بسم الله الرحمن الرحيم

همه امتیازهای این پایان نامه به دانشگاه بوعلی سینا تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب پایان نامه در مجلات، کنفرانس ها و یا سخنرانی ها، باید نام دانشگاه بوعلی (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان نامه) و نام دانشجو با ذکر ماخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه:

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک (حالت جامد)

عنوان:

به کارگیری پراکندگی یون‌های هلیوم برای تعیین انرژی فعال سازی پخش Mn در آلیاژ Al-Pd-Mn

استاد راهنما:

دکتر فریدون سموات

استاد مشاور:

دکتر سعیده زریونی

پژوهشگر:

پریسا طراوتی احمد

شهریور سال ۱۳۸۹

دانشگاه بوعلی سینا

مشخصات پایان نامه تحصیلی

عنوان پایان نامه : به کارگیری پراکندگی یونی برای تعیین انرژی فعال سازی Mn در آلیاژ Al-Pd-Mn

نام نویسنده: پریسا طراوتی احمد

نام استاد راهنما: دکتر فریدون سموات

نام استاد مشاور: دکتر سعیده زریونی

دانشکده : علوم	**گروه آموزشی: فیزیک**	
رشته تحصیلی: فیزیک	**گرایش تحصیلی: حالت جامد**	**مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد**
تاریخ تصویب: ۱۳۸۸/۰۷/۱۲	**تاریخ دفاع: ۱۳۸۹/۰۶/۲۸**	**تعداد صفحات:۱۱۵**

چکیده:

شبه بلورها به عنوان جامدات جدیدی که تقارن ممنوعه بلورها را نشان می‌دادنددر سال ۱۹۸۴، توسط دن شچمان و دیگران کشف شدند ، آنها نه مثل بلورها کاملا منظم‌اند و نه مثل آمورف‌ها نامنظم ، از این جهت در طبقه بندی مواد جایگاه خاصی را دارند. آنها از خود نظم خوبی را نشان می‌دهند ولی غیر دوره‌ای هستند و معمولا آلیاژهای دوتایی و سه‌تایی از عناصر فلزی می‌باشند. شبه بلورها دارای خواص منحصر به فردی در ساختار خود هستند و به همین دلیل مورد علاقه فیزیکدانان علم سطح می‌باشند. برای مطالعه سطح یک شبه بلور روش‌های متفاوتی وجود دارد ، یکی از آنها تکنیک پراکندگی یون‌های کم انرژی (LEIS) می‌باشد. حساسیت بسیار زیاد این تکنیک به خارجی‌ترین لایه‌های اتمی باعث شده است که از این تکنیک به عنوان ابزار منحصر به فردی برای آنالیز سطح استفاده شود. در این روش از پرتو تک انرژی (۱۰۰ eV -۱۰ keV) یون‌های گاز بی‌اثر یا قلیایی استفاده می‌شود.

ابتدا نمونه در یک اتاقک خلاء بسیار بالا توسط یک سری "بمباران- حرارت" تمیز شد، بعد منگنز بوسیله تبخیر کننده روی نمونه رسوب داده شد و سپس تغییرات ترکیب سطح بر حسب تابعی از درجه حرارت در گستره حرارتی ۳۵۵ K تا ۵۷۵K مورد بررسی قرار گرفت. در نهایت انرژی فعال سازی پخش Mn در شبه بلور Al-Pd-Mnبه مقدار (۰/۲۰±۰/۰۱)eV تعیین شد.

واژه‌های کلیدی: شبه‌بلور ، تکنیک پراکندگی یون‌های کم انرژی ، انرژی فعال سازی ، پخش.

دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان:

به کارگیری پراکندگی یون‌های هلیوم برای تعیین انرژی فعال سازی پخش Mn در آلیاژ Al-Pd-Mn

استاد راهنما:
دکتر فریدون سموات
پژوهشگر:
پریسا طراوتی احمد

کمیته ارزیابی پایان نامه

۱- استاد راهنما: **دکتر فریدون سموات**.....استادیار فیزیک

۲- استاد مشاور:**دکتر سعیده زریونی** ..... استادیار فیزیک

۳- استاد مدعو: **دکتر محمد ملک جانی**..... استادیار فیزیک

۴- استاد مدعو: **دکتر صفدر حبیبی**..... استادیار فیزیک

دانشکده علوم

گروه فیزیک

جلسه دفاع از پایان‌نامه کارشناسی ارشد

پریسا طراوتی احمد **در رشته فیزیک (گرایش حالت جامد)**

تحت عنوان:

به کارگیری پراکندگی یون‌های هلیوم برای تعیین انرژی فعال سازی پخش Mnدر آلیاژ Al-Pd-Mn

به ارزش ۶ واحد در روز یکشنبه مورخ ۱۳۸۹/۶/۲۸ ساعت ۱۶-۱۴ در محل کلاس ۲ و با حضور اعضای هیأت داوران زیر برگزار گردید و با نمره ۲۰ درجه عالی ارزیابی شد.

ترکیب اعضای هیأت داوران:

ردیف	سمت در هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی ـ گروه/ دانشکده/ دانشگاه	محل امضاء
۱.	استاد راهنما	دکتر فریدون سموات	استادیار- فیزیک/ علوم/ بوعلی سینا	
۲.	استاد مشاور	دکتر سعیده زریونی	استادیار- فیزیک/ علوم/ بوعلی سینا	
۳.	استاد مدعو	دکتر محمد ملک جانی	استادیار- فیزیک/ علوم/ بوعلی سینا	
۴.	استاد مدعو	دکتر صفدر حبیبی	استادیار- فیزیک/ علوم/ بوعلی سینا	

فصل اول

طبقه‌بندی مواد

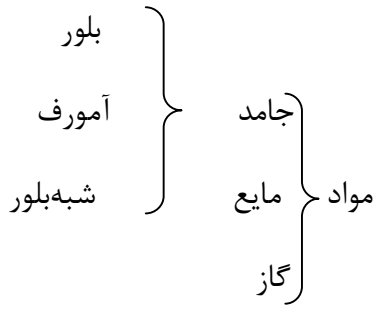
۱-۱ مقدمه‌ای بر مواد

همه چیز اطراف ما را مواد تشکیل می‌دهد، اما مواد چیستند؟ چطور آنها را می‌شناسیم، می‌سازیم و به کار می‌بریم[۱]. مواد همیشه تعیین کننده میزان توسعه فرهنگ بشر بوده‌اند. امروزه مواد در جهش‌های تکنولوژی نقش تعیین کننده‌ای دارند[۲]. علم مواد موضوع وسیعی است که از یک طرف به دنیای میکروسکوپی اتم‌ها و الکترون‌ها مربوط می‌شود و از طرف دیگر حالت جسم را به دنیای ماکروسکوپی عمل و کاربرد مربوط می‌سازد[۱]. خواص و رفتار مواد از ساختار داخلی آن ناشی می‌شود. ساختار داخلی مواد شامل اتم‌ها و چگونگی ارتباط آنها با اتم‌های همسایه در بلورها، مولکول‌هاو میکروساختار آنها می‌شود. مواد باید به گونه‌ای انتخاب شوند که ساختارهای اتمی، بلوری و سایر آرایش‌های داخلی مناسب را داشته باشند. اگر ساختار داخلی مواد در خلال تولید یا مصرف تغییر کند، تغییرات متناظری نیز در خواصی نظیر استحکام، رسانندگی، چگالی، رنگ و غیره حاصل می‌شود. بسیاری از طرح‌های پیشرفته به تولید مواد کاملاً جدید بستگی دارد. مثلاً با موادی که تا چند سال پیش در دسترس بود ساخت ترانزیستور ممکن نبود یا برای توسعه لیزرها به انواع جدیدتری از بلور و شیشه نیاز بود[۱].

خواص یک ماده توسط پاسخ ماده به عوامل خارجی تعیین می‌شود. سه دسته از خواص، بر اساس نوع عملکرد در رابطه با مواد متمایز می‌شوند :

- خواص مکانیکی که انعکاس رفتار مواد تغییر شکل یافته توسط سیستم‌های نیرو است.
- خواص فیزیکی که سنجش رفتار مواد تحت درجه حرارت ، میدان‌های الکتریکی یا مغناطیسی و نور است
- خواص شیمیایی که رفتار مواد در مقابل محیط کم و زیاد مهاجم را نشان می‌دهد[۲].

