

# SỬ DỤNG HÀM GAUSS XÁC ĐỊNH BỀ RỘNG TRUNG BÌNH ĐƯỜNG NHIỄU XẠ CỦA MẪU THÉP ĐƯỢC TÔI CAO TẦN

## USING GAUSSIAN FUNCTION IN ORDER TO DETERMINE FULL WIDTH AT HALF MAXIMUM OF DIFFRACTION LINES OF INDUCED STEEL

Dương Minh Hùng<sup>1</sup>

### Tóm tắt

Có nhiều phương pháp có thể xác định bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ như phương pháp bề rộng trung bình, phương pháp Gauss và phương pháp parabola. Tuy nhiên, phương pháp Gauss được xác định là có độ chính xác cao hơn các phương pháp khác và có thể tính được độ lặp lại hoặc độ tin cậy. Bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ có ý nghĩa rất lớn trong việc thiết lập các mối quan hệ với ứng suất dư, thời gian mỏi, tỉ lệ pha... của vật liệu. Vì vậy, sử dụng phương pháp Gauss là điều cần thiết để xác định bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ của các mẫu thép tôi cao tần.

Từ khóa: bề rộng trung bình, phương pháp Gauss, nhiễu xạ, độ cứng, mẫu thép tôi cao tần.

### Abstract

Many methods are being used in order to determine Full Width at Half Maximum of the diffraction lines as Full Width at Half Maximum method (calculated from three data points around the average position), Gaussian function and parabola method (interpolation from the experimental data by the corresponding curve). However, Gaussian function has been identified of higher accuracy and can determine the repeatability or reliability. Full Width at Half Maximum of the diffraction lines has great significance in establishing relationships with residual stress, fatigue period and rated phase of materials. Therefore, the use of Gaussian function is necessary to determine Full Width at Half Maximum of the diffraction lines of induced steel.

Keywords: Full Width at Half Maximum, Gaussian function, diffraction, hardness, induced steel.

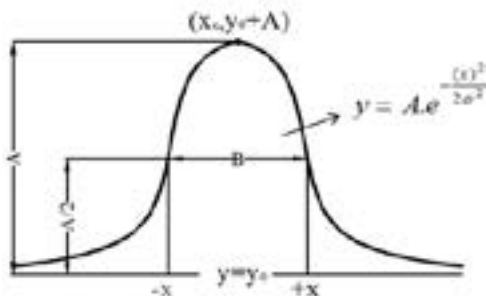
### 1. Cơ sở lý thuyết

Hàm mật độ xác suất ngẫu nhiên (Gauss) có công thức:

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}} \quad (1)$$

Trong đó:  $x_c$  là giá trị trung bình (mean) hàm Gauss, và  $\omega$  là sai lệch chuẩn, cho thấy mức độ phân tán của hàm.  $y_0$  là giá trị bù thêm (khoảng cách điểm thấp nhất nội suy so với trục hoành) (Kurita 1993).

Trường hợp chuyển trục về giá trị  $x_c$  và dịch chuyển lên giá trị  $y_0$ , ta có:



Hình 1: Hàm Gauss khi chuyển về vị trí  $x_c, y_0$

Giá trị bề rộng trung bình được xác định tại vị trí  $\frac{1}{2}$  giá trị lớn nhất tung độ hay  $A/2$ .

Khi đó:

$$A.e^{-\frac{(x)^2}{2\omega^2}} = \frac{1}{2} A$$

$$e^{-\frac{(x)^2}{2\omega^2}} = 2^{-1}$$

$$-\frac{(x)^2}{2\omega^2} = -\ln 2$$

$$x^2 = 2\omega^2 \ln 2$$

$$x = \pm\sqrt{2\omega^2 \ln 2}$$

Do đó, bề rộng trung bình được tính từ phương pháp Gauss là:

$$B = |-x| + |x|$$

$$B = 2\omega\sqrt{2\ln 2} = 2,355\omega \quad (2)$$

<sup>1</sup> Thạc sĩ, Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Trường Đại học Trà Vinh

Như vậy, ta có thể dựa vào giá trị bề rộng trung bình (2) để xác định, tính toán giá trị bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ các điểm dữ liệu thực nghiệm thông qua việc tối ưu bằng phương pháp Gauss.

