

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, Materiais e de Minas

Tese de Doutorado

“Aplicação do método dos elementos finitos na análise do comportamento mecânico
de instrumentos endodônticos de níquel-titânio”

Autor: Leandro de Arruda Santos
Orientador: Prof. Vicente Tadeu Lopes Buono

Abril/2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, Materiais e de Minas

Leandro de Arruda Santos

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NA ANÁLISE DO
COMPORTAMENTO MECÂNICO DE INSTRUMENTOS ENDODÔNTICOS
DE NÍQUEL-TITÂNIO

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Metalúrgica, Materiais e de Minas da Universidade Federal de Minas Gerais

Área de concentração: Ciência e Engenharia de Materiais
Orientador: Prof. Vicente Tadeu Lopes Buono

Belo Horizonte
Escola de Engenharia da UFMG
2013

Agradecimentos

Um trabalho de doutorado não é uma atividade individual, é resultado da colaboração de diversas pessoas. Logo, agradeço a:

Vicente Tadeu Lopes Buono, não somente pela orientação dedicada a este trabalho, mas pela maneira com que me acolheu na Escola de Engenharia, pela concepção da ideia, confiança em meu trabalho, conversas elucidativas de âmbito técnico/científico e filosófico, amizade e claro, pelas diversas caronas.

Javier Bayod López, pela orientação e auxílio durante minha estadia na Universidad de Zaragoza, e por me receber muito bem na Espanha.

Estevam Barbosa de Las Casas pelo auxílio constante nas atividades aqui no Brasil e no exterior.

Meus companheiros da odontologia, por suas valorosas contribuições, em especial a: Ana Cecília Diniz Viana, Maria Guiomar de Azevedo Bahia e Isabela Faria da Cunha Peixoto.

Meus companheiros na Espanha, que me auxiliaram na difícil tarefa de decifrar o mundo dos elementos finitos: Olfa Trabelsi, Victor Acosta, Sara Manzano Martín, Libardo Andrés González, Fares El Halabi e Carlos Marzo Mainar.

Todos os professores e companheiros da Escola de Engenharia da UFMG que, de uma maneira ou de outra, contribuíram para tornar este período mais proveitoso ou, ao menos, agradável.

Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de estudos.

Sumário

1	Introdução	1
2	Objetivos	3
3	Revisão bibliográfica	4
3.1	Ligas Ni-Ti	4
3.1.1	Sistema Ni-Ti	6
3.1.2	Transformação martensítica em ligas Ni-Ti	9
3.1.3	Efeito memória de forma e superelasticidade	17
3.1.4	Comportamento termomecânico das ligas Ni-Ti	18
3.1.5	Efeito do tratamento termomecânico nas ligas Ni-Ti	22
3.2	Instrumentos endodônticos de Ni-Ti	22
3.3	Método dos elementos finitos	26
3.4	Estado da arte	29
4	Simulações numéricas	35
4.1	Validação dos modelos numéricos	35
4.1.1	Elaboração dos modelos geométricos	36
4.1.2	Elaboração das malhas	38
4.1.3	Modelo constitutivo	41
4.1.4	Condições de contorno e carregamento	45
4.1.5	Resultados e discussão	46
4.2	Comportamento mecânico dos instrumentos <i>Mtwo</i>	54
4.2.1	Condições de contorno	55
4.2.2	Resultados e discussão	57
4.3	Comportamento mecânico de um instrumento de níquel-titânio mar- tensítico	58
4.3.1	Geometria, malha e condições de contorno	60
4.3.2	Modelos constitutivos	60
4.3.3	Resultados e discussão	63

5 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	68
Referências bibliográficas	70
Publicações do autor relacionadas ao trabalho	78

Lista de Figuras

3.1	Diagrama de fases Ni-Ti. Adaptado de Massalski <i>et al.</i> (1990).	7
3.2	Curvas TTT de uma liga Ti-52Ni. Adaptado de Nishida <i>et al.</i> (1986).	8
3.3	Representação da célula unitária da fase β : estrutura cúbica do tipo B2.	9
3.4	Representação esquemática da distorção de rede ocasionada pela precipitação de Ti_3Ni_4 (TADAKI <i>et al.</i> , 1986).	9
3.5	Transformação martensítica: (a) estrutura totalmente austenítica; (b) formação de uma variante de martensita separada da fase austenita por uma interface também conhecida como plano de hábito; (c) crescimento da variante de martensita; (d) estrutura totalmente martensítica. Adaptado de Wayman e Duerig (1990).	10
3.6	Representação esquemática dos tipos de deformação invariante de rede que ocorrem na transformação martensítica: (a) mudança de forma na transformação martensítica; (b) acomodação de deformações por escorregamento; (c) acomodação de deformações por maclação.	11
3.7	Representação esquemática de um contorno de macla.	12
3.8	Representação esquemática dos processos decorrentes da aplicação de tensão na estrutura martensítica: (a) estado não deformado; (b) acomodação de maclas e formação de maclas compostas; (c) reorientação da martensita; (d) reorientação adicional e demaclação da martensita; (e) processo de demaclação; (f) geração de deslocamentos pela deformação adicional. Adaptado de Liu <i>et al.</i> (1999).	13
3.9	Temperaturas de início e fim da transformação martensítica e da transformação reversa.	14
3.10	Representação da célula unitária da martensita B19' (OTSUKA; REN, 2005).	14
3.11	Curvas DSC de uma liga Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica.	15
3.12	Representação esquemática da TM induzida por tensão.	16