ماده متشکل از اتم‌هایی است که در برخی از مواد اتم‌ها به صورت گروه‌های تمییزپذیری به نام مولکول گردهم می‌آیند و در برخی دیگر تمییزناپذیرند. گردهمایی اتم‌ها را معمولاً در سه حالت گاز، مایع و جامد رده بندی می‌کنند. مواد جامد نیز به سه گروه مواد بلوری، آمورف و شبه‌بلورها تقسیم-بندی می‌شوند. که در اینجا اشاره مختصری به بلورها و آمورف‌ها داشته و به معرفی اصولی شبه‌بلورها می‌پردازیم.



۱-۲ بلور چیست؟

تقریباً اکثر موادی که ما امروزه با آنها سروکار داریم، بلورند. یعنی به صورت مجموعه‌ای از اتم‌ها یا مولکول‌ها هستند که به صورت نقش‌های منظم و مشخصی در کنار هم قرار دارند[۳،۴]. حتی فلزاتی که به طور طبیعی در حالت فلزی یافت می‌شوند اغلب در شکل‌های بلوری هستند اما این ویژگی هنگام ساخت نهایی محصولات فلزی به دلیل قابلیت چکش‌خواری بالا کاملاً از بین می‌رود[۵]. یک بلور آرایه‌ای دوره‌ای و سه بعدی از اتم‌ها یا مولکول‌ها با تناوب انتقالی در طول سه محور اساسی آن است. یک بلور ایده‌ال از تکرار بی‌پایان واحدهای ساختاری هم شکل در فضا که سلول واحد نامیده می‌شود تشکیل شده است. در ساده‌ترین بلورها این واحد ساختاری یک تک اتم است و در اکثر موارد واحد ساختاری شامل چندین اتم یا مولکول است.

هر شبکه سه بعدی توسط سه بردار انتقال اساسی $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ به گونه‌ای تعریف می‌شود که آرایش اتم‌ها از دید هر نقطه $\vec{r}',\vec{r}$ در معادله [۱-۱] یکسان به نظر آید.

$$\vec{r}' = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \qquad [۱-۱]$$

مجموعه نقاط $\vec{r}'$ که به ازای تمام مقادیر درست u,v,w از رابطه فوق بدست می‌آیند، شبکه را توصیف می‌کنند. $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ بردارهای پایه شبکه و u,v,w عددهای صحیح هستند. ساختار بلور هنگامی شکل می‌گیرد که آرایه‌ای از اتم‌ها بطور یکسان به هر نقطه شبکه متصل شود. می‌توان گفت ساختار یک بلور از یک شبکه به اضافه پایه‌ای از اتم‌ها تشکیل شده است.

۱-۲-۱ عمل‌های تقارنی در بلورها

عمل‌های تقارنی دریک بلور عمل‌هایی هستند که ساختار آن را به شکل اولش برمی‌گرداند. این عمل‌ها شامل عمل‌های انتقال شبکه، عمل‌های گروه نقطه‌ای و عمل‌های مرکب هستند.

الف) عمل انتقال شبکه

عمل انتقال شبکه عبارت از جابه‌جا شدن بلور به موازات خودش به اندازه بردار انتقال بلورT است.

$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \qquad [۲-۱]$$

ب) عمل‌های گروه نقطه‌ای شبکه

عمل‌های نقطه‌ای شامل عمل‌های دوران و بازتاب می‌باشد که وقتی حول یک نقطه شبکه اعمال می‌شوند شبکه ناوردا باقی می‌ماند. برای مثال می‌توان دوران یا بازتاب‌هایی حول نقاط شبکه یا بعضی نقاط خاص اعمال کرد که بلور را به حالت اولیه خود برگرداند.

ج) عمل‌های مرکب

عمل‌های مرکب عمل‌هایی هستند که از ترکیب عمل‌های انتقال و عمل‌های نقطه‌ای (دوران و بازتاب) حاصل می‌شوند.

