

## APLICAÇÃO DAS TÉCNICAS DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA À ANÁLISE DE MINERAIS-GEMAS: IDENTIFICAÇÃO E QUANTIFICAÇÃO DE CENTROS DE COR

Klaus Wilhelm Heinrich Krambrock<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

**RESUMO:** A Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR do inglês: electron paramagnetic resonance) é uma das técnicas espectroscópicas fundamentais na investigação de impurezas paramagnéticas e centros paramagnéticos em materiais sólidos incluindo os minerais-gemas. Quase todo conhecimento que temos atualmente sobre os centros de cor em minerais-gemas foi extraído através desta técnica em conjunto com espectroscopias ópticas. Várias informações detalhadas podem ser obtidas através da EPR: a identidade química, a quantidade, ou seja, a concentração, a simetria local do defeito (impureza), sua interação com a rede cristalina, estabilidade térmica e ligação com a rede. Impurezas paramagnéticas são as que contêm elétrons desemparelhados com spin não nulo ( $S \neq 0$ ) na última camada, os quais formam frequentemente também centros de cor. As mais importantes impurezas cromóforas são os metais de transição (elementos 3d - 5d) e as terras raras (4f). Outro grupo de centros paramagnéticos são os centros elétron-buraco. Em geral, estes são produzidos através de radiação ionizante ou irradiação com partículas de alta energia (elétrons, nêutrons ou prótons), processos muito utilizados na melhoria da cor de minerais-gemas e conseqüentemente para agregar valor a esta matéria prima. A grande vantagem da técnica de EPR é sua alta sensibilidade que pode chegar a níveis de impurezas na faixa de ppb, lembrando que vários minerais-gemas contêm 10-100 ppm de centros de cor, inacessíveis para várias outras técnicas. Vale a pena mencionar que a EPR é uma espectroscopia não destrutiva. A EPR é pouco conhecida e difundida na geociência. Neste trabalho apresentaremos os princípios físicos desta técnica e daremos vários exemplos de análise de espectros de EPR em minerais-gemas, mostrando seu grande potencial [1-6]. Daremos uns poucos exemplos que se relacionam as técnicas avançadas de ressonância magnética como a ressonância dupla eletro-nuclear (ENDOR do inglês: electron nuclear double resonance) e a detecção óptica de ressonância magnética (ODMR do inglês: optical detection of magnetic resonance) com a qual a correlação direta entre a cor e os centros responsáveis pode ser obtida. Além disso, mostraremos que esta técnica também é uma ferramenta para se distinguir gemas sintéticas das naturais. Várias outras aplicações de EPR na mineralogia como na análise de petróleo também serão mencionadas. [1] K. Krambrock, M.V.B. Pinheiro, K.J. Guedes, S.M. Medeiros, S. Schweizer, J.-M. Spaeth, *Physics and Chemistry of Minerals*, 31, 167-174 (2004). [2] D.N. da Silva, K.J. Guedes, M.V.B. Pinheiro, J.-M. Spaeth; K. Krambrock, *Physics and Chemistry of Minerals*, 32, 436-441 (2005). [3] K.J. Guedes, K. Krambrock, M.V.B. Pinheiro, L.A.D. Menezes Filho, *Physics and Chemistry of Minerals*, 33, 553-557 (2006). [4] K. Krambrock, L.G.M. Ribeiro, M.V.B. Pinheiro, A.S. Leal, M.A. de B.C. Menezes, J.-M. Spaeth, *Physics and Chemistry of Minerals*, 34, 437-444 (2007). [5] K. Krambrock, K.J. Guedes, M.V.B. Pinheiro, *Physics and Chemistry of Minerals*, 35, 409-415 (2008). [6] L.N. Dias, M.V.B. Pinheiro, K. Krambrock, *Physics and Chemistry of Minerals*, 36, 519-525 (2009).

**PALAVRAS-CHAVE:** EPR; CENTROS DE COR.