3.13	Relação entre tensão crítica para a formação da martensita, tensão crítica para o escorregamento da austenita e temperatura.	17
3.14	Representação esquemática do EMF.	18
3.15	Curva tensão-deformação para uma liga Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica com estrutura martensítica.	19
3.16	Curva tensão-deformação para uma liga Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica com estrutura inicialmente austenítica.	20
3.17	Curva tensão-deformação para um metal convencional apresentando comportamento elasto-plástico.	21
3.18	(a) Regiões anatômicas do canal radicular. (b) Etapas do tratamento endodôntico: um dente apresentando inflamação na região apical do canal radicular passa pela etapa de limpeza e formatação, onde o tecido inflamado é removido e o canal formatado com o auxílio de um instrumento endodôntico rotatório. Posteriormente, o canal formatado é obturado.	23
3.19	Geometria de um instrumento endodôntico rotatório modelo <i>ProTaper Universal F1</i> (Dentsply Maillefer, Ballaigues, Suíça).	24
3.20	Imagens de secções transversais de diferentes instrumentos endodônticos obtidas por microscopia eletrônica de varredura. Respectivamente: lima <i>ProTaper Universal F1</i> (Dentsply Maillefer), lima <i>RaCe</i> (FKG) e lima <i>Mtwo</i> (VDW).	24
3.21	Raio e ângulo de curvatura descritos pelos parâmetros r e α (PRUETT <i>et al.</i> , 1997).	25
3.22	Estado de tensões em um ponto de um corpo submetido a um carregamento.	28
4.1	Etapas da elaboração do modelo de elementos finitos.	36
4.2	Obtenção de um modelo geométrico por micro-CT da lima <i>PTU F1</i> : (a) secção transversal; (b) e (c) vistas laterais; (d) modelo 3D resultante.	37
4.3	(a) Modelos 3D. (b) Secções transversais a 3 mm da ponta.	39
4.4	Malhas.	40
4.5	Teste de convergência: o ponto em vermelho marca o número de elementos que foi utilizado para o modelo <i>PTU F1</i>	41
4.6	Parâmetros necessários para o uso da UMAT para materiais superelásticos (ABAQUS, 2004).	42
4.7	(a) Condições de contorno e carregamento. (b) Distribuição de tensões de von Mises para a viga tracionada em 14%.	43
4.8	(a) Curvas experimentais. (b) Ajuste numérico.	44

4.9	(a) Ensaio de flexão. (b) Ensaio de torção.	45
4.10	Condições de contorno e carregamento.	46
4.11	Resultados numéricos em flexão.	47
4.12	Comparação entre curvas de flexão calculadas numericamente e curvas obtidas experimentalmente.	49
4.13	Secções transversais a 4 mm da ponta dos instrumentos submetidos à flexão. Sentido da flexão: de cima para baixo	50
4.14	Resultados numéricos de torção.	52
4.15	Secções transversais, a 3 mm da ponta, dos instrumentos submetidos à torção no sentido horário.	53
4.16	Comparação entre curvas de torção calculadas numericamente e curvas obtidas experimentalmente.	54
4.17	Variação do valores de h devido à orientação da secção transversal em relação à direção de flexão: (a) para o instrumento <i>Mtwo</i> ; (b) para o instrumento <i>PTU F1</i>	56
4.18	Condições de contorno.	56
4.19	Distribuições de tensões ao redor da secção transversal da lima <i>Mtwo</i> no ponto de engaste: desde 2,5 mm, 3 mm, 3,5 mm e 4 mm da ponta. Sentido da flexão: de cima para baixo	57
4.20	Distribuições de tensões ao redor da secção transversal da lima <i>PTU F1</i> no ponto de engaste: desde 2,5 mm, 3 mm, 3,5 mm e 4 mm da ponta. Sentido da flexão: de cima para baixo	57
4.21	Curvas de momento-flexão para o instrumento: (a) <i>Mtwo</i> e (b) <i>PTU F1</i> , nas diferentes posições de engaste.	59
4.22	Modelo geométrico para a lima <i>Hyflex</i> e respectiva malha.	61
4.23	Curva tensão-deformação e ajuste numérico para: (a) Ni-Ti martensítico; (b) aço inoxidável.	62
4.24	Resultados de flexão para o instrumento <i>Hyflex</i> com diferentes materiais.	64
4.25	Comparativo entre os resultados de flexão para o instrumento <i>Hyflex</i> constituído de Ni-Ti martensítico, Ni-Ti superelástico e aço inoxidável.	65
4.26	Resultados de torção para o instrumento <i>Hyflex</i> com diferentes materiais.	66
4.27	Comparativo entre os resultados de torção para o instrumento <i>Hyflex</i> constituído de Ni-Ti martensítico, Ni-Ti superelástico e aço inoxidável.	67

