



SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL POR DFT E EXTRAÇÃO DE CURCUMINA DO AÇAFRÃO DA TERRA PARA APLICAÇÃO EM DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS

¹**Larissa Adriele Martins(IC)***, ¹David F. C. da Silva(IC), ²Marco A. T. Da Silva(PQ)

larissaadriele@alunos.utfpr.edu.br*; davidfernando@alunos.utfpr.edu.br,
marcosilva@professores.utfpr.edu.br

¹Curso de Bacharelado em Engenharia de Materiais, UTFPR - LD; ²Departamento de Física, UTFPR – LD.

Palavras-chave: curcumina, teoria funcional da densidade (DFT), células solares orgânicas.

HIGHLIGHTS

Computational DFT simulation and curcumin extraction from turmeric for application in photovoltaic devices; Curcumin extracted with ethanol or chloroform for solar devices; Optical and electrochemical tests confirm stability; DFT and experiments show promise for sustainable photovoltaics.

RESUMO

Este trabalho avaliou a viabilidade do uso do extrato de curcumina, principal composto ativo da *Curcuma longa* L., em dispositivos fotovoltaicos. A extração foi realizada utilizando álcool etílico ou clorofórmio como solvente, por agitação magnética durante 18 horas e por sonificação por ultrassom por 30 minutos. Os rendimentos variaram de 22,59% a 49,01%, sendo que a agitação magnética em clorofórmio apresentou o maior rendimento, enquanto a sonificação em clorofórmio (31,92%) mostrou-se mais vantajosa devido ao menor tempo de extração. As amostras foram caracterizadas por FTIR, UV-Vis, Raman, PL e voltametria cíclica. Os espectros de FTIR e Raman confirmaram a preservação da estrutura química da curcumina, apresentando bandas típicas de vibrações de fenol, C=C aromático, grupo metoxila e C-H. No UV-Vis, observou-se absorção intensa entre 350 e 500 nm, com máximos em 415 nm (clorofórmio) e 430 nm (DMSO), enquanto os espectros de PL mostraram emissões em 495 e 527 nm. A voltametria cíclica indicou valores de band gap entre 1,6 e 2,0 eV, compatíveis com aplicação em camadas ativas de dispositivos fotovoltaicos orgânicos. Paralelamente, cálculos teóricos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando o software Orca 6.0.0, foram realizados para investigar propriedades estruturais e eletrônicas. Os resultados simulados apresentaram boa concordância com os experimentais, evidenciando o potencial da curcumina como material ativo para o desenvolvimento de dispositivos fotovoltaicos sustentáveis e de baixo custo.

AGRADECIMENTOS

Labmult-Id UTFPR, Labspec UEL, Lab Química UTFPR, CNPq, Fundação Araucária, PPGCEM UTFPR.