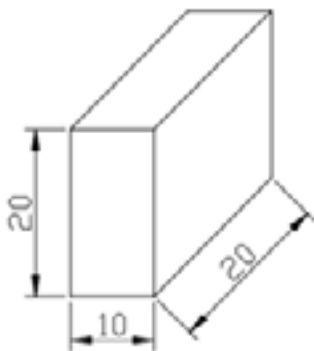
**2. Trình tự thí nghiệm**

Các mẫu thí nghiệm là thép C45 được gia công

đạt kích thước như Hình 2, trong đó, các mẫu được tôi cao tần trên thiết bị có tần số 50 kHz, công suất 20kW với các thời gian khác nhau: 10 giây, 15 giây, 20 giây, 25 giây, 30 giây, 40 giây, 50 giây. Số mẫu thí nghiệm là 7 (theo quy hoạch thực nghiệm) (Phùng Rân 2006). Cuối cùng, toàn bộ mẫu được đánh bóng bằng giấy nhám P1000, P1500, P2000.

**Bảng 1: Thành phần hóa học thép cacbon C45**

<b>Thành phần hóa học</b>	C	Si	Mn	P	S	CR	Ni	Cu
<b>Hàm lượng (%)</b>	0,478	0,272	0,645	0,015	0,018	0,338	0,012	0,007



**Hình 2: Kích thước mẫu thử (mm)**

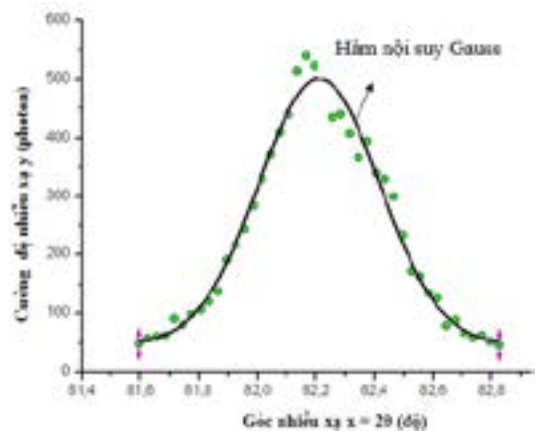


**Hình 3: Mẫu được tôi cao tần**

Điều kiện đo bằng nhiễu xạ trên máy đo nhiễu xạ XPERT PRO được cho trong Bảng 2.

**Bảng 2: Điều kiện thí nghiệm bằng nhiễu xạ X quang [3]**

Phương pháp đo	Kiểu Ω cố định η
Mặt nhiễu xạ	(211) mạng lập phương thể tâm
Góc Bragg (2θ)	82°
Phạm vi góc nhiễu xạ	80-85°
Bước nhiễu xạ	0,03°
Thời gian đo	4s
Ống phóng bước sóng	CuKα 1,54 Å
Tấm lọc	Tấm Ni



**Hình 4: Đường nhiễu xạ mẫu chưa nhiệt luyện nội suy bằng hàm Gauss**

**Bảng 3: Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu chưa nhiệt luyện**

Hàm nội suy mẫu chưa nhiệt luyện	
$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$	
Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	46,7268
$x_c$	82,211
$\omega$	0,2057
A	454,9207

**3. Kết quả khảo sát**

Các mẫu sau khi được đo bằng phương pháp nhiễu xạ thu được dữ liệu mối quan hệ giữa góc 2θ (2theta) và cường độ nhiễu xạ y.

