



## Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 'ın kristal yapısının X-ışınları toz kırınım yöntemi ile araştırılması

Levent KARAŞAHİN, Zeliha BAKTİR ve Mehmet AKKURT  
Erciyes Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 38039 Kayseri

### ÖZET

Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> bileşiğinin X-ışınları toz kırınım yöntemi ile kristal yapısı incelendi. Bu amaçla agat havanda toz haline getirilen numunenin kırınım deseni, Bruker Axs D8 Advence Model X-ışınları difraktometresinde, 40 kV ve 40 mA çalışma şartlarında,  $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$  dalga boyunda bakır radyasyonu kullanılarak, 0.02°/sn tarama hızı ile bilgisayar ortamında kaydedildi. Elde edilen kırınım deseni, DIFFRAC PLUS EVA paket programı ile background,  $K\alpha_2$  ve düzleştirme gibi düzeltme işlemleri yapılarak numuneye ait muhtemel pikler tespit edildi. Analitik yöntem ile yapılan kristal yapı incelemesinde, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>'ın kristal sistemi monoklinik ve birim hücre parametreleri,  $a = 8.9224 \text{ \AA}$ ,  $b = 5.2220 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.0493 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 101.28^\circ$  olarak bulundu. Ayrıca yaptığımız işlemlerin doğruluğunu TREOR90, DICVOL91 ve ITO13 bilgisayar programlarını da kullanarak, indisleme işlemini yapıp benzer sonuçlar elde edildi. Monoklinik sistemde birim hücre parametreleri sırasıyla,  $[a = 8.903(1) \text{ \AA}, b = 5.238(1) \text{ \AA}, c = 6.0489(5) \text{ \AA}, \beta = 101.21(1)^\circ]$ ,  $[a = 8.904(1) \text{ \AA}, b = 5.237(1) \text{ \AA}, c = 6.0491(8) \text{ \AA}, \beta = 101.23(1)^\circ]$  ve  $[a = 8.9050 \text{ \AA}, b = 5.2370 \text{ \AA}, c = 6.0470 \text{ \AA}, \beta = 101.25^\circ]$  olarak elde edildi. Bulunan sonuçlar, tek kristal yapı analizi ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırıldı. Analitik yöntem, bilgisayar programları ve tek kristal analizi ile elde edilen sonuçların birbirleri ile hata sınırları içinde uyumlu olduğu gözlemlendi.

### Anahtar Kelimeler

X-ışını, toz kırınım tekniği, analitik yöntem, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, indisleme.

## The research of the crystal structure of Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> by using x-ray powder diffraction method

### ABSTRACT

The crystal structure of Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> was investigated by X-ray powder diffraction method. For this purpose the diffraction pattern of the sample, which is grinded in agate mortar, was saved in computer with Bruker Axs D8 Advence Model X-ray diffractometer, 40 kV and 40 mA work condition, using  $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$  wavelength Cu radiation and 0.02°/s scanning speed. Some possible peaks which belong to the sample were determined by making corrections in the obtained diffraction pattern by using DIFFRAC PLUS EVA package programme and by making operations such as background,  $K\alpha_2$  and smoothing. In the crystal structure study done by the analytical method, the crystal structure monoclinic and unit cell parameters of Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> were found as  $a = 8.9224 \text{ \AA}$ ,  $b = 5.2220 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.0493 \text{ \AA}$  and  $\beta = 101.28^\circ$ . We also controlled the correctness of process by using TREOR90, DICVOL91, ITO13 computer programmes, indexing and similar results were obtained. Unit cell parameters in the monoclinic system were obtained as  $[a = 8.903(1) \text{ \AA}, b = 5.238(1) \text{ \AA}, c = 6.0489(5) \text{ \AA}, \beta = 101.21(1)^\circ]$ ,  $[a = 8.904(1) \text{ \AA}, b = 5.237(1) \text{ \AA}, c = 6.0491(8) \text{ \AA}, \beta = 101.23(1)^\circ]$  and  $[a = 8.9050 \text{ \AA}, b = 5.2370 \text{ \AA}, c = 6.0470 \text{ \AA}, \beta = 101.25^\circ]$ . The obtained results were computer with the results of single crystal structure analysis. The results obtained with analytical method, computer programmes and single crystal analysis were observed to be harmonious with each other within the error limits.

### Keywords

X-Ray, Powder Diffraction Technique, Analytical Method, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, Indexing.

\* Sorumlu yazar (Corresponding author) e-posta: [zelihabaktir@hotmail.com](mailto:zelihabaktir@hotmail.com), [akkurt@erciyes.edu.tr](mailto:akkurt@erciyes.edu.tr)

## 1. Giriş

X-ışınları toz kırınım metodu ile  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (sodyum karbonat) maddesini inceledik.  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  çamaşır sodası, çamaşır tozu gibi bilinen bir karbonik asit sodyum tuzudur.  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ , cam yapımında, kâğıt hamuru hazırlanmasında, deterjan yapımında sodyum silikat ve sodyum fosfat gibi kimyasallarla kullanılır [1].

TREOR90 [2], ITO13 [3] ve DICVOL91 [4] bilgisayar programlarını, Analitik yönteme göre daha çabuk sonuç vermesi ve farklı alternatiflerin denenmesine izin verdiği için kullandık. İşlemlerde kullanılan TREOR90, ITO13 ve DICVOL91 programları, sırasıyla, toz kırınım desenini, deneme yanılma yöntemi ile düşük simetrik sistemler için ve açı, birim hücre kenar uzunluklarını değiştirerek indislemeye çalışmaktadır. Sonuçlar kendi içinde ve literatür ile kıyaslandı. Hata sınırları içinde sonuçların uygunluğu gözlemlendi.

