

Estudo Teórico
Computacional da Influência
da Fase Gasosa e Superficial
no Crescimento de Filmes
Finos de Diamante Micro e
Nanocristalino

Revisão Bibliográfica
Resultados Parciais

30/06/2016

Aluno: Julio Fabio Gurgel do Amaral Neto

Orientador: Dr. Evaldo Jose Corat

1. Proposta do Tema:

Este trabalho está sendo realizado dentro da linha de pesquisa e desenvolvimento na área de crescimento por deposição química da fase vapor, (do inglês *Chemical Vapor Deposition*, CVD), de filmes de diamante, inserido no grupo Diamantes e Materiais Relacionados (DIMARE) do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE). Ele é resultado de um importante trabalho de colaboração entre o Laboratório Associado de Sensores de Materiais (LAS) e o Laboratório Associado de Plasma (LAP) iniciado em 2009 através da defesa da tese da Dr. Divani Barbosa Gavinier^[1]. Colaboração essa que é essencial para o desenvolvimento da simulação computacional a ser trabalhada, uma vez que o LAP possui experiência em desenvolvimento de trabalhos teóricos e o grupo DIMARE, que por sua vez, é detentor de reconhecida experiência em trabalhos relacionados à obtenção e estudos de deposição de filmes de diamante CVD.

Inicialmente, pretende-se obter filmes finos de diamante utilizando o reator de deposição química a partir da fase-vapor por filamento quente (HFCVD, do inglês, *Hot Filament Chemical Vapor Deposition*) existente no laboratório do grupo DIMARE. Esses filmes serão obtidos com diferentes tamanhos de grão, micro, nano e ultranocristalinos.

Serão também desenvolvidos mecanismos cinéticos que simulem computacionalmente as possíveis reações químicas envolvidas no processo de deposição dos filmes finos de diamante obtidos experimentalmente nesse trabalho. Esses mecanismos serão desenvolvidos e trabalhados através do software de simulação de reações químicas Chemkin versão II. Para visualização dos resultados numéricos computacionais obtidos através do Chemkin, neste trabalho está sendo proposto a utilização da IDE QTCreator. A IDE (ambiente de desenvolvimento de softwares)

QTCreatoré voltada ao desenvolvimento de softwares com layout amigável e de fácil manipulação para o usuário, através dela pretende-se gerar um software que desenhe gráficos e faça todas as manipulações necessárias para a interpretação dos dados gerados pelo Chemkin.

Finalizando os resultados obtidos experimentalmente serão analisados através das técnicas de caracterização FEG (microscopia eletrônica de varredura de alta resolução) e espectroscopia Raman disponíveis nos laboratórios do LAS. Com o enfoque de se obter maior compreensão dos mecanismos químicos envolvidos na deposição desses filmes, as propriedades dos filmes obtidos experimentalmente serão correlacionadas com os resultados numéricos obtidos computacionalmente.

2. Justificativa e Relevância do Tema

Na literatura existem vários mecanismos propostos para explicar o crescimento de filmes de diamante^[2,3,4,5,6,7], porém, existem poucos trabalhos desenvolvidos pelo grupo DIMARE com respeito a simulação numérica computacional dos mecanismos de deposição de filmes finos de diamante desenvolvidos no laboratório LAS/INPE. Esse trabalho irá contribuir consideravelmente nos experimentos desenvolvidos pelo grupo, com isso, esperamos desenvolver uma plataforma computacional para ser usada como referência para simulação numérica do mecanismo de deposição de filmes finos de diamante com diferentes morfologias (micro e nanocristalino).

3. Revisão Bibliográfica

Veremos os aspectos tecnológicos envolvidos no estudo do crescimento de filmes de diamante com diferentes tamanhos de grão que serão desenvolvidos e estudados neste trabalho. Devido à grande complexidade de cada tecnologia envolvida no processo, elas serão apresentadas individualmente, para tanto, inicialmente, será descrita as aplicações dos filmes finos de diamante CVD e a técnica de deposição utilizada nesse trabalho (HFCVD). Logo após serão descritos os softwares que serão utilizados nesse trabalho para simulação numérica computacional das reações químicas (Chemkin) envolvidas no processo de deposição dos filmes de diamante e da IDE (QtCreator) que será utilizada para desenvolvimento de um software de fácil manipulação e interpretação das saídas geradas através do Chemkin.

3.1 Aplicação do diamante CVD

A grande gama de aplicações do diamante CVD fundamenta o estudo e o desenvolvimento de novas técnicas na obtenção do diamante artificial. A busca pela obtenção artificial do diamante remota o século XVIII, porém a mais significativa contribuição só foi ocorrer no fim do século XX com o desenvolvimento da termodinâmica química^[5], e pela contribuição de um grupo japonês, na publicação de um artigo^[8]. Uma série de trabalhos deste grupo japonês divulgou o crescimento do diamante a taxas de alguns microns por hora, usando não só a técnica de decomposição de gases por filamento quente (HFCVD) como outras.

O diamante CVD pode ser aplicado em várias áreas do conhecimento. Na área espacial, como proteção de células solares e superfícies sujeitas a bombardeamento de "partículas" cósmicas, dissipadores de calor e dispositivos eletrônicos mais resistentes^[9].