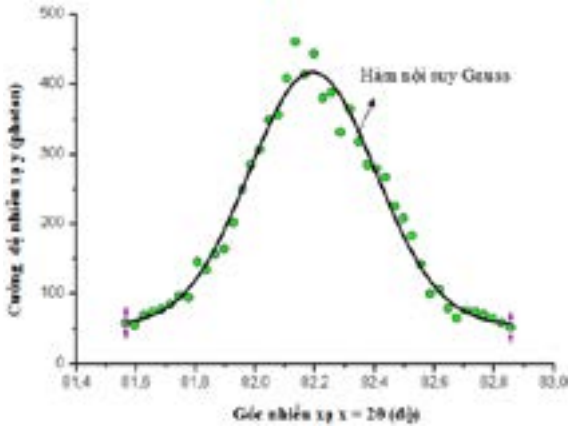
**3.1 Mẫu chưa nhiệt luyện**

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu chưa nhiệt luyện có phương trình là:

$$y = 46,7268 + 454,9207e^{-\frac{(x-82,211)^2}{2.0,2057^2}} \quad (3)$$

Như vậy, xác định được giá trị bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ theo công thức (2) là B = 0,4844 độ.

**3.2 Mẫu nhiệt luyện:** được tôi cao tần với thời gian 10 giây.



Hình 5: Đường nhiễu xạ mẫu tôi cao tần với t = 10 giây

Bảng 4: Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu tôi cao tần với t = 10 giây

Hàm nội suy mẫu nhiệt luyện: tôi cao tần với thời gian 10 giây

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$$

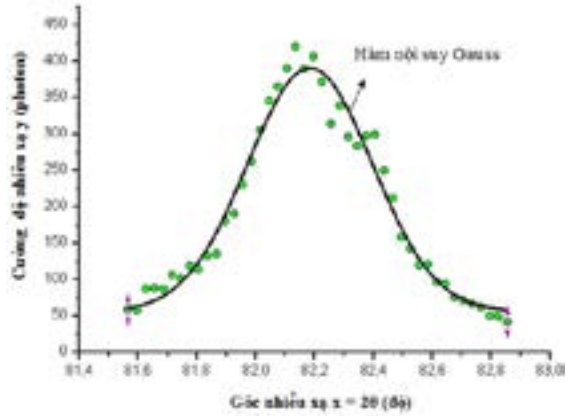
Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	55,2631
$x_c$	82,191
$\omega$	0,2118
A	362,2497

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu được tôi cao tần với thời gian 10 giây có phương trình là:

$$y = 55,2631 + 362,2497e^{-\frac{(x-82,191)^2}{2.0,2118^2}} \quad (4)$$

Với phương trình trên ta có bề rộng trung bình B của mẫu đo tính theo công thức (2) là: B= 0,4987 độ.

**3.3 Mẫu nhiệt luyện:** được tôi cao tần với thời gian 15 giây



Hình 6: Đường nhiễu xạ mẫu tôi cao tần với t = 15 giây

Bảng 5: Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu tôi cao tần với t=15 giây

Hàm nội suy mẫu nhiệt luyện: tôi cao tần với thời gian 15 giây

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$$

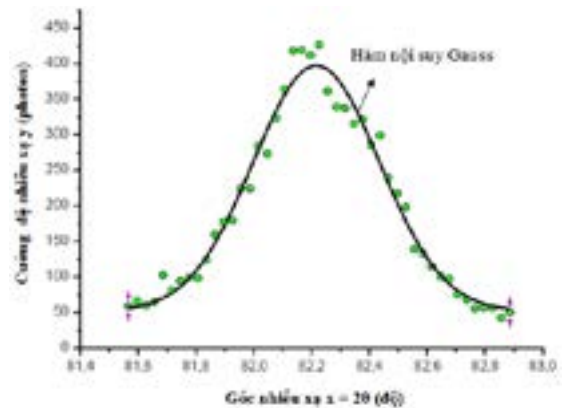
Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	56,3352
$x_c$	82,184
$\omega$	0,2125
A	334,7303

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu được tôi cao tần với thời gian 15 giây có phương trình là:

$$y = 56,3352 + 334,7303e^{-\frac{(x-82,184)^2}{2.0,2125^2}} \quad (5)$$

Với phương trình trên ta có bề rộng trung bình B tính theo công thức (2) là: B= 0,5004 độ.