۱-۲-۲ انواع اصلی شبکه‌ها

شبکه بلورها را می‌توان با انتقال‌های شبکه‌ای $\vec{T}$ و عمل‌های تقارنی دیگر به شکل اولشان برگردانید. دوران حول محوری که از یک نقطه شبکه می‌گذرد، نمونه یک عمل تقارنی است. شبکه‌هایی را می‌توان یافت که در آنها محورهای دوران یکتایه، دوتایه، سه‌تایه، چهارتایه و شش‌تایه شبکه را به شکل اول آن برمی‌گردانند. این محورها به دوران‌های ۲π ، ۲π/۲، ۲π/۳ ، ۲π/۴ و ۲π/۶ رادیان و ضرایب درست این دوران‌ها مربوطاند. این محورهای دوران به ترتیب با علایم ۱و۲و۳و۴و۶ نشان داده می‌شوند. هیچ شبکه‌ای را نمی‌توان یافت که تحت دوران‌های دیگر، مثل ۲π/۷ رادیان و۲π/۵ رادیان، به شکل اول خود برگردد[۶].

۱-۳ آمورف چیست؟

آرایش نظم اتم‌ها در ماده وجه تمایز بلور با ماده آمورف است. آرایش اتم‌ها یا مولکول‌ها در مواد آمورف، مانند بلورها کاملا منظم نیست. مواد آمورف دارای تناوب بلند برد همان‌طور که بلورها شامل آن می‌باشند، نیستند. برای هدف‌های عملی اگر هیچ نظم بلندبردی بیش از nm ۲-۱، مشخص نباشد جامد به عنوان آمورف شناخته می‌شود. باید توجه داشت که تعریف آمورف بدون در نظر گرفتن ساختار شیمیایی و فقط بر اساس ساختار بی‌نظم می‌باشد.

مواد آمورف را می‌توان به دو گروه عمده تقسیم بندی کرد:

گروه اول آن‌هایی هستند که وقتی ساخته می‌شوند شکل آمورف به خود می‌گیرند، این‌ها مواد سازنده شیشه طبیعی‌اند.

گروه دوم آن‌هایی هستند که معمولا به صورت ساختار بلوری، جامد می‌شوند که می‌توان با سرد کردن سریع ماده مذاب و یا از طریق مایع کردن بخار آن روی یک سطح سرد، آن‌ها را به شکل آمورف در آورد.

از نظر شبکه اتمی عناصر و ترکیبات آنها به سه دسته مواد تک‌بلوری، چند بلوری و آمورف تقسیم بندی می‌شوند. تفاوت این سه دسته از مواد به ترتیب قرار گرفتن اتم‌ها در مواد برمی‌گردد. اتم‌ها در یک بلور دارای نظم بلندبرد و گسترش دوره‌ای و نامتناهی در سه بعد می‌باشند. در مواد چند بلوری، ترتیب اتم‌ها در دو بعد قطع شده و می‌توان آن را به نواحی کوچک‌تر تک بلور تقسیم کرد. درمواد آمورف که شیشه هم نامیده می‌شود نظم بلند برد موجود در بلورها دیده نمی‌شود و نظم کوتاه برد مسئول مستقیم خواص قابل مشاهده در آنها می‌باشد[۴].

۱-۴ معرفی شبه‌بلورها

اساساً سه گروه از مواد وجود دارند که می‌توانیم ساختارشان را بررسی کنیم: بلورها، آمورف‌ها و شبه‌بلورها.

شبه بلورها نوع جدیدی از جامدات هستند که با طبقه‌بندی‌های قبلی مخالفت می‌کنند. آنها نه مثل بلورها به صورت دوره‌ای منظم هستند و نه مثل جامدات آمورف نامنظم هستند. شبه بلورها گروه تقارنی گسسته مثل بلورها دارند و دارای نظم بلند برد کامل می‌باشند اما تقارن انتقالی در سه بعد را ندارند. آنها تقارن‌های ممنوعه بلورشناسی (تقارن‌های پنج‌گانه ، هشت‌گانه ، ده‌گانه و دوازده‌گانه) از خود نشان می‌دهند.