Na área de micro-eletrônica, com a possível obtenção de dispositivos com melhores performances térmicas^[10]. Na área de óptica, em proteção de janelas de detectores ^[11], etc. A aplicação na indústria mecânica é ainda mais atraente, devido às possibilidades de uso como ferramentas de corte^[12], como camada anti atrito para junções em motores automotivos e aeronáuticos , proteção de superfícies para ambientes agressivos^[13,14], etc. Na indústria odontológica e médica, como brocas odontológicas, implantes e outros dispositivos^[15]. Na indústria de vidros e cerâmicas, como brocas, materiais abrasivos, facas de corte^[16]. Na área de química como protetores a ambientes agressivos, como eletrodos para várias aplicações, inclusive para tratamento de água^[17]. Estas inúmeras aplicações se devem ao fato de ser possível a obtenção de diamantes em laboratório, com propriedades como relacionadas na Tabela 1.

Tabela 1 - Principais propriedades do diamante CVD.

Grandeza	Valor	Quantidade
Módulo de elasticidade	11.41×10^2	GPa
Módulo de rigidez transversal	5.53×10^2	GPa
Compressibilidade	8.3×10^{-13}	m^2N^{-1}
Dureza	90	GPa
Coefficiente de Poisson	0.07	
Resistência à tração (HFCVD)	1.4	GPa
Condutividade térmica	10^{-20}	$Wcm^{-1}K^{-1}$
Coefficiente de expansão térmica	0.8×10^{-6}	K^{-1}
Densidade específica	3.31	g/cm^3
Resistividade elétrica a 300 K	10^{16}	Ωcm
Coefficiente de atrito (\approx teflon)	0.03	
Constante dielétrica	5.7	
Resistência dielétrica	2×10^7	V/cm

Fonte: Barquet^[18]

3.2 Técnica de deposição usada HFCVD

O processo de ativação é a principal diferença entre os vários métodos de crescimento de diamante hoje disponíveis. Este processo pode ser térmico, por plasma, por radiação UV ou laser, por combustão ou ainda uma combinação destes, maiores detalhes sobre os diversos processos pode ser encontrado em Lee et al.^[19] e May^[20]. Para este estudo foi considerado um reator com fonte de ativação térmica (filamento quente), também chamado de reator de deposição química a partir da fase-vapor por filamento quente (HFCVD).

A figura 1 mostra o esquema de um reator CVD de filamento quente. Como demonstrado, é usada uma bomba de vácuo que se mantém continuamente ligada durante a deposição enquanto os gases são inseridos a taxas cuidadosamente controladas (normalmente com um fluxo total em torno de 100 sccm¹). A pressão na câmara é mantida aproximadamente na ordem de 30-50 Torr, enquanto o substrato é aquecido na ordem de 700 a 900°C, possui na maioria das vezes filamentos de tungstênio, estes filamentos são aquecidos a uma temperatura de aproximadamente 2200°C, a esta temperatura o gás do processo tornasse extremamente reativo, contendo altas concentrações de radicais. O tungstênio reage com o gás absorvendo carbono e formando carbetos de tungstênio, e isso é importante pois modifica a resistividade do material, fazendo com que ele atinja maiores temperaturas.

¹ Centímetro cúbico por minuto na CNTP

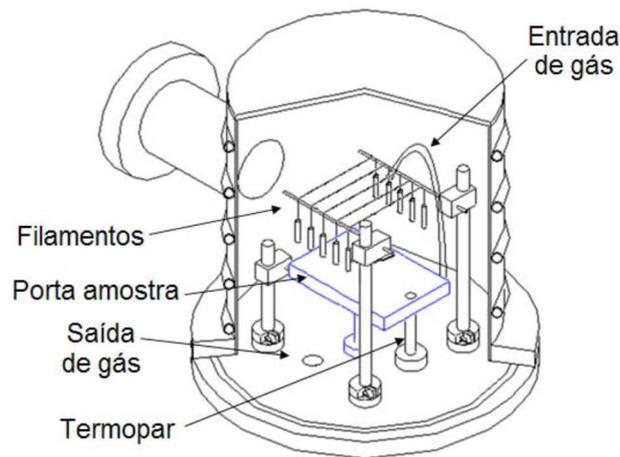


Figura 1 - Esquema do reator HFCVCD

O crescimento do diamante sobre o substrato consiste da alimentação do reator com os reagentes, que são os gases da mistura na entrada, normalmente composta por hidrogênio e uma pequena porcentagem de metano. Essa mistura gasosa passa por uma região de ativação, onde ocorre a dissociação do hidrogênio molecular em hidrogênio atômico ($H_2 \rightarrow 2H$). A região de ativação (região reativa) compreende um volume entre o substrato e o filamento, como demonstrado na Figura 2.

Na região de ativação ocorrem diversos processos físicos/químicos de transporte, como demonstrado na figura 2, que são fundamentais para formação do filme. Como por exemplo a difusão (processo 1) que seria a transferência de calor do filamento ao substrato, (2) a convecção forçada, ou seja, o fluxo gasoso promovido pela entrada e saída dos gases, (3) a convecção natural devido ao alto gradiente de temperatura entre o filamento e substrato. E as reações químicas superficiais, que são o foco da simulação numérica a ser realizada nesse trabalho, como a criação das espécies químicas presentes na região de ativação.

