

## Espectroscopia de Diamantes com diferentes radiações incidentes

Paulo Roberto F. de Albuquerque<sup>1\*</sup>, Fabio Rodrigues<sup>2</sup>, Paulo Sérgio Santos<sup>2</sup>, Rainer A. Schultz-Güttler<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>*Instituto de Geociências / USP – Rua do Lago, 562 – Butantã, São Paulo – SP*

*CEP 05508-080*

*(\*paulo.geologist@ig.com.br)*

<sup>2</sup>*Instituto de Química / USP – Av. Prof. Lineu Prestes, 748 – Butantã, São Paulo – SP*

*CEP 05508-900*

O diamante, desde sua descoberta na Índia, cujos relatos remontam a datas anteriores ao nascimento de Cristo, tem exercido grande fascínio em nossa civilização. Sua importância vai desde tecnológica, é mineral estratégico na indústria de abrasivo, com consumo de cerca de 644 milhões de quilates ao ano e valor ao redor de 1 bilhão de dólares, segundo o Serviço Geológico dos Estados Unidos da América (USGS) (Olson, 2006a), até estético, sendo a gema mais importante e lucrativa, com produção estimada de cerca de 183 milhões de quilates ou 6,54 bilhões de dólares no ano de 2005 somente pela empresa De Beers (Olson, 2006b), a mais importante do mundo nesse ramo.

Devido a essa grande importância tecnológica e comercial, os diamantes são minerais muito estudados, sendo os únicos a possuírem diversas publicações científicas dedicadas a eles (como, por exemplo, *Diamond and Related Materials*, *Industrial Diamond Review* e *Industrie Diamanten Rundschau*), envolvendo tanto diamantes naturais como sintéticos, para diversos fins.

A pesquisa com diamantes naturais, financiada principalmente pela própria indústria diamantífera, voltada em grande parte para o entendimento do seu modo de ocorrência e a prospecção de novas jazidas (e.g. Gurney et al., 1993; Schulze, 2003; Lorenz & Kurszlaukis, 2003; Griffin & O'Reilly, 2004), nos levou a descobertas fascinantes sobre sua formação no interior da Terra, seu transporte do seu local de formação até a superfície e, principalmente, as informações nele contidas, na forma de inclusões, sobre o manto terrestre. Essas inclusões são a única evidência direta da composição do manto e em conjunto com os defeitos na rede cristalina nos fornecem informações sobre a sua formação. Essas informações sobre podem ser de especial importância para a indústria de diamantes, podendo indicar se um diamante é natural ou sintético e se sofreu algum tipo de tratamento para aumentar seu valor comercial.

Métodos analíticos que consigam conferir e obter informações estruturais desses diamantes são procurados, sendo desejadas técnicas não destrutivas e de fácil manuseio. Nesse contexto, destaca-se a espectroscopia Raman, técnica que não danifica a amostra e pode ser utilizada em diamantes brutos, numa grande faixa de tamanho, sem necessidade de preparo da amostra.

Os diamantes possuem apenas um modo vibracional, muito intenso e característico, em *ca.* 1332  $\text{cm}^{-1}$ , correspondente à vibração C-C. Essa banda é comum tanto a diamantes naturais quanto sintéticos e não é utilizado para sua diferenciação. No entanto a inclusão de alguns elementos ou a presença de defeitos na rede cristalina do diamante altera sua estrutura, podendo gerar alteração de sua coloração, por exemplo, o que pode torná-lo mais ou menos valioso, dependendo da natureza deste processo (natural ou artificial). Essa dopagem e os defeitos presentes na rede cristalina do diamante também influem em seu espectro de absorção eletrônica, podendo gerar processos de fotoluminescência. Esse efeito, com seção de choque muitas ordens de grandeza maior do que o do espalhamento Raman, é normalmente indesejado na espectroscopia Raman, por sobrepor as bandas e mascarar o espectro. Entretanto, nesse

caso, pode fornecer informações importantes sobre sua estrutura e as duas técnicas aliadas podem ser utilizadas para uma melhor caracterização dos diamantes.