**3.4 Mẫu nhiệt luyện:** được tôi cao tần với thời gian 20 giây



Hình 7: Đường nhiễu xạ mẫu tôi cao tần với t = 20 giây

**Bảng 6 : Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu tời cao tần với t = 20 giây**

Hàm nội suy mẫu nhiệt luyện: tời cao tần với thời gian 20 giây

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$$

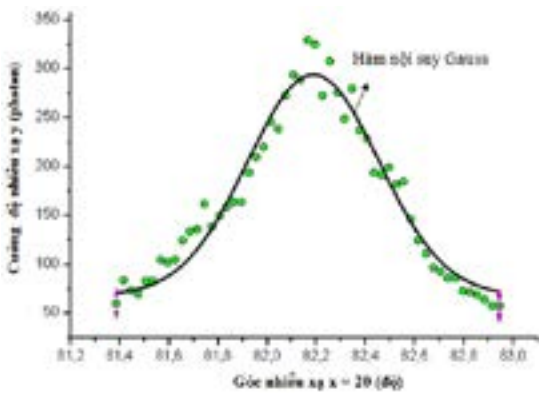
Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	52,805
$x_c$	82,216
$\omega$	0,2187
A	345,2299

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu được tời cao tần với thời gian 20 giây có phương trình là:

$$y = 52,805 + 345,2299e^{-\frac{(x-82,216)^2}{2 \cdot 0,2187^2}} \quad (6)$$

Với phương trình trên ta có bề rộng trung bình B tính theo công thức (2) là: B = 0,515 độ.

**3.5 Mẫu nhiệt luyện:** được tời cao tần với thời gian 25 giây



**Hình 8: Đường nhiễu xạ mẫu tời cao tần với t = 25 giây**

**Bảng 7: Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu tời cao tần với t = 25 giây**

Hàm nội suy mẫu nhiệt luyện: tời cao tần với thời gian 25 giây

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$$

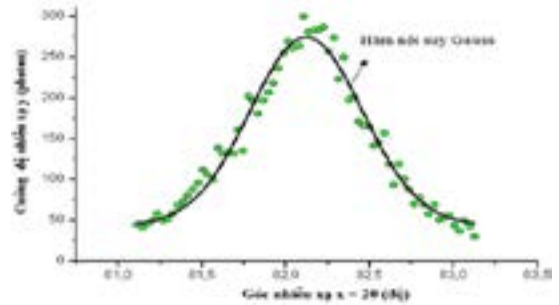
Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	68,6349
$x_c$	82,188
$\omega$	0,2672
A	225,6664

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu được tời cao tần với thời gian 25 giây có phương trình là:

$$y = 68,6349 + 225,6664e^{-\frac{(x-82,188)^2}{2 \cdot 0,2672^2}} \quad (7)$$

Với phương trình trên ta có bề rộng trung bình B của mẫu đo tính theo công thức (2) là: B=0,6293 độ.

**3.6 Mẫu nhiệt luyện:** được tời cao tần với thời gian 30 giây



**Hình 9: Đường nhiễu xạ mẫu tời cao tần với t = 30 giây**

**Bảng 8: Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu tời cao tần với t = 30 giây**

Hàm nội suy mẫu nhiệt luyện: tời cao tần với thời gian 30 giây

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$$

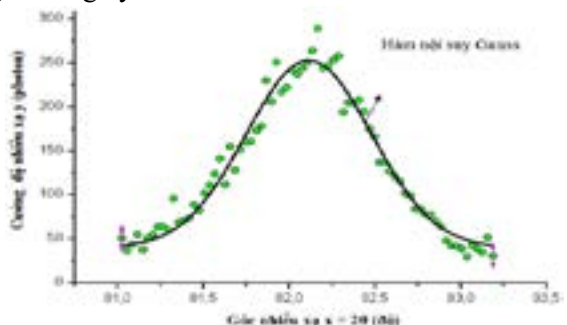
Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	44,4469
$x_c$	82,121
$\omega$	0,3358
A	229,924

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu được tời cao tần với thời gian 30 giây có phương trình là:

$$y = 44,4469 + 229,924e^{-\frac{(x-82,121)^2}{2 \cdot 0,3358^2}} \quad (8)$$

Với phương trình trên ta có bề rộng trung bình B của mẫu đo tính theo công thức (2) là: B = 0,7908 độ.