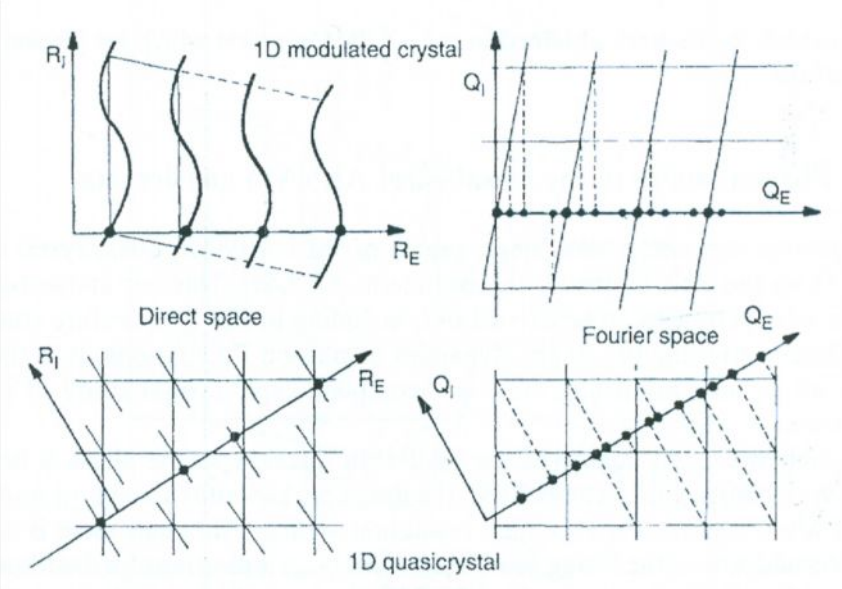
جامدات جدید که تقارن ممنوعه بلورهای عادی را نشان می‌دهد ابتدا توسط دن شچمان[۱] و گروهش در سال ۱۹۸۴، با آلیاژهای Al-Mn , Al-Mn-Si کشف شد. در سال‌های بعد صدها ترکیب دیگر با فاز شبه‌بلوری مشاهده شد. اکثر مواد شبه‌بلوری که تا کنون شناخته شده‌اند آلیاژهای فلزی دوتایی یا سه‌تایی با پایه Al هستند. یا آلیاژهای مشابه که Ga یا Ti نقش Al را بازی می‌کنند[۷]. خواص فیزیکی و مکانیکی شبه بلورها نسبت به فلزات استاندارد، نامعمول است برخی از این خواص نامعمول مربوط به سطح آنها می‌باشد و همین باعث می‌شود که دانشمندان علم سطح به مطالعه این مواد بپردازند[۷].

[۱] Dan Shechtman

۱-۴-۱ الگوی پراش از یک شبه بلور

بلور به عنوان یک ساختار تناوبی فقط دارای تقارن‌هایی از مرتبه ۱،۲،۳،۴،۵،۶ گانه می‌باشد[۸]. در سال ۱۹۱۲ این نکته کشف شد که بلورها اشعه ایکس را به صورت گسسته پراشیده می‌کنند. از طرف دیگر می‌دانیم که الگوی پراش گسسته، ناشی از تناوبی بودن جسم است. و از چند مدل از جمله مدل Penrosetiling استفاده شد تا ثابت شود که الگوی پراش گسسته هم‌چنین می‌تواند از آرایه-های اتمی غیر تناوبی نیز به وجود آید[۹،۱۰،۱۱].

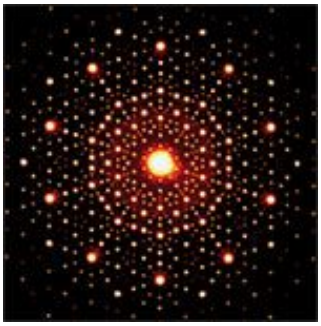
به همین دلیل در سال ۱۹۱۲ کمیته بلورشناسی تعریف جدیدی از بلور را به صورت " هر جسم جامدی که دارای الگوی پراش گسسته باشد" ارائه کرد. پس آن دسته از مواد که دارای الگوی پراش گسسته اما غیر تناوبی بودند را بلور شبه تناوبی یا شبه بلور نامیدند.