Tradicionalmente, os espectros Raman são realizados com apenas uma radiação incidente, normalmente 514 nm ou 633 nm simplesmente pelo fato de serem os lasers mais comuns no mercado. Nesse trabalho, utilizamos como objeto de estudo 5 diamantes brasileiros, brutos, originários da região de Rondônia, estudados em um equipamento Raman Jobin Yvon U-1000 com duplo monocromador e detecção por fotomultiplicadora com radiações incidentes de 488 nm e 514 nm (laser de argônio) e 406 nm, 413 nm e 633 nm (laser de criptônio) e FT-Raman Bruker UPS/100 com radiação incidente de 1064 nm, para caracterizar como as diferentes radiações podem fornecer informações a respeito dos defeitos e inclusões nos diamantes, procurando também identificar quais radiações são mais adequadas para cada tipo de observação..

A figura 1 mostra dois exemplos de diamantes estudados e o perfil de Raman e luminescência encontrado.

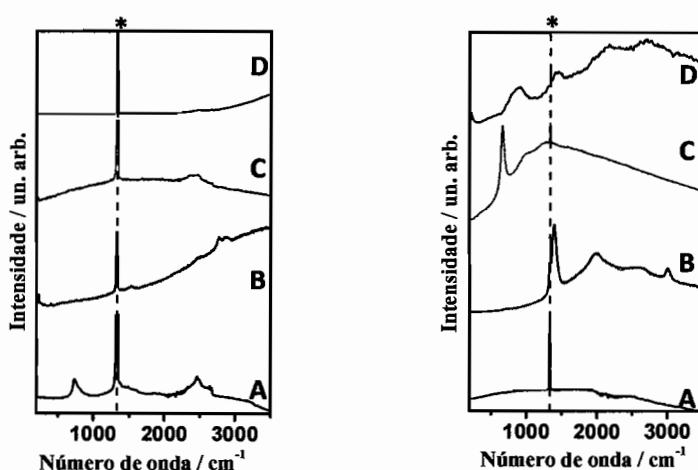


Figura 1: Espectro Raman de dois diamantes nas radiações: A) 1064 nm, B) 633 nm, C) 488 nm e D) 413 nm. \* banda do estiramento C-C do diamante.

Usando a radiação de 1064 nm, por exemplo, não aparece fluorescência e apenas bandas Raman são vistas, ao passo que nas demais radiações, novas bandas, bastante largas são vistas, resultado também do processo de fotoluminescência. Com isso, podemos obter diversas informações estruturais nos diamantes aliando-se as duas técnicas e explorando diversas radiações; conclui-se de que é uma técnica bastante eficiente e não destrutiva de estudo das amostras brutais.

## Referências

- GURNEY, J.J., HELMSTAEDT, H. & MOORE, R.O. 1993. A review of the use and application of mantle mineral geochemistry in diamond exploration. *Pure & Applied Chemistry*, 65:2423-2442.
- GRIFFIN, W.L. & O'REILLY, S.Y. 2004. Upper mantle composition: tools for smarter diamond exploration. In: DeBeers Diamond Conference, Ext. Abst., Warwick, England, p.
- LORENZ, V. & KURSZLAUKIS, S. 2003. Kimberlite pipes: growth models and resulting implications for diamond exploration. In: 8<sup>th</sup> International Kimberlite Conference Long Abstract, p.
- SCHULZE, D.J. 2003. A classification scheme for mantle derived garnets in kimberlite: a tool for investigating the mantle and exploring for diamonds. 2003, 71:195-213.
- OLSON, D.W. 2006a. 2005 Minerals Yearbook: Diamonds, Industrial. Geological Survey Vol. pp. <http://minerals.usgs.gov/minerals/pubs/commodity/diamond/diamomyb05.pdf>
- OLSON, D.W. 2006b. 2005 Minerals Yearbook: Gemstones. Geological Survey Vol. pp. <http://minerals.usgs.gov/minerals/pubs/commodity/gemstones/gemstmyb05.pdf>

## Agradecimentos

Os autores agradecem às agências CNPq e FAPESP pelo auxílio financeiro.