Yeteri kadar büyük ve kaliteli tek kristal numune elde etmenin güç olduğu durumlarda, toz kırınım tekniği oldukça faydalıdır. Bu teknik kullanılarak, kristal sistemi, birim hücre parametre değerlerini belirlemek, kırınım desenini elde etmek, indislemek ve uzay grubunu tayin etmek mümkün olabilmektedir. Kırınım datası kaliteli ve yeter sayıda ise, kristal yapı tayini de yapılabilmektedir.

Bu çalışmada,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  'ın toz kırınım metoduyla analitik ve bilgisayar programları kullanılarak kristal yapısı araştırılmış ve elde edilen sonuçlar sunulmuştur.

## Deney

Kristal yapı hakkında bilgi edinebilmek amacıyla en sık kullanılan deneysel metotlardan birisi de toz kırınım metodudur. Toz kırınım metodunun en büyük avantajı tek kristal kullanmadan kırınım desenini elde etmektir. X-ışınları toz kırınım yöntemi ile incelenecek numunelerin, çok ince, toz yapıda olması gerekir.  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  bileşiği agat havanda öğütüldü. Toz kırınım deseni Bruker Axs D8 Advance Model X-ışınları toz difraktometresinde 40kV tüp voltajı, 40mA tüp akımı ile 0,02°/sn tarama hızı çalışma şartlarında bakır hedefli bir tüpte Ni filtre kullanılarak  $\lambda = 1.540598\text{Å}$  dalga boylu bakır radyasyonu ile elde edildi (Şekil 1). Başlangıç açısı  $2\theta = 5^\circ$  ve bitiş açısı  $2\theta = 90^\circ$  olarak ayarlandı.

Böylece kırınım desenindeki Bragg yansımalarının açılal konum ve bağıl şiddetleri belirlendi. (Tablo 1.).

Bir cismin toz kırınım deseni onun karakteristiğidir ve cisim tanıyan bir tür parmak izi gibidir. Tablo 1 'de bu desene ait  $d$ ,  $2\theta$ ,  $I$  ve  $\%I/I_0$  değerleri verilmiştir. Kırınım deseni üzerinde background,  $K_{\alpha 2}$  ve düzleştirme gibi düzeltmeler DIFFRAC PLUS EVA programı yardımıyla yapıldı.  $d$ ,  $2\theta$ ,  $I$  ve  $\% I/I_0$  değerleri tayin edildi ve bu değerler analitik metot ve daha sonra bilgisayar programları ile yapılan işlemlerde kullanıldı.

Analitik metotta amaç toz kırınım deseni verilerini simetrisi en yüksek olan kristal sistemine uydurabilmektir. Bu nedenle yedi kristal sisteminden simetrisi en yüksek olan kübik sisteminden başlanır ve simetri derecesine göre, numunenin kırınım deseni her bir kristal sistemi için değerlendirilir.

Numuneden elde edilen kırınım deseni ilk olarak yüksek simetriye sahip kübik kristal sisteminde incelendi. Bu amaçla kübik test yapıldı. Test için elde ettiğimiz  $2\theta$  değerleri kullanılarak  $\sin^2\theta$  değerleri bulundu. Bu değerler kullanılarak yapılan tablo içerisinde tekrar eden değerler bulundu. Kübik simetri için yapılan işlemler olumlu sonuç vermedi.

$\text{Na}_2\text{CO}_3$  'ın toz kırınım deseni tetragonal, hekzagonal, rombohedral ve ortorombik kristal sistemleri için de indislenmeye çalışıldı. Bu sistemleri çözmek için yapılan tablolarda hiçbir çözüm elde edilemedi. Kristal sistemleri için uyum sağlanamadı. Numune daha sonra daha düşük simetrik monoklinik kristal sisteme göre indislenmeye çalışıldı. Monoklinik kristal sistemlerde düzlemler arası uzaklık,

$$d_{hkl} = \frac{l}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} + \frac{2hl}{ac} \cos\beta}} + \frac{k^2}{b^2}} \quad (1)$$

olarak verilir. Bu  $d_{hkl}$  ifadesinde  $l=0$  için bazı kabullenimler yaparak  $\sin^2\theta$  'yi;

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2 h^2}{4a^2 \sin^2\beta} + \frac{\lambda^2 k^2}{4b^2} \quad (2)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada aşağıdaki kabulleri yaparsak;

$$A = \frac{\lambda^2}{4a^2 \sin^2 \beta}, B = \frac{\lambda^2}{4b^2}$$

dersek  $\sin^2 \theta$  ifadesini iki şekilde yazabiliriz:

$$\sin^2 \theta_{hkl} = q_{hkl} = Ah^2 + Bk^2 + Cl^2 - Dhl \quad (3)$$

$$\sin^2 \theta_{hk\bar{l}} = q_{hk\bar{l}} = Ah^2 + Bk^2 + Cl^2 + Dhl$$

yazılabilir. Yukarıdaki ifadelerde  $h=0$  için C sabitini bulabiliriz.