شکل (۱-۱): ساختار تناوبی یک بلور و شبه تناوبی یک شبه بلور در فضای حقیقی و وارون.

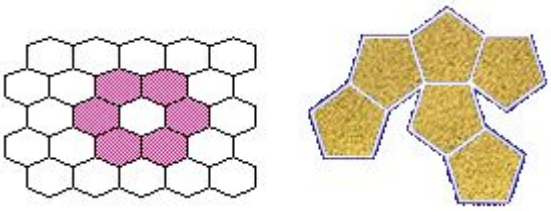
۱-۴-۲ تقارن در شبه بلورها

وجود نقاط تیز در الگوی پراش شبه بلورها نشان می‌دهد که ساختار اتم‌ها در این مواد دارای نظم بلند برد می‌باشد. اما این ساختارها با این نظم، به دلیل دارا بودن محورهای تقارنی از مرتبه پنج، هشت، ده و دوازده گانه نادوره‌ای می‌باشند.



شکل(۱-۲):طرح پراش از یک شبه بلور که تقارن ده‌گانه را نشان می‌دهد.

حال آنکه شبکه‌های بلوری محورهای تقارن دو، سه، چهار و شش گانه از خود نشان می‌دهند. و با دوران‌های خاص تحت زوایای ۶۰ ، ۹۰ ، ۱۲۰ ، ۱۸۰ و ۳۶۰ درجه حول یک محور که از نقطه شبکه می‌گذرد دوباره روی خودشان می‌افتند. اما با یک آرایه از پنج ضلعی‌ها نمی‌توان تمام فضا را پر کرد. زیرا شبکه‌ای با محور دوران پنج گانه، شبکه‌ای که با دوران تحت زاویه ۷۲ درجه روی خودش بیافتد وجود ندارد. این موضوع در شکل (۱-۳) نشان داده شده است. بنابراین شبه بلورها از نظر بلورشناسی دارای تقارن‌های ممنوعه هستند و می‌توان گفت آنها دارای تقارن‌های دورانی ناحیه‌ای هستند.



شکل(۱-۳) : محور تقارن پنج تایه نمی‌تواند در یک شبکه موجود با شد زیرا تمام فضا را نمی‌توان با آن پر کرد.

۱-۴-۳ انواع شبه‌بلورها

شبه بلورها را می‌توان از نظر ساختاری به‌صورت زیر تقسیم بندی کرد :

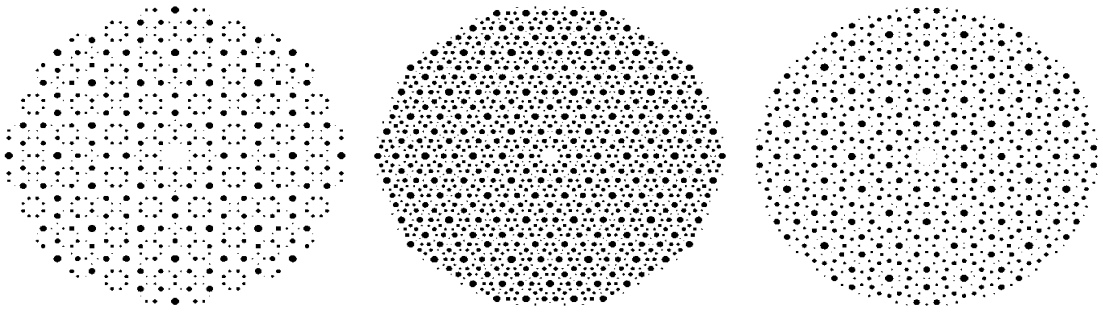
الف) شبه بلورهای پلی گونال[۲]

این دسته از شبه بلورها که دی‌هدرال[۳] هم نامیده می‌شوند، دارای تقارن‌های ۸ ، ۱۰و ۱۲ گانه هستند و توسط داشتن تقارن‌های غیر مجاز بلوری شناخته می‌شوند. این شبه بلورها در یک جهت متناوب هستند، بنابراین در یک جهت شبیه بلورها هستند و در دو جهت دیگر شبه دوره‌ای هستند. در اینجا یک راستای متناوب عمود بر لایه‌های شبه دوره‌ای وجود دارد.