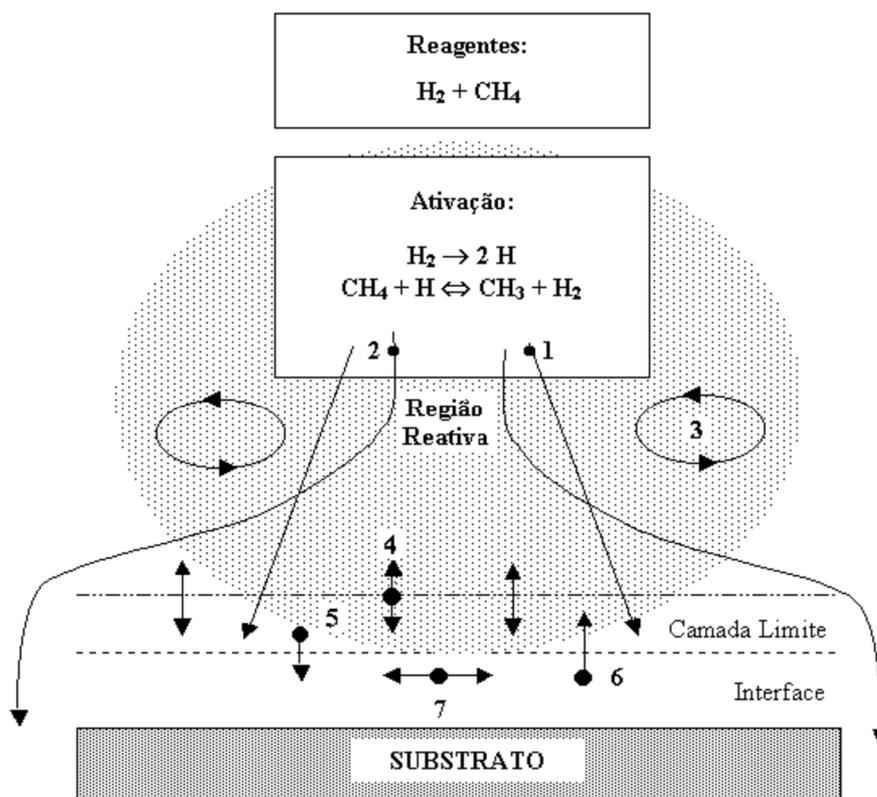


Figura 2 - Esquema do processo de crescimento de diamante via CVD, onde vários processos de transporte são indicados: (1) difusão, (2) convecção forçada pelo fluxo laminar, (3) convecção natural, (4) difusão através da camada limite, (5) adsorção, (6) desorção e (7) difusão superficial.

As etapas demonstradas na figura 2 são um dos principais agentes responsáveis pelo transporte da mistura gasosa, composta pelos reagentes, para a região reativa e, da mesma da região reativa para o substrato. A temperatura na fase gasosa varia de um método para outro, mas é tipicamente maior que 2000 K. Em temperaturas nesta ordem de grandeza o gás é extremamente reativo, contendo altas concentrações de radicais devido às diversas reações químicas que ocorrem.

Os estudos dos mecanismos envolvidos na nucleação e no crescimento do diamante mostram que a cinética química da deposição via CVD é extremamente complexa, principalmente devido à competição pela deposição entre os carbonos com

hibridização sp^3 (diamante) e sp^2 (grafite) e as diversas reações químicas que podem ocorrer. Nesse aspecto o hidrogênio atômico desempenha um papel essencial, suprimindo a nucleação e o crescimento de estruturas gráficas^[21], vide exemplo esquemático na figura 3. Isso acontece devido o fato do hidrogênio atômico reagir com, ou corroer, o grafite 20 a 30 vezes mais rápido que o diamante, então o grafite e outras fases que não o diamante são removidas do substrato^[1].

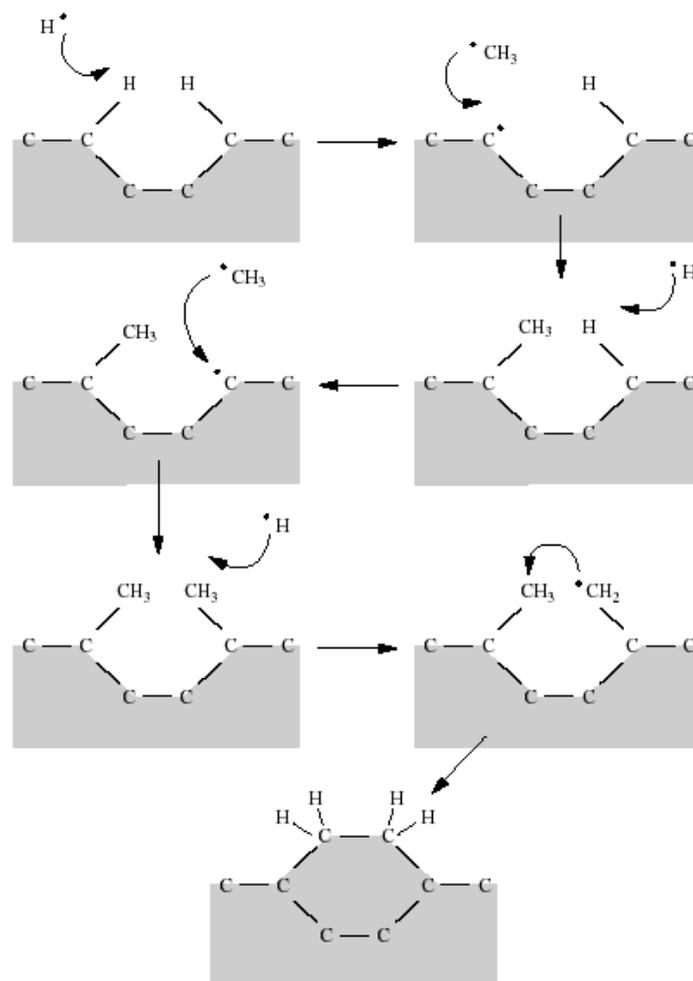
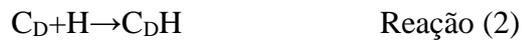


Figura 3: Esquema do processo químico de crescimento via CVD. Fonte: May^[2].