$$C = \frac{\lambda^2}{4c^2 \sin^2 \beta} \quad (4)$$

Bu ifadelerin farklarını alarak;

$$q_{hk\bar{l}} - q_{hkl} = 2Dhl \quad (5)$$

bulunur. Burada D:

$$D = \frac{\lambda^2 \cos^2 \beta}{2ac \sin^2 \beta} \quad (6)$$

Bu ifadeleri elde ettikten sonra daha önce ortorombik kristal yapı araştırmasında kullandığımız fark tablosu kullanılarak tablo içerisinde 1, 2, 3, 4, 5 gibi katlara sahip olan sayıları tespit ettik. Bu farklardan uygun olanlar seçilerek  $q_{hk\bar{l}} - q_{hkl} = 2Dhl$  denkleminde çözüm veren D değerleri için çözümler arandı. Ortorombik sistem için hazırlanan fark tablosu

monoklinik test içinde kullanıldı (Tablo2). Tablodaki herhangi bir fark değerini çözüm kabul ederek  $k=0$  düzlemi için çözümler arandı. A ve C için çözümler bulunduktan sonra kırınım desenimizdeki piklerin indislenip indislenmediğine bakıldı. Bu işlemlere geçerli bir çözüm elde edilene kadar devam edildi. Çözüm bulunamaması durumunda,  $k=1$  için çözümler araştırıldı. A, B, C ve D sabitleri için çözümler elde edilmeye çalışıldı ve bu değerler yardımıyla kırınım deseni böylece analitik olarak indislendi (Tablo 3.). Yaptığımız işlemler neticesinde piklerden birkaçı dışında tamamının indislenebildiği görüldü. Böylece yaptığımız işlemlerin ve bulmuş olduğumuz sabitlerin doğru olduğu kanaatine varıldı (Tablo 4.). Bu sabitler kullanılarak a, b, c,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  birim hücre örgü parametreleri bulunabilir. Burada:

$$a = \sqrt{\frac{\lambda^2}{4A \sin^2 \beta}}$$

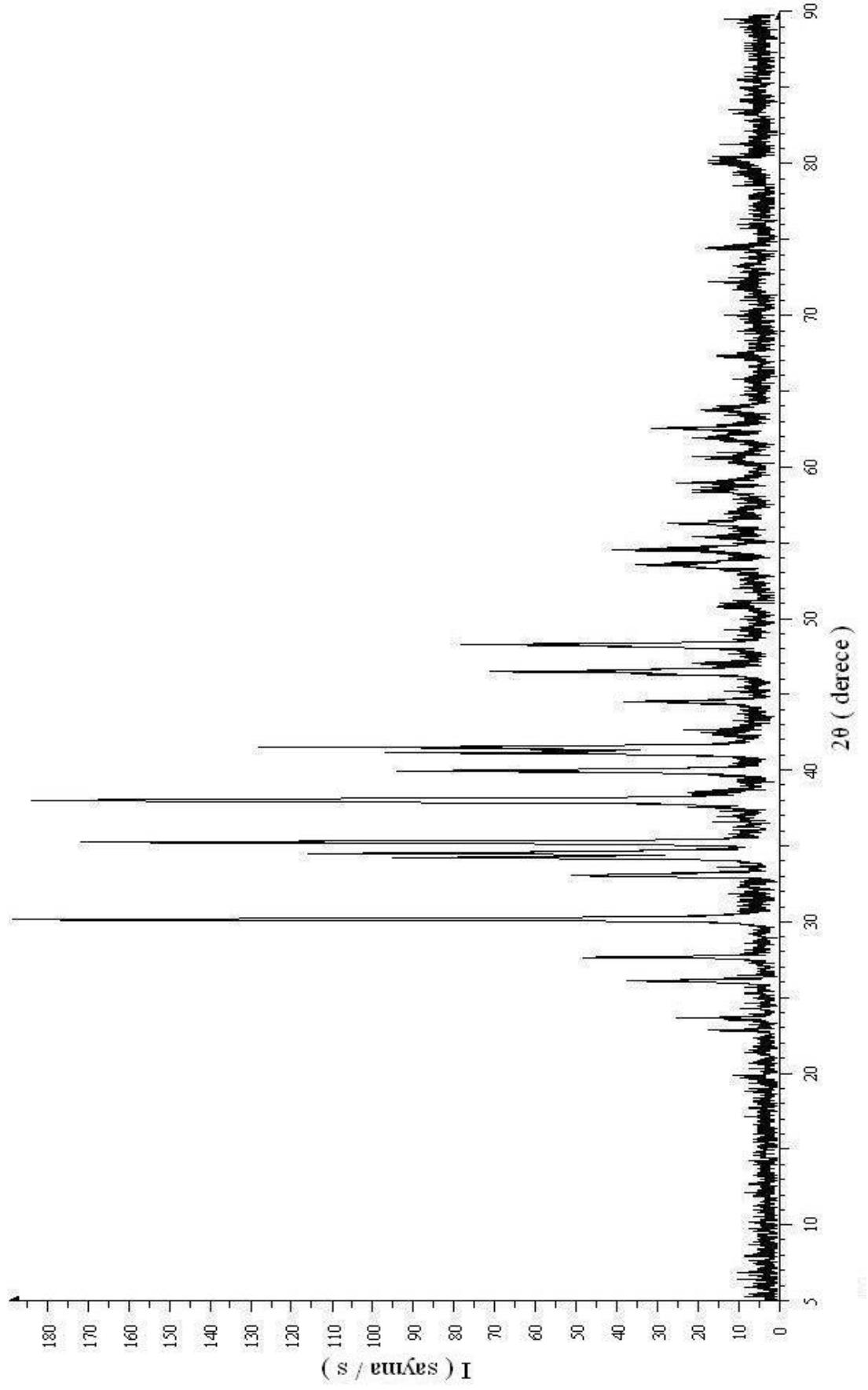
$$b = \sqrt{\frac{\lambda^2}{4B}} \quad (7)$$

$$c = \sqrt{\frac{\lambda^2}{4C^2 \sin^2 \beta}}$$

$$\cos \beta = \frac{D}{2\sqrt{AC}}$$

denklemleri ile bulundu.