شبه‌بلورها بر اساس تقارن ناحیه‌ای‌شان بصورت زیر نامگذاری می‌شوند.

- اکتاگونال : شبه‌بلورهایی با تقارن ناحیه‌ای ۸ گانه
- دکاگونال : شبه‌بلورهایی با تقارن ناحیه‌ای ۱۰ گانه
- دودکاگونال : شبه بلورهایی با تقارن ناحیه‌ای ۱۲ گانه

در شکل (۱-۴) نمونه‌های شبیه سازی شده با تقارن ۸ ، ۱۰و ۱۲ گانه نشان داده شده است.

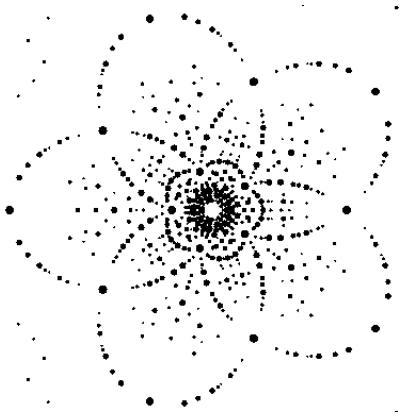


شکل (۱-۴): نمونه‌های شبیه سازی شده از الگوهای پراش.

[۲] Polygonal
[۳] Dihedral

ب) شبه‌بلورهای ایکوسادرال[۴] :

شبه بلورهای ایکوسادرال در هیچ جهتی متناوب نیستند، این مواد در تمام جهات فضا شبه دوره‌ای هستند. شبه بلور Al-Pd-Mn که نمونه آزمایشگاهی ما بوده است ایکوسادرال می‌باشد.



icosahedral QC

شکل(۱-۵) : نمونه شبیه سازی شده از شبه بلور ایکوسادرال.

ج) شبه بلورهای مایع:

شبه‌بلورهای مایع اخیراً کشف شده‌اند و واحدهای ساختاری اساسی شبکه آنها به جای اتم‌ها، توده‌ای از ابر ملکول‌ها هستند. این‌ها شبه بلورهای مصنوعی هستند که کاربردهایی را در فوتونیک پیدا کرده‌اند[۱۲].

[۴] Icosahedral

۱-۴-۴ سیستم‌های شبه بلوری

شبه بلورها را می‌توان به دو دسته پایدار و شبه پایدار تقسیم بندی کرد، که تعداد زیادی از آنها در فاز شبه پایدار است. کشف شبه بلورهایی‌که تقارن‌های ممنوعه بلورهای عادی را نشان می‌داد با کشف آلیاژ Al-Mn شروع شد. این آلیاژ که از طریق عمل‌های سرد کردن سریع بدست آمد و دارای پیک‌های پراش نسبتا تیزی، شبیه پیک‌های براگ بود که تقارن ده‌گانه و ایکوسادرال آن را نشان می‌داد در فاز شبه پایدار است. در مرحله بعدی تاریخ شبه بلورها، فاز ایکوسادرالی Al_6-Li_3-Cu با یک ترکیب متعادل و پایدار و تک دانه‌ای در اندازه میلیمتری که تقارن ۳۰ گانه دارد شکل گرفت. سپس شبه بلورهای ایکوسادرال و پایدار Al-Fe-Mn و Al-Pd-Mn بدست آمد. سیستم Al-Pd-Mn شبه بلوری کامل و مورد بسیار خوبی برای مطالعات پراش است [۷]. دسته جالب دیگری از شبه بلورهای پایدار شامل آلیاژهایی بر پایه عناصر خاکی نایاب می‌باشند. از این دسته می‌توان به آلیاژهای Mg-Zn با تقارن ایکوسادرال اشاره کرد. چون عناصر خاکی نایاب دارای خواص مغناطیسی می‌باشند، به نظر می‌رسد که مطالعه خواص مغناطیسی این دسته از شبه بلورها مبحث جالبی باشد. برخی از شبه بلورهایی که تا کنون کشف کرده‌اند را می‌توان برحسب تقارن‌هایشان بصورت زیر دسته‌بندی کرد.

