron Detectors](#)
- [Temperature](#)
  - [Low](#)
  - [High](#)
- [High Pressure](#)
  - [Types of Pressure Cells](#)
  - [Energy Dispersive or Angle Dispersive?](#)
  - [DAC Image Plate Combination](#)
  - [The Limit?](#)

### [In-Situ Applications](#)

1. [Hydrothermal Synthesis](#)
  - [Angle Dispersive](#)
  - [Energy Dispersive](#)
2. [The Value of Neutrons](#)
  - [Catalyst Reduction](#)
  - [Thermal Decomposition](#)
  - [Rapid Complex Events](#)
3. [The Inside Story](#)
  - [Residual Stress/Strain](#)
  - [Compositional Tomography](#)
4. [Combined Techniques: Don't Put All Your Eggs Into One Basket](#)
  - [Energy Dispersive & EXAFS](#)
  - [Energy Dispersive, EXAFS & Neutrons](#)

### [Commercial Uses](#)

- [Overview](#)
- [Patents](#)
  - [What are they?](#)
  - [The Use of Powder Diffraction in Patents](#)
  - [Examples of the Use of Powder Diffraction in Patents](#)
- [Polymorphism & Seeding](#)
  - [Discussion](#)
  - [Case Studies](#)
- [Forensic Analysis \(Qualitative\)](#)
  - [Archeological Samples](#)
- [Impurity Analysis \(Quantitative\)](#)
  - [Concentrations Limits & Impurities](#)
  - [A Legal Case Study](#)
- [Conclusions](#)
- [External Links](#)

## [Publication](#)

### Producing and Interpreting Crystallographic Journal

## Articles

- [Introduction to Producing and Interpreting Crystallographic Journal Articles](#)
- [Experimental: Sample and Experimental Details](#)
- [Experimental: Structural Model Determination Details](#)
- [Experimental: Rietveld Refinement Details](#)
- [Results: Rietveld Refinement Results](#)
- [Results: Tables of Geometric Parameters](#)
- [Discussion: Description of the Structure](#)
- [Discussion: Comparison](#)
- [Supplementary Material](#)

## Use of CIF (Crystallographic Information Format)

- [Introduction to Powder Crystallographic Information File \(CIF\)](#)
- [General CIF Terminology](#)
- [Example Sections of a CIF](#)

## Use of Structural Databases

- [Introduction to Structural Databases](#)
- [General Strategies for Searching Structural Databases](#)
- [The Databases](#)
- [Case Study from the Cambridge Structural Database](#)

## External Links

[Welcome Page](#)[Course Index](#)[Navigation](#)

---

© Copyright 1997-2006. [Birkbeck College, University of London.](#)