Analitik yöntemde elde ettiğimiz sonuçların doğruluğunu tespit etmek için, TREOR90, ITO13 ve DICVOL91 bilgisayar programlarını da kullandık.



Şekil 1.  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  'a ait X-ışınları toz kırınım deseni.

Tablo 1. Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> toz kırınım deseninin verileri

<b>d (Å)</b>	<b>2θ (°)</b>	<b>I (darbe/s)</b>	<b>% I/I<sub>0</sub></b>	<b>d (Å)</b>	<b>2θ (°)</b>	<b>I (darbe/s)</b>	<b>% I/I<sub>0</sub></b>
4.48390	19.784	2.45	1.9	1.93119	47.016	15.2	6.0
3.89713	22.800	8.94	6.5	1.88352	48.280	52.0	39.5
3.76998	23.580	15.0	10.9	1.88131	48.341	36.2	26.2
3.41656	26.060	21.5	15.6	1.87987	48.380	26.2	19.9
3.22934	27.600	35.1	25.4	1.87042	48.640	9.43	7.2
2.96463	30.120	138	100.0	1.71733	53.301	10.1	7.7
2.84135	31.460	8.32	6.3	1.71140	53.500	22.4	16.2
2.71219	33.000	31.9	23.2	1.70880	53.588	19.8	12.45
2.61972	34.200	49.0	37.2	1.70314	53.780	10.1	7.7
2.59762	34.500	79.0	57.3	1.68102	54.546	16.4	12.5
2.58310	34.700	9.67	7.4	1.67779	54.660	15.3	11.1
2.54613	35.220	128	93.1	1.65711	55.400	10.9	7.9
2.45324	36.600	10.9	8.3	1.63273	56.301	15.7	11.4
2.43206	36.930	7.97	6.1	1.57060	58.740	9.16	7.0
2.39518	37.520	10.1	7.3	1.56478	58.980	12.8	9.3
2.36842	37.960	135	97.6	1.52760	60.564	7.82	5.9
2.35766	38.140	31.2	22.39	1.52451	60.699	13.2	9.6
2.25563	39.937	62.4	45.3	1.49562	62.000	13.2	9.5
2.24680	40.100	13.2	9.6	1.48203	62.632	21.0	13.68
2.19342	41.120	59.9	43.4	1.47469	62.980	9.86	7.5
2.18227	41.340	35.8	27.2	1.45688	63.840	10.3	7.5
2.17382	41.508	76.7	58.2	1.27319	74.460	10.5	7.6
2.11772	42.660	12.3	8.9	1.19145	80.560	9.47	7.2
2.03259	44.540	18.7	13.6	1.18198	81.340	13.1	9.5
2.00530	45.180	8.55	6.5	1.15501	83.660	8.61	6.5
1.94905	46.559	47.3	36.0	1.09281	89.640	8.88	6.7