**3.7 Mẫu nhiệt luyện:** được tời cao tần với thời gian 40 giây.



**Hình 10: Đường nhiễu xạ mẫu tời cao tần với t = 40 giây**

**Bảng 9: Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu tối cao tần với t = 40 giây**

Hàm nội suy mẫu nhiệt luyện: tối cao tần với thời gian 40 giây

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$$

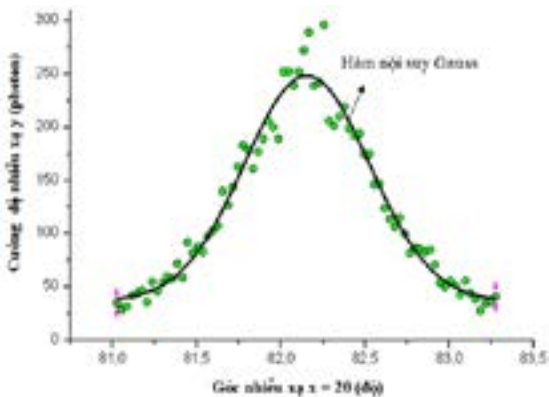
Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	39,931
$x_c$	82,114
$\omega$	0,3655
A	212,7917

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu được tối cao tần với thời gian 40 giây có phương trình là:

$$y = 39,931 + 212,7917e^{-\frac{(x-82,114)^2}{2 \cdot 0,3655^2}} \quad (9)$$

Với phương trình trên ta có bề rộng trung bình B tính theo công thức (2) là: B = 0,8608 độ.

**3.8 Mẫu nhiệt luyện:** được tối cao tần với thời gian 50 giây



**Hình 11: Đường nhiễu xạ mẫu tối cao tần với t = 50 giây**

**Bảng 10: Giá trị tham số của hàm nội suy mẫu tối cao tần với t = 50 giây**

Hàm nội suy mẫu nhiệt luyện: tối cao tần với thời gian 50 giây

$$y = y_0 + A.e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\omega^2}}$$

Tham số	Giá trị tham số
$y_0$	36,9827
$x_c$	82,154
$\omega$	0,3718
A	211,4685

Vậy hàm nội suy Gauss của mẫu được tối cao tần với thời gian 50 giây có phương trình là:

$$y = 36,9827 + 211,4685e^{-\frac{(x-82,154)^2}{2 \cdot 0,3718^2}} \quad (10)$$

Với phương trình trên ta có bề rộng trung bình B tính theo công thức (2) là B = 0,8756 độ.

**4. Kết luận**

Nghiên cứu đã xác định bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ bằng phương pháp nội suy đường cong Gauss từ các điểm dữ liệu thực nghiệm. Dựa vào bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ, ta có thể thiết lập các mối quan hệ giữa bề rộng trung bình của đường nhiễu xạ với các điều kiện khác nhau như độ cứng, ứng suất dư, thời gian môi, tỉ lệ pha... Từ đó, chúng ta có thể đề xuất ra một phương pháp không phá hủy để xác định độ cứng, ứng suất dư, tỉ lệ pha... của vật liệu.

**Tài liệu tham khảo**

Cullity, B.D. and Stock, S.R. 1978. *Element of X-Ray diffraction*, (2nd ed). USA: Addison Wesley.

Kurita, M. 1993. “X-Ray Stress Measurement by The Gaussian Curve Method, X-Ray Diffraction Studies On The Deformation And Fracture Of Solids”. *Current Japanese Materials Research*, Vol.10, pp. 135-151.

Phùng, Rân. 2006. *Quy hoạch thực nghiệm ứng dụng*. Tp.HCM: Đại học sư phạm kỹ thuật Tp. Hồ Chí Minh.