Levando em conta as reações químicas que ocorrem durante o crescimento e considerando a deposição de MCD, é atualmente aceito pela comunidade científica que o crescimento do diamante pode ser expresso em três passos simples^[22]:



Onde C_D refere-se ao átomo de carbono preso a uma ligação do tipo diamante na superfície de crescimento e $C_D H$ com a superfície hidrogenada. A Reação (1) representa a criação de um radical de superfície (C_D) por um átomo de hidrogênio atômico. A Reação (2) é a recombinação de um átomo de hidrogênio atômico neste radical de superfície, esta reação é muito exotérmica e é apontada como a principal responsável pelo aumento da temperatura do substrato, condição necessária para a adição de um hidrocarboneto (precursor de carbono). A Reação (3) representa a adição de um radical (principalmente $CH_3^{[1]}$) ou uma molécula (como por exemplo: C_2H_2) no radical de superfície, esta reação é a responsável pela incorporação de carbono à superfície. Sendo assim, subseqüentes reações de abstração de hidrogênio e adição de CH_x ou moléculas C_2H_y propagam o crescimento do filme.

3.3 Softwares Utilizados

O programa usado para simular as reações é o Chemkin, versão 2.0 livre, desenvolvido pelo *Sandia National Laboratories*^[23]. O CHEMKIM permite a utilização de mecanismos cinéticos em diferentes aplicações e é amplamente usado por muitas instituições, empresas e pela comunidade científica no desenvolvimento de vários processos afins.

O Chemkin-II é um pacote de software que facilita a formação, solução, e interpretação de problemas envolvendo cinética química heterogêneas na fase gasosa. O

pacote consiste de dois componentes principais de software: um intérprete e uma biblioteca com as propriedades termodinâmicas das principais espécies químicas a serem utilizadas. O intérprete é um programa que lê uma descrição simbólica de um mecanismo de reação química. Uma saída do intérprete é um arquivo de dados que forma um link para a biblioteca de termodinâmica. Estas sub-rotinas podem ser chamadas a partir do Chemkin para retornar informações químicas sobre as taxas de produção e propriedades termodinâmicas de qualquer conjunto de espécies a uma dada temperatura e concentração definida.

O Chemkin permite o uso de coeficientes estequiométricos e uma ordem de reação arbitrária para as espécies, as concentrações podem também ser específicas independente dos coeficientes estequiométricos da reação. Vários diferentes mecanismos de reação podem ser especificados no arquivo de entrada e interpretado utilizando-se a biblioteca de propriedades termodinâmicas das espécies.

A saída do Chemkin-II é um arquivo numérico com as propriedades e concentrações de cada espécie química simulada, como demonstrado na figura 4. A visualização do resultado da simulação tem um papel fundamental, pois, através dela podem-se comparar os resultados obtidos com dados experimentais de modo que o mesmo reflita melhor o processo físico-químico do problema. Devido a isso nesse trabalho nos propomos a criação de um software que fará todas as conversões necessária e a plotagem desses dados em forma de gráficos para a melhor visualização e interpretação de sua saída.

τ [usec]	T[K]	P[atm]	AR	H	C	H2	C2
			CH	CH2	CH3	CH4	C2H
			C2H2	C2H3	C2H4	C2H5	C2H6
			C3H2	H2CCCH	C3H4	C3H4P	C4H2
			HCCCHCCH	H2CCCCH	CH2CHCCH	CH2CHCHCH2	CH2CHCHCH
			CH2CHCCH2				
.0	2000.0	.003	9.000E-01	0.000E+00	0.000E+00	7.000E-02	0.000E+00
			0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.000E-02	0.000E+00
			0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
			0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
			0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
			0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
3000.0	2000.0	.003	8.999E-01	1.268E-05	7.122E-15	7.005E-02	4.632E-20
			7.587E-13	2.267E-08	1.151E-04	2.988E-02	2.375E-15
			2.168E-09	3.520E-11	1.268E-07	2.134E-11	3.983E-10
			4.010E-18	1.990E-15	1.878E-16	2.479E-13	8.866E-22
			2.282E-23	5.946E-22	2.755E-19	7.022E-17	1.587E-20
			4.273E-19				
6000.0	2000.0	.003	8.999E-01	2.388E-05	1.385E-13	7.010E-02	2.966E-18
			6.357E-12	9.909E-08	2.310E-04	2.976E-02	7.858E-14
			3.792E-08	5.465E-10	1.023E-06	8.596E-11	1.666E-09
			2.353E-15	4.159E-13	2.813E-14	1.697E-11	1.068E-18
			3.642E-20	1.178E-18	1.590E-16	1.720E-14	1.089E-17
			2.496E-16				

Figura 4—Exemplo do arquivo de saída gerado pelo Chemkin.

Será utilizado para a programação desse software um ambiente de desenvolvimento integrado - IDE (do inglês *Integrated Development Environment*) QT Creator, que é um programa de computador que reúne características e ferramentas de apoio ao desenvolvimento de software com o objetivo de agilizar este processo. O QT Creator faz a junção de uma linguagem de programação compilada multi-paradigma (seu suporte inclui linguagem imperativa, orientada a objeto e genérica) e de uso geral o C++, uma linguagem interpretada o JavaScript com o QML, que é uma linguagem para projetar aplicações de interface centrada no usuário, descreve uma árvore de objetos de elementos.