Tablo 2. Monoklinik test için kullanılan fark tablosunun bir kısmı

	2θ	Sin <sup>2</sup> θ	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	
1	19,7841	0,02951	0																									
2	22,8001	0,03907	0,00956	0																								
3	23,5799	0,04175	0,01224	0,00268	0																							
4	26,0599	0,05083	0,02132	0,01176	0,00908	0																						
5	27,5998	0,05690	0,02738	0,01783	0,01515	0,00607	0																					
6	30,1200	0,06751	0,03800	0,02844	0,02576	0,01668	0,01061	0																				
7	31,4599	0,07350	0,04398	0,03443	0,03175	0,02266	0,01660	0,00599	0																			
8	32,9998	0,08066	0,05115	0,04160	0,03892	0,02983	0,02377	0,01315	0,00717	0																		
9	34,1999	0,08646	0,05695	0,04739	0,04471	0,03563	0,02956	0,01895	0,01296	0,00580	0																	
10	34,4999	0,08794	0,05842	0,04887	0,04619	0,03710	0,03104	0,02042	0,01444	0,00727	0,00148	0																
11	34,7000	0,08893	0,05942	0,04986	0,04718	0,03810	0,03203	0,02142	0,01543	0,00826	0,00247	0,00099	0															
12	35,2202	0,09153	0,06202	0,05246	0,04978	0,04070	0,03463	0,02402	0,01803	0,01087	0,00507	0,00359	0,00260	0														
13	36,6000	0,09859	0,06908	0,05952	0,05684	0,04776	0,04169	0,03108	0,02509	0,01793	0,01213	0,01065	0,00966	0,00706	0													
14	36,9303	0,10032	0,07080	0,06125	0,05857	0,04948	0,04342	0,03280	0,02682	0,01965	0,01386	0,01238	0,01139	0,00879	0,00173	0												
15	37,5199	0,10343	0,07392	0,06436	0,06168	0,05260	0,04653	0,03592	0,02993	0,02277	0,01697	0,01549	0,01450	0,01190	0,00484	0,00311	0											
16	37,9600	0,10578	0,07627	0,06671	0,06403	0,05495	0,04888	0,03827	0,03228	0,02512	0,01932	0,01784	0,01685	0,01425	0,00719	0,00546	0,00235	0										
17	38,1399	0,10675	0,07723	0,06768	0,06500	0,05592	0,04985	0,03924	0,03325	0,02608	0,02029	0,01881	0,01782	0,01522	0,00816	0,00643	0,00332	0,00097	0									
18	39,9367	0,11662	0,08711	0,07755	0,07487	0,06579	0,05973	0,04911	0,04313	0,03596	0,03016	0,02869	0,02769	0,02509	0,01803	0,01631	0,01319	0,01084	0,00988	0								
19	40,1004	0,11754	0,08803	0,07847	0,07579	0,06671	0,06064	0,05003	0,04404	0,03688	0,03108	0,02961	0,02861	0,02601	0,01895	0,01723	0,01411	0,01176	0,01079	0,00092	0							
20	41,1198	0,12333	0,09382	0,08426	0,08158	0,07250	0,06643	0,05582	0,04983	0,04267	0,03687	0,03540	0,03440	0,03180	0,02474	0,02302	0,01990	0,01755	0,01658	0,00671	0,00579	0						
21	41,3403	0,12460	0,09509	0,08553	0,08285	0,07377	0,06770	0,05709	0,05110	0,04394	0,03814	0,03666	0,03567	0,03307	0,02601	0,02428	0,02117	0,01882	0,01785	0,00798	0,00706	0,00127	0					
22	41,5077	0,12557	0,09605	0,08650	0,08382	0,07473	0,06867	0,05805	0,05207	0,04490	0,03911	0,03763	0,03664	0,03404	0,02698	0,02525	0,02214	0,01979	0,01882	0,00894	0,00803	0,00223	0,00097	0				
23	42,6602	0,13231	0,10279	0,09324	0,09056	0,08147	0,07541	0,06480	0,05881	0,05164	0,04585	0,04437	0,04338	0,04078	0,03372	0,03199	0,02888	0,02653	0,02556	0,01568	0,01477	0,00898	0,00771	0,00674	0			
24	44,5404	0,14362	0,11411	0,10455	0,10187	0,09279	0,08672	0,07611	0,07012	0,06296	0,05716	0,05569	0,05469	0,05209	0,04503	0,04331	0,04019	0,03784	0,03687	0,02700	0,02608	0,02029	0,01902	0,01806	0,01131	0		
25	45,1798	0,14756	0,11805	0,10849	0,10581	0,09673	0,09066	0,08005	0,07406	0,06689	0,06110	0,05962	0,05863	0,05603	0,04897	0,04724	0,04413	0,04178	0,04081	0,03093	0,03002	0,02423	0,02296	0,02199	0,01525	0,00394	0	
26	46,5592	0,15620	0,12669	0,11713	0,11445	0,10537	0,09930	0,08869	0,08270	0,07553	0,06974	0,06826	0,06727	0,06467	0,05761	0,05588	0,05277	0,05042	0,04945	0,03957	0,03866	0,03287	0,03160	0,03063	0,02389	0,01258	0,00864	
27	47,0155	0,15910	0,12959	0,12003	0,11735	0,10827	0,10220	0,09159	0,08560	0,07844	0,07264	0,07116	0,07017	0,06757	0,06051	0,05878	0,05567	0,05332	0,05235	0,04248	0,04156	0,03577	0,03450	0,03353	0,02679	0,01548	0,01154	
28	48,2801	0,16726	0,13774	0,12819	0,12551	0,11642	0,11036	0,09974	0,09376	0,08659	0,08080	0,07932	0,07833	0,07573	0,06866	0,06694	0,06383	0,06148	0,06051	0,05063	0,04971	0,04392	0,04266	0,04169	0,03495	0,02363	0,01970	
29	48,3404	0,16765	0,13814	0,12858	0,12590	0,11682	0,11075	0,10014	0,09415	0,08698	0,08119	0,07971	0,07872	0,07612	0,06906	0,06733	0,06422	0,06187	0,06090	0,05103	0,05011	0,04432	0,04305	0,04208	0,03534	0,02403	0,02009	
30	48,3798	0,16791	0,13839	0,12884	0,12616	0,11707	0,11101	0,10039	0,09441	0,08724	0,08145	0,07997	0,07898	0,07638	0,06931	0,06759	0,06448	0,06213	0,06116	0,05128	0,05036	0,04457	0,04330	0,04234	0,03560	0,02428	0,02035	
31	48,6400	0,16961	0,14009	0,13054	0,12786	0,11877	0,11271	0,10209	0,09611	0,08894	0,08315	0,08167	0,08068	0,07808	0,07101	0,06929	0,06618	0,06383	0,06286	0,05298	0,05206	0,04627	0,04501	0,04404	0,03730	0,02598	0,02205	
32	53,3008	0,20119	0,17168	0,16212	0,15944	0,15036	0,14430	0,13368	0,12770	0,12053	0,11473	0,11326	0,11227	0,10966	0,10260	0,10088	0,09776	0,09541	0,09445	0,08457	0,08365	0,07786	0,07659	0,07563	0,06889	0,05757	0,05364	
33	53,5001	0,20259	0,17308	0,16352	0,16084	0,15176	0,14569	0,13508	0,12909	0,12193	0,11613	0,11465	0,11366	0,11106	0,10400	0,10227	0,09916	0,09681	0,09584	0,08597	0,08505	0,07926	0,07799	0,07702	0,07028	0,05897	0,05503	
34	53,5881	0,20321	0,17369	0,16414	0,16146	0,15237	0,14631	0,13570	0,12971	0,12254	0,11675	0,11527	0,11428	0,11168	0,10462	0,10289	0,09978	0,09743	0,09646	0,08658	0,08567	0,07988	0,07861	0,07764	0,07090	0,05959	0,05565	
35	53,7804	0,20456	0,17505	0,16549	0,16281	0,15373	0,14766	0,13705	0,13106	0,12390	0,11810	0,11662	0,11563	0,11303	0,10597	0,10424	0,10113	0,09878	0,09781	0,08794	0,08702	0,08123	0,07996	0,07899	0,07225	0,06094	0,05700	
36	54,5463	0,20998	0,18046	0,17091	0,16823	0,15915	0,15308	0,14247	0,13648	0,12931	0,12352	0,12204	0,12105	0,11845	0,11139	0,10966	0,10655	0,10420	0,10323	0,09335	0,09244	0,08665	0,08538	0,08441	0,07767	0,06636	0,06242	
37	54,6601	0,21079	0,18127	0,17172	0,16904	0,15995	0,15389	0,14328	0,13729	0,13012	0,12433	0,12285	0,12186	0,11926	0,11220	0,11047	0,10736	0,10501	0,10404	0,09416	0,09325	0,08746	0,08619	0,08522	0,07848	0,06717	0,06323	
38	55,4004	0,21608	0,18657	0,17701	0,17433	0,16525	0,15918	0,14857	0,14258	0,13542	0,12962	0,12814	0,12715	0,12455	0,11749	0,11576	0,11265	0,11030	0,10933	0,09946	0,09854	0,09275	0,09148	0,09051	0,08377	0,07246	0,06852	
39	56,3006	0,22258	0,19307	0,18351	0,18083	0,17175	0,16568	0,15507	0,14908	0,14192	0,13612	0,13465	0,13365	0,13105	0,12399	0,12227	0,11915	0,11680	0,11583	0,10596	0,10504	0,09925	0,09798	0,09702	0,09027	0,07896	0,07502	
40	58,7398	0,24054	0,21102	0,20147	0,19879	0,18970	0,18364	0,17303	0,16704	0,15987	0,15408	0,15260	0,15161	0,14901	0,14195	0,14022	0,13711	0,13476	0,13379	0,12391	0,12300	0,11721	0,11594	0,11497	0,10823	0,09692	0,09298	
41	58,9803	0,24233	0,21282	0,20326	0,20059	0,19150	0,18544	0,17482	0,16884	0,16167	0,15587	0,15440	0,15341	0,15080	0,14374	0,14202	0,13890	0,13655	0,13559	0,12571	0,12479	0,11900	0,11773	0,11677	0,11003	0,09871	0,09478	
42	60,6639	0,25427	0,22476	0,21520	0,21253	0,20344	0,19738	0,18676	0,18078	0,17361	0,16781	0,16634	0,16535	0,16274	0,15568	0,15396	0,15084	0,14849	0,14753	0,13765	0,13673	0,13094	0,12967	0,12871	0,12197	0,11065	0,10672	
43	60,6995	0,25530	0,22579	0,21624	0,21356	0,20447	0,19841	0,18779	0,18181	0,17464	0,16885	0,16737	0,16638	0,16378	0,15671	0,15499	0,15188	0,14953	0,14856	0,13868	0,13776	0,13197	0,13070	0,12974	0,12300	0,1116		