جدول (۱-۱): تقسیم بندی سیستم های شبه بلوری بر حسب تقارن شان.

ایکوسادرال	*تقارن دوازده تایه*	*تقارن ده تایه*	*تقارن هشت تایه*
Al-Mn	Cr-Ni	Al-Tm	V-Ni-Si
Al-Mn-Si	V-Ni	Al-Cu-Mn	Cr-Ni-Si
Al-Li-Cu	V-Ni-Si	Al-Cu-Fe	Mn-Si
Al-Pd-Mn		Al-Cu-Ni	Mn-Si-Al
Al-Cu-Fe		Al-Cu-Co	Mn-Fe-Si

Al-Mg-Zn Pd-U-Si		Al-Cu-Ci-Si Cr-Ni	

۱-۵ فضای وارون

از آنجا که شبه بلورها، حداقل در یک راستا دارای تناوب نیستند به راحتی نمی‌توان مانند ساختارهای بلوری معمولی در فضای سه بعدی آنها را توصیف کرد. بنابراین پیدا کردن یک فرمالیزم ریاضی که با استفاده از آن بتوان داده‌های الگوی پراش را آنالیز کرد، کار بسیار دشواری است.

در یک بلور ساده، ما از سه عدد صحیح به نام شاخص‌های میلر برای برچسب گذاری صفحات بلوری در فضای سه بعدی استفاده می‌کنیم. زیرا بلورها دارای ساختار تناوبی انتقالی در سه بعد می‌باشند. و به هر ساختار بلوری دو نوع شبکه، یکی شبکهٔ بلوری و دیگری شبکهٔ وارون مربوط می‌شود. طرح پراش یک بلور، طرح شبکه وارون آن است. شبکهٔ بلور یک شبکه در فضای حقیقی است، در حالی که شبکهٔ وارون، شبکه‌ای در فضای فوریه است. بیشتر ویژگی‌های بلور را می‌توان به چگالی جرمی الکترون‌ها مربوط کرد که در بلورهای عادی به صورت سری فوریه زیر نوشته می‌شود:

$$\rho(r) = \frac{1}{V}\sum_{G} \rho(\vec{G}) \ \exp(i\vec{G}.\vec{r}) \qquad [۳-۱]$$

که G بردار شبکه وارون است.

$$G = ha_1^* + ka_2^* + la_3^* \qquad [۴-۱]$$

و a_i^* بردار های محوری شبکه وارون است و مربوط به بردار a_i که در فضای معمولی سلول واحد را تعریف می‌کند می‌شود. و h,k,l اندیس‌های میلر و اعداد درست هستند.

اما با توجه به نکات گفته شده در مورد شبه بلورها، برای توصیف الگوی پراش نیاز به حداقل ۵ بردار مستقل خطی احساس می‌شود. برای توصیف یک شبه بلور پلی گونال از ۵ شاخص و برای توصیف یک شبه بلور ایکوسادرال از ۶ شاخص استفاده می‌کنیم. که این شاخص‌ها را اندیس‌های میلر تعمیم یافته می‌نامیم. در شبه بلورها شکل فوریه چگالی جرمی همچنان وجود دارد و بردارهای محوری شبکه وارون a_i^* ها در طول محورهای پنج گانه یک ایکوسادرال انتخاب می‌شود. و بردار شبکه وارون با شش بردار پایه به صورت زیر می‌باشد.

$$G = n_1a_1^* + n_2a_2^* + n_3a_3^* + n_4a_4^* + n_5a_5^* + n_6a_6^* \qquad [۵-۱]$$

در سیستم مختصات مکعبی بردارهای a_i^* به اندیس‌های میلر مربوط می‌شوند (h,h',k,k',l,l' اعداد درستی و همان مختصات تعمیم یافته میلر می‌باشد). پس ما قادریم مختصات شبه بلورها را با این پارامترها به خوبی توصیف کنیم[۶،۷].