O QT Creator contém uma plataforma de desenvolvimento integrado que possui um layout designer GUI (do inglês *Graphical User Interface* - interface gráfica do usuário) que é uma interface de programação que permite a interação com dispositivos digitais por meio de elementos gráficos como ícones e outros, que facilita a criação de um software com layout mais amigável e de fácil manipulação. Com isso é possível criar

gráficos e fazer todas as manipulações necessárias para a interpretação dos dados gerados pelo Chemkin.

O desenvolvimento do software será feito com programação orientada a objeto, utilizando a linguagem C++, que é uma linguagem um pouco mais primitiva, e permite muito mais liberdades com o hardware. Como ela foi derivada imediatamente do C, o C++ permite a utilização de ponteiros, por exemplo, que irão trabalhar diretamente com a memória. Além disso, o C++ pode utilizar todas as bibliotecas C que existem diretamente.

Em termos de abstração, o C++ implementa classes, assim como qualquer linguagem orientada a objetos. Ele também possui o sentido de privado e público, que é utilizado para encapsulamento. Os encapsulamentos, que são uma das principais técnicas que define a programação orientada a objetos. Se trata de um dos elementos que adicionam segurança à aplicação em uma programação orientada a objetos pelo fato de esconder as propriedades, criando uma espécie de caixa preta, onde podemos enviar uma solicitação e obter um resultado sem precisar saber de fato como o resultado foi gerado.

4. Resultados Parciais

4.1 Deposição e Caracterização do Filme de Diamante Microcristalino

Os filmes de diamante microcristalino foram depositados com os filamentos mantidos à temperatura de aproximadamente 2200°C e checado usando um pirômetro ótico. A distância entre os filamentos e o substrato utilizada foi de 5 mm e a pressão da câmara mantida na ordem de 30 Torr. A temperatura do porta-substrato foi mantida através de controle independente a aproximadamente 750°C. A temperatura do substrato

é medida por um termopar, de cromel-alumel marca Ecil tipo K com bainha de inconel de 1/16", que é mantido em contato direto com a amostra.

O substrato de silício usado é do tipo-p com direção cristalográfica (100) e resistividade de 1-20 Ωcm . Antes da deposição esses substratos passaram por uma limpeza em acetona por 5 minutos no ultrassom. Logo após foi realizada a semeadura de diamante, para isso os substratos foram imersos em uma solução de hexano e pó de diamante (com partículas de aproximadamente 250 μm) no ultrassom por uma hora. Em seguida eles foram novamente limpos em acetona por 5 minutos no ultrassom.

Para este estudo em específico, o reator foi alimentado de uma mistura gasosa contendo 2% de metano em hidrogênio, típica de crescimento de diamante microcristalino, num fluxo total de 100 sscm. Foram usados seis filamentos de tungstênio com diâmetro de 85 μm e o tempo médio de crescimento foi em torno de 5 horas.

A morfologia do filme obtido é demonstrada na Figura 5 e 6 respectivamente. A figura 5 é correspondente à superfície e a figura 6 à seção-transversal do filme de diamante depositado. Através dessas imagens é possível notar que os grãos tem tamanho em torno de alguns microns e aspecto policristalino, o que é de se esperar em filmes finos de diamante microcristalino obtidos via CVD.

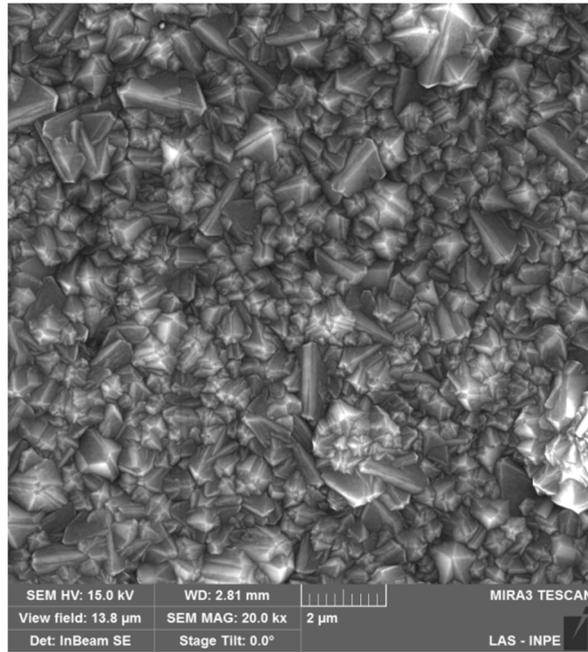


Figura 5 – Imagem de microscopia eletrônica de varredura do filme de diamante CVD microcristalino obtido nesse trabalho.