Tablo 2. Monoklinik test için kullanılan fark tablosunun bir kısmı(devam)

	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52			
1																														
2																														
3																														
4																														
5																														
6																														
7																														
8																														
9																														
10																														
11																														
12																														
13																														
14																														
15																														
16																														
17																														
18																														
19																														
20																														
21																														
22																														
23																														
24																														
25																														
26	0																													
27	0,00290	0																												
28	0,01106	0,00816	0																											
29	0,01145	0,00855	0,00039	0																										
30	0,01171	0,00881	0,00065	0,00026	0																									
31	0,01341	0,01051	0,00235	0,00196	0,00170	0																								
32	0,04500	0,04209	0,03394	0,03354	0,03329	0,03159	0																							
33	0,04639	0,04349	0,03533	0,03494	0,03468	0,03298	0,00140	0																						
34	0,04701	0,04411	0,03595	0,03556	0,03530	0,03360	0,00201	0,00062	0																					
35	0,04836	0,04546	0,03730	0,03691	0,03665	0,03495	0,00337	0,00197	0,00135	0																				
36	0,05378	0,05088	0,04272	0,04233	0,04207	0,04037	0,00878	0,00739	0,00677	0,00542	0																			
37	0,05459	0,05169	0,04353	0,04314	0,04288	0,04118	0,00959	0,00820	0,00758	0,00623	0,00081	0																		
38	0,05988	0,05698	0,04883	0,04843	0,04818	0,04648	0,01489	0,01349	0,01287	0,01152	0,00610	0,00529	0																	
39	0,06638	0,06348	0,05533	0,05493	0,05468	0,05298	0,02139	0,01999	0,01938	0,01802	0,01260	0,01180	0,00650	0																
40	0,08434	0,08144	0,07328	0,07289	0,07263	0,07093	0,03934	0,03795	0,03733	0,03598	0,03056	0,02975	0,02446	0,01796	0															
41	0,08614	0,08323	0,07508	0,07469	0,07443	0,07273	0,04114	0,03974	0,03913	0,03777	0,03236	0,03155	0,02625	0,01975	0,00180	0														
42	0,09808	0,09517	0,08702	0,08663	0,08637	0,08467	0,05308	0,05168	0,05107	0,04971	0,04430	0,04349	0,03819	0,03169	0,01374	0,01194	0													
43	0,09911	0,09621	0,08805	0,08766	0,08740	0,08570	0,05411	0,05272	0,05210	0,05075	0,04533	0,04452	0,03922	0,03272	0,01477	0,01297	0,00103	0												
44	0,10907	0,10616	0,09801	0,09762	0,09736	0,09566	0,06407	0,06267	0,06206	0,06070	0,05529	0,05448	0,04918	0,04268	0,02473	0,02293	0,01099	0,00996	0											
45	0,11395	0,11105	0,10290	0,10250	0,10225	0,10054	0,06896	0,06756	0,06694	0,06559	0,06017	0,05936	0,05407	0,04757	0,02961	0,02782	0,01588	0,01485	0,00489	0										
46	0,11665	0,11375	0,10559	0,10520	0,10494	0,10324	0,07165	0,07026	0,06964	0,06829	0,06287	0,06206	0,05677	0,05026	0,03231	0,03051	0,01857	0,01754	0,00758	0,00270	0									
47	0,12336	0,12046	0,11230	0,11191	0,11165	0,10995	0,07836	0,07697	0,07635	0,07500	0,06958	0,06877	0,06348	0,05698	0,03902	0,03722	0,02528	0,02425	0,01429	0,00941	0,00671	0								
48	0,20985	0,20694	0,19879	0,19840	0,19814	0,19644	0,16485	0,16345	0,16284	0,16148	0,15607	0,15526	0,14996	0,14346	0,12551	0,12371	0,11177	0,11074	0,10078	0,09589	0,09320	0,08649	0							
49	0,26179	0,25889	0,25074	0,25034	0,25009	0,24839	0,21680	0,21540	0,21478	0,21343	0,20801	0,20720	0,20191	0,19541	0,17745	0,17566	0,16372	0,16269	0,15273	0,14784	0,14515	0,13843	0,05195	0						
50	0,26852	0,26562	0,25746	0,25707	0,25681	0,25511	0,22352	0,22213	0,22151	0,22016	0,21474	0,21393	0,20864	0,20214	0,18418	0,18238	0,17044	0,16941	0,15945	0,15457	0,15187	0,14516	0,05867	0,00673	0					
51	0,28859	0,28568	0,27753	0,27714	0,27688	0,27518	0,24359	0,24219	0,24158	0,24022	0,23481	0,23400	0,22870	0,22220	0,20425	0,20245	0,19051	0,18948	0,17952	0,17463	0,17194	0,16523	0,07874	0,02679	0,02007	0				
52	0,34066	0,33776	0,32960	0,32921	0,32895	0,32725	0,29566	0,29427	0,29365	0,29230	0,28688	0,28607	0,28077	0,27427	0,25632	0,25452	0,24258	0,24155	0,23159	0,22671	0,22401	0,21730	0,13081	0,07886	0,07214	0,05207	0			