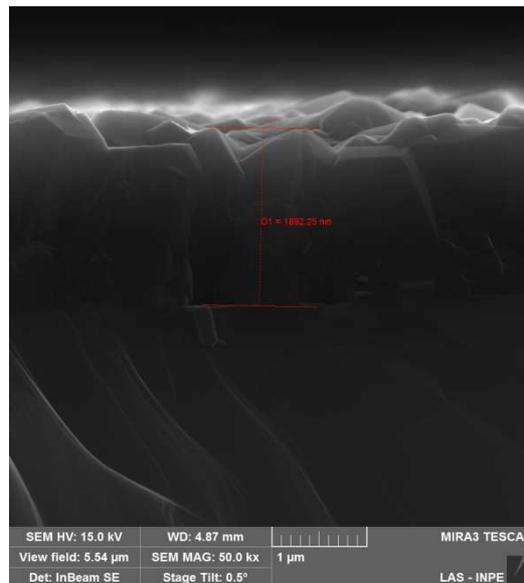


Figura 6 – Imagem da seção transversal da amostra obtida nesse trabalho

Em termos de análise composicional foi realizada caracterizações na superfície da amostra por espectroscopia Raman. Através do espectro Raman, Figura 7, é possível notar o pico em 1332 cm^{-1} que é a assinatura das ligações sp^3 do carbono (tipo diamante). Este

fato confirma que a amostra é composta preferencialmente de grãos de diamante microcristalino.

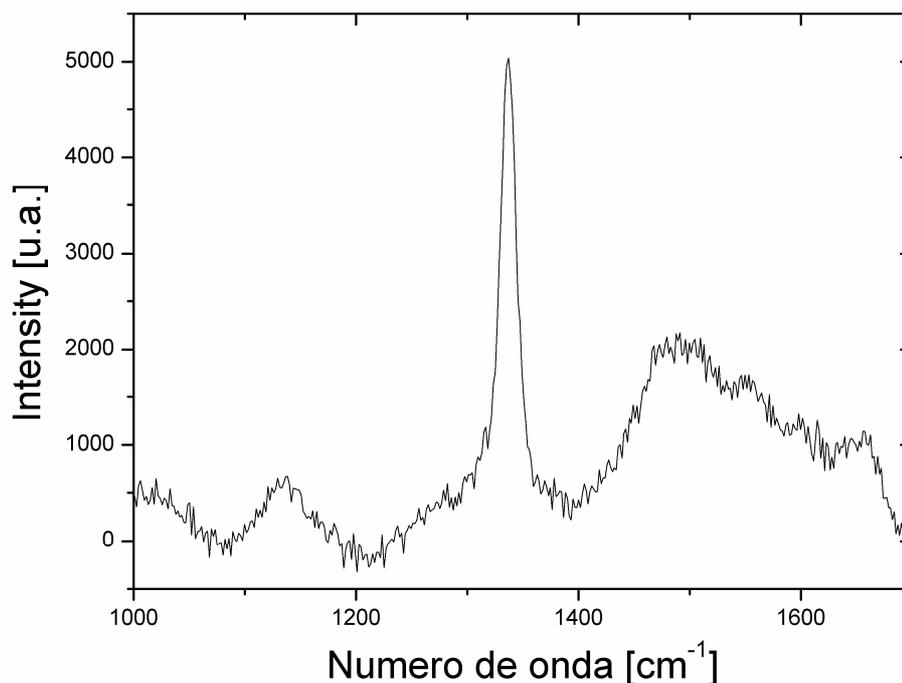


Figura 7 – Espectro Raman obtido nesse trabalho para a Amostra da Figura 5

4.2 Desenvolvimento da plataforma computacional

Todo o desenvolvimento do software está sendo feito em C++ orientado a objeto, utilizando a IDE QT Creator. Alguns problemas foram levantados e tratados de forma individual encapsulando algumas funções.

O primeiro problema a ser solucionado no desenvolvimento do software é a integração com o Chemkin-II. Pois ele é a base para gerar todas as concentrações de todos os elementos químicos envolvidos na reação. Devido a isto foi necessário criar uma chamada do sistema para rodar a aplicação do Chemkin-II. Como o usuário irá abrir e

editar o arquivo de entrada do Chemkin -II no software, foi criada uma função que será chamada sempre que o botão for clicado, como demonstrado na Figura 8.

```
void Dialog::on_pushButton_3_clicked()
{
//endereço do Chemkin-II que está no diretório de execução do programa

    QString file = QDir().filePath("BigCkin.exe");

// Transforma o QStrin em Char
    char* cstr;
    std::string fname;
    fname = "start "+file.toStdString();
    cstr = new char [fname.size()+1];

// roda o Chemkin-II
    system(cstr);
}
```

Figura 8 – Trecho de código responsável pela chamada do software Chemkim

Após rodado a aplicação do Chemkin-II, um arquivo com extensão .OUT foi gerado, porém sua saída não é funcional para a plotagem de gráficos, dificultando o entendimento para o usuário. Para solucionar este problema, foi criado um algoritmo que faz a conversão deste arquivo em um outro arquivo mais funcional, onde será possível através dele plotar os gráficos.