Tablo 3. Monoklinik test için yapılan indisleme işlemleri

$\sin^2\theta$	$h$	$k$	$l$	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	Değer
$\sin^2\theta$	1	1	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,02951 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	0	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,03891 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	1	1	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,04189 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-1	1	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,05083 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-2	0	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,05679 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	0	0	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,06740 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	0	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,07319 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	0	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,08052 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	0	2	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,08704 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	1	1	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,08797 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	0	1	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,08916 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	1	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,09151 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-3	0	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,10001 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	0	2	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,10389 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-1	1	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,10585 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	1	2	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,10717 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-2	0	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,11628 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	2	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,11804 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	0	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,12297 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	0	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,12400 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	2	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,12595 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	1	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,13209 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-2	2	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,14383 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	0	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,15583 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	2	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,15679 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	0	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,15564 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-4	0	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,15873 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	2	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,16756 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	2	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,16756 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	1	1	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,16775 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	1	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,20293 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	1	3	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,20359 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-2	2	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,20332 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	1	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,20293 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	1	3	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,20359 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	2	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,21001 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-2	0	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,20947 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	5	1	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,21001 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	2	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,21104 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	5	1	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,21551 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	0	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,22201 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	2	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,24268 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	2	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,24287 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-5	1	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,25471 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-5	1	1	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,25471 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	3	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,26559 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	2	0	4	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,26484 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	0	0	4	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,26960 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	6	0	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,27900 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-1	3	2	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,27993 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	6	2	0	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,36604 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	4	3	3	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,41785 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	0	5	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,42395 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	-2	0	5	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2+Dhl$	$=$	0,49695 $\checkmark$
$\sin^2\theta$	3	1	5	$= Ah^2+Bk^2+Cl^2-Dhl$	$=$	0,44571 $\checkmark$