O arquivo gerado pelo Chemkin-II será aberto no software em uma label, o conteúdo desta label será manipulado de forma a deixar os valores das concentrações dispostos de tal forma que será possível a plotagem dos gráficos, para isto foi criado a função demonstrada na Figura 9.

```
void MainWindow::convertArq(){
    FILE *arqle, *arqgrava;
    QString arq2;
    arq2 = ui->label->text(); //texto q está na label
    ui->label_2->setText(arq2); //coloca o texto na label 2

    QFile file(arq2);
    QFile file2("spec.dat");

    char* cstr;
    std::string fname;
    fname = arq2.toStdString();
    cstr = new char [fname.size()+1];
    strcpy( cstr, fname.c_str() );
}
```

```

if (!file.open(QIODevice::ReadOnly))
    QMessageBox::information(0,"Info",file.errorString());

if ((arqle = fopen(cstr,"r")) == NULL)
    { printf("\nNao encontrei o arquivo entrada\n");
      system("pause");
      exit(1);
    }
if ((arqgrava=fopen("spec.dat","w") == NULL)
    { printf("\nNao consegui gerar o arquivo saida\n");
      system("pause");
      exit(1);
    }
/* Convertendo o arquivo */
int VALOR=57, // Numero de linhas do arquivo de entrada
    MAX=3,
    cont1, cont2;
char car[10], entr[20];
MAX=MAX+26; // 26 = Numero de especies calculadas

for(cont1=1;cont1<=VALOR;cont1++)
{
    for(cont2=1;cont2<=MAX;cont2++)
    {
        fscanf(arqle,"%s",&car);
        if (cont1!=11 && cont1!=21 && cont1!=31 && cont1!=41 && cont1!=51)
            fprintf(arqgrava,"%s ",car);
    }

    if (cont1!=11 && cont1!=21 && cont1!=31 && cont1!=41 && cont1!=51)
        fprintf(arqgrava,"\n");
}

fclose(arqgrava);
fclose(arqle);

/* Abre o conteudo do arquivo no textBrowser */
QFile file3("spec.dat");
if (!file3.open(QIODevice::ReadOnly))
    QMessageBox::information(0,"Info",file.errorString());

QTextStream in(&file3);
ui->textBrowser_2->setText(in.readAll());
ui->label_2->setText("spec.dat");
}

```

Figura 9 – Função responsável pela conversão do arquivo Chemkin

O resultado deste algoritmo é um arquivo com os dados gerados pelo Chemkin ajustados, e automaticamente este arquivo é aberto em uma segunda label no software conforme demonstrado na Figura 10.

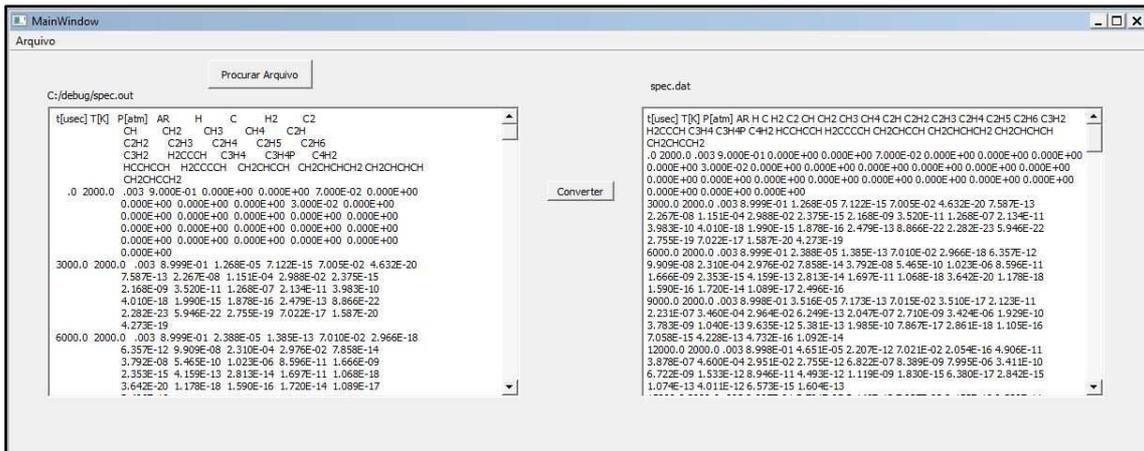


Figura 10 – Software gerado nesse trabalho mostrando arquivo gerado pelo Chemkin-II na esquerda e arquivo convertido na direita.

Agora com o arquivo convertido, o software irá gerar de forma automática os gráficos das concentrações dos elementos químicos no decorrer do tempo da reação. Para isto será utilizado uma biblioteca do QT Creator chamada QCustomPlot, que é uma biblioteca de plotagem de gráficos em C++. Os dados gerados pelo ChemKin-II e convertidos pelo software serão utilizados como variáveis para a plotagem dos gráficos e seguirão o seguinte modelo de código demonstrado na Figura 11. Este código, por exemplo, gera um gráfico como demonstrado na figura 12.

```
// Gerar alguns dados:
QVector < double > x ( 101 ), y ( 101 ); // inicializa com entradas 0..100
para ( int i = 0 ; i < 101 ; ++ i )
{
    x [i] = i / 50,0 - 1 ; // x vai desde -1 a 1
    y [i] = x [i] * x [i]; // vamos traçar uma função quadrática
}

// Cria gráfico e atribuir dados a ele:
customPlot-> addGraph ();
customPlot-> gráfico ( 0 ) -> setData ( x, y );
// Dar os eixos alguns rótulos:
customPlot-> xAxis-> setLabel ( "X" );
customPlot-> yAxis-> setLabel ( "y" );
// Conjunto de eixos faixas, por isso vemos todos os dados:
customPlot-> xAxis-> SetRange ( - 1 , 1 );
customPlot-> yAxis-> SetRange ( 0 , 1 );
customPlot-> replot ();
```

Figura 11 – Exemplo de uma função usando a biblioteca QCustomPlot

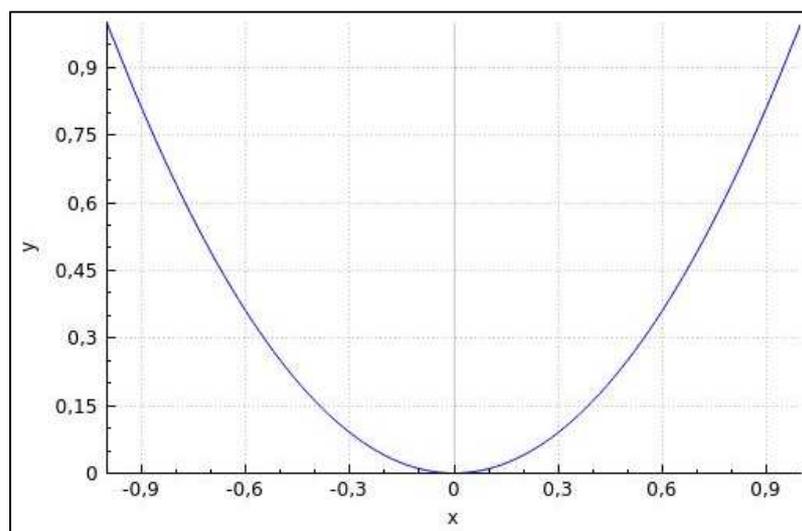


Figura 12 – Gráfico gerado pelo QT Creator utilizando a biblioteca QCustomPlot.

5 Referências Bibliográficas

¹ Gavinier, D. B. ESTUDO DO AMBIENTE DE CRESCIMENTO DE FILMES NANOESTRUTURADOS DE DIAMANTE 2009. 161 p. (INPE-16580-TDI/1569).Tese (Doutorado em Ciência e Tecnologia de Materiais e Sensores) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos. 2009.

² MAY, P. W.; ASHFOLD, M. N. R.; MANKELEVICH, Y. A. Journal of Applied Physics, v. 101, p. 053115-1, 2007.

³ HOFFMAN, A; GOUZMAN, L; MICHAELSON, S. Thin Solid Films, v.515, p. 14-26, 2006

⁴ HARRIS, S. J. MARTIN, L. R.; Journal of Materials Research, v. 5, n. 11, p. 2313-2319,1990

⁵ CORAT, E. J.; GOODWIN, D. G. Journal of Applied, v. 74, n.3, p. 2021-2029, 1993.

⁶ Physics, v. 74, n.3, p. 2021-2029, 1993.

⁷ GOODWIN, D. G. Applied Physics Letters, v. 59, n.3, p. 277-279, 1991.

⁸ MATSUMOTO, S.; SATO, Y.; KAMO, M.; Japanese Journal of Applied Physics Part 2- Letters, v. 21, n. 4, p. L183-L185, 1982.

⁹ Martins, G.V. ; Silva, C.R.M. ; Nunes, C.A. ; Trava-Airoldi, V.J. ; Borges Junior, L.A. ; Machado, J.P.B. In: Seventh International Latin American Conference on Powder Technology - PTECH, 2009, Atibaia-Brasil. Proceeding of Ptech 2009, 2009. v. 1.

-
- ¹⁰ DAVENPORT, M. C&EN, 16 maio 2016.
- ¹¹ R.A. Campos, V.J. Trava-Airoldi, O.R. Bagnato, J.R. Moro, E.J. Corat, Vacuum 89 (2013) 21-25.
- ¹² A. V. Sumant, A. R. Krauss, D. M. Gruen, O. Auciello, A. Erdemir, M. Williams, A. F. Artiles and W. Adams, Tribol. Trans. 48, 24 (2005)
- ¹³ N. Kumar, K. Panda, S. Dash, C. Popov, J.P. Reithmaier, B.K. Panigrahi, A.K. Tyagi, B. Raj, AIP Advances 2 (2012) 032164.
- ¹⁴ V.N. Mochalin, O.Shenderova, D. Ho, Y. Gogotsi, Nat. Nanotechnol. 7 (2012) 11-23.
- ¹⁵ TRAVA-AIROLDI, V. J.; CORAT, E. J. ; MORO, J. R. Revista Brasileira de Aplicações de Vácuo (Impresso), v. 25, p. 71-74, 2006.
- ¹⁶ A. V. Sumant, A. R. Krauss, D. M. Gruen, O. Auciello, A. Erdemir, M. Williams, A. F. Artiles and W. Adams, Tribol. Trans. 48, 24 (2005)
- ¹⁷ ALMEIDA, E. C.; AZEVEDO, A. F.; BALDAN, M. R.; BRAGA, N. A.; ROSOLEN, J.M.; FERREIRA, N. G. Chemical Physics Letters, v. 438, n. 1-3,p. 47-52, 2007.
- ¹⁸ BARQUET, D. M. Estudo de interfaces na deposição química de diamante, a partir da fase vapor, sobre carboneto de tungstênio sinterizado por cobalto. Tese (Doutorado em Física) | Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 1997. 82
- ¹⁹ LEE, S.-TONG; LIN, Z.; JIANG, X. Materials Science and Engineering, v. 25, p. 123-154, 1999.
- ²⁰ MAY, P. W. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, v. 358, p. 473-495, 2000.
- ²¹ YARBROUGH, W. A; MESSIER, R. Science, v. 247, n. 4943, p. 688-696, 1990.
- ²² NAZARETH, M. H.; NEVES, A J. United Kingdom: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, London, 2001.
- ²³ KEE, R. J.; RUPLEY, F. M.; MILLER, J. A. Chemkin-II: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas- phase chemical kinetics. USA. Local: Sandia National Laboratories, 1990, Technical Report SAND89-8009.