Tablo 4. Analitik işlem ile bulunan h k l düzlemleri

h	k	l	d (Å) Gözlenen	2θ (°) Gözlenen	sin <sup>2</sup> θ Hesaplanan	sin <sup>2</sup> θ Gözlenen	Δsin <sup>2</sup> θ Fark
1	1	0	4,48390	19,7841	0,02951	0,02951	0,00000
2	0	1	3,89713	22,8001	0,03891	0,03907	-0,00016
1	1	1	3,76998	23,5799	0,04189	0,04175	0,00014
-1	1	1	3,41656	26,0599	0,05083	0,05083	0,00000
-2	0	1	3,22934	27,5998	0,05679	0,05690	-0,00011
0	0	2	2,96463	30,1200	0,06740	0,06751	-0,00011
3	0	1	2,84135	31,4599	0,07319	0,07350	-0,00031
2	0	2	2,71219	32,9998	0,08052	0,08066	-0,00014
0	2	0	2,61972	34,1999	0,08604	0,08646	0,00058
1	1	2	2,59762	34,4999	0,08797	0,08794	0,00003
0	1	2	2,58310	34,7000	0,08916	0,08893	0,00023
3	1	0	2,54613	35,2202	0,09151	0,09153	-0,00002
-3	0	1	2,45324	36,6000	0,10001	0,09859	0,00142
-3	0	1	2,43206	36,9303	0,10001	0,10032	-0,00031
0	2	1	2,39518	37,5199	0,10389	0,10343	0,00046
-1	1	2	2,36842	37,9600	0,10585	0,10578	0,00007
1	2	1	2,35766	38,1399	0,10717	0,10675	0,00042
-2	0	2	2,25563	39,9367	0,11628	0,11662	-0,00034
2	2	0	2,24680	40,1004	0,11804	0,11754	0,00050
4	0	1	2,19342	41,1198	0,12297	0,12333	-0,00036
4	0	0	2,18227	41,3403	0,12400	0,12460	-0,00060
2	2	1	2,17382	41,5077	0,12595	0,12557	0,00038
3	1	2	2,11772	42,6602	0,13209	0,13231	-0,00022
-2	2	1	2,03259	44,5404	0,14383	0,14362	0,00021
1	0	3	2,00530	45,1798	0,14599	0,14756	-0,00157
2	0	3	1,94905	46,5592	0,15583	0,15620	-0,00037
-4	0	1	1,93119	47,0155	0,15873	0,15910	-0,00037
2	2	2	1,88352	48,2801	0,16756	0,16726	0,00030
2	2	2	1,88131	48,3404	0,16756	0,16765	-0,00009
1	1	3	1,87987	48,3798	0,16775	0,16791	-0,00016
-1	2	2	1,87042	48,6400	0,17113	0,16961	0,00152
3	1	3	1,71733	53,3008	0,20293	0,20119	0,00174
3	1	3	1,71140	53,5001	0,20293	0,20259	0,00034
1	3	0	1,70880	53,5881	0,20359	0,20321	0,00038
1	3	0	1,70314	53,7804	0,20359	0,20456	-0,00007
4	2	1	1,68102	54,5463	0,21001	0,20998	0,00003
4	2	0	1,67779	54,6601	0,21104	0,21079	0,00025
5	1	0	1,65711	55,4004	0,21551	0,21608	-0,00057
4	0	3	1,63273	56,3006	0,22201	0,22258	-0,00057
0	2	3	1,57060	58,7398	0,23869	0,24054	-0,00185
4	2	2	1,56478	58,9803	0,24268	0,24233	0,00035
-5	1	1	1,52760	60,5639	0,25471	0,25427	0,00044
-5	1	1	1,52451	60,6995	0,25471	0,25530	-0,00059
3	3	0	1,49562	61,9999	0,26559	0,26526	0,00033
0	0	4	1,48203	62,6323	0,26960	0,27015	-0,00055
6	0	0	1,45688	63,8397	0,27900	0,27956	-0,00056
6	2	0	1,27319	74,4599	0,36604	0,36604	0,00000
4	3	3	1,19145	80,5599	0,41785	0,41799	-0,00014
3	0	5	1,18198	81,3403	0,42395	0,42472	-0,00077
3	1	5	1,15501	83,6597	0,44571	0,44478	0,00093
-2	0	5	1,09281	89,6397	0,49695	0,49686	0,00009

## 2. Sonuç

Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> kristal sistemi ve birim hücre parametreleri analitik metot ve bilgisayar programları ile tayin edildi. Analitik metot için kristal sistem monoklinik ve birim hücre parametreleri a=8.9224Å, b=5.2220Å, c=6.0493Å, β=101.28° bulundu. Bilgisayar programları kullanılarak monoklinik sistemde birim hücre parametreleri sırasıyla, TREOR90 ile, a=8.903(1) Å, b=5.238(1) Å, c=6.0489(5) Å,

β=101.21(1)° ; DICVOL91 ile, a=8.904(1) Å, b=5.237(1) Å, c=6.0491(8) Å, β=101.23(1)° ; ITO13 ile, a=8.9050Å, b=5.2370Å, c=6.0470Å, β=101.25° olarak bulundu. Analitik yöntem ve bilgisayar programları ile bulunan ve Dusek ve ark. (2003) tarafından yapılan tek kristal çalışması [5] ile elde edilen birim hücre parametre değerlerinin a=8.920(7) Å, b=5.245(5) Å, c=6.050(5) Å, β=101.35(8) ° karşılaştırıldıklarında (Tablo 5.), hata sınırları içinde yine uyumlu oldukları gözlemlendi.

Tablo 5. Sonuçların toplu gösterimi

Metot	a (Å)	b (Å)	c (Å)	β (°)
Analitik İşlem	8.92236	5.22192	6.04926	101.28
TREOR90	8.903 (1)	5.238 (1)	6.0489 (5)	101.21 (1)
ITO13	8.9050	5.2370	6.0470	101.25
DICVOL91	8.904 (1)	5.237 (1)	6.0491 (8)	101.23 (1)
DICVOL06	8.904 (1)	5.237 (1)	6.0491 (7)	101.23 (1)
Tek Kristal [5]	8.920 (7)	5.245 (5)	6.050 (5)	101.35 (8)

## Kaynaklar

1. Sodium Carbonate, Wikipedia, The Free Encyclopedia, [http://en.wikipedia.org/wiki/Sodium\\_carbonate](http://en.wikipedia.org/wiki/Sodium_carbonate), 30.03.2007.
2. Werner. P.E.. Documentation for TREOR90. Structural Chemistry Arrhenius Laboratory. University of Stockholm. 1990.
3. Visser. J. W.. Ab-initio Powder Diffraction Unit Cell Indexing. J. Appl. Cryst. 2. 89-95. 1969.
4. Louer. D.. Vargas. R.. Indexation Automatique Des Diagrammes De Poudre Par Dichotomies Successive. J. Appl. Cryst. 15. 542-545. 1982.
5. Dusek. M.. Chapuis. G.. Meyer. M.. & Petricek. V.. Sodium Carbonate Revisited. Acta Cryst. B59.337-352. 2003.