Lista de Tabelas

3.1	Comparação entre algumas propriedades das ligas Ni-Ti, de composição aproximadamente equiatômica, e do aço inoxidável austenítico.	6
4.1	Parâmetros utilizados no modelo constitutivo.	42
4.2	Parâmetros geométricos da viga.	43

Lista de Notações

- $((\frac{\delta\sigma}{\delta T})_L) \frac{\delta\sigma}{\delta T}$ no carregamento
- $((\frac{\delta\sigma}{\delta T})_U) \frac{\delta\sigma}{\delta T}$ no descarregamento
- (ΔH) Entalpia de transformação por unidade de volume
- (ΔS) Entropia de transformação por unidade de volume
- (ε) Deformação de transformação
- (ε^L) Deformação durante a transformação martensítica
- (ν_A) Razão de poisson da austenita
- (ν_M) Razão de poisson da martensita
- (σ) Tensão uniaxial
- (σ_{CL}^S) Início da transformação martensítica durante compressão
- (σ_L^S) Início da transformação martensítica
- (σ_L^E) Fim da transformação martensítica
- (σ_U^S) Início da transformação reversa
- (σ_U^E) Fim da transformação reversa
- (A_f) Temperatura de fim da transformação reversa
- (A_s) Temperatura de início da transformação reversa
- (DSC) Calorimetria exploratória diferencial
- (E_A) Módulo de elasticidade da austenita
- (E_M) Módulo de elasticidade da martensita
- (EMF) Efeito memória de forma
- (LMF) Ligas com memória de forma
- (MC) Memória controlada
- (M_d) Temperatura limite onde não há mais a indução de martensita por tensão
- (MEF) Método dos elementos finitos
- (M_f) Temperatura de fim da transformação martensítica
- $(micro-CT)$ Microtomografia computadorizada
- (MIT) Martensita induzida por tensão
- (M_s) Temperatura de início da transformação martensítica
- (R_f) Temperatura de fim da transformação da fase R

- (Rs) Temperatura de início da transformação da fase R
- (SE) Superelasticidade
- (T_0) Temperatura de referência
- (TM) Transformação martensítica
- (TR) Transformação reversa
- (TTT) Tempo-temperatura-transformação
- (UMAT) *User material subroutine*

Resumo

Neste trabalho avaliou-se o comportamento mecânico de diferentes instrumentos endodônticos rotatórios de níquel-titânio utilizando-se o método dos elementos finitos. Os instrumentos *Mtwo* 25/.06, *RaCe* 25/.06, *ProTaper Universal S2* e *F1* e *Hyflex* 30/.06 foram submetidos à microtomografia computadorizada para a obtenção de modelos tridimensionais de suas geometrias. As condições de contorno e carregamento utilizadas foram escolhidas com base na especificação ISO 3630-1, para testes de flexão e torção de instrumentos endodônticos. Uma sub-rotina específica para materiais superelásticos foi utilizada para a descrição do comportamento do material. Realizou-se uma comparação entre os resultados numéricos e experimentais em flexão e torção para os instrumentos *Mtwo*, *RaCe*, *ProTaper Universal S2* e *F1*. A boa concordância entre simulação e experimento indicou que os modelos numéricos utilizados no estudo eram acurados. Os resultados mostraram que o instrumento *ProTaper Universal F1* é o menos flexível, com tensão máxima de 1.185 MPa quando fletido até 45°. Por outro lado, o instrumento *ProTaper Universal F1* apresentou a maior resistência à torção. O comportamento em flexão do instrumento *Mtwo* exibiu uma elevada dependência da orientação da secção transversal em relação à direção de flexão, mostrando que outros parâmetros geométricos da secção, como a simetria, devem ser considerados além do segundo momento de inércia. O comportamento do instrumento *Hyflex* foi avaliado com o uso de diferentes materiais: níquel-titânio superelástico, níquel-titânio martensítico e aço-inoxidável. Os resultados apontaram o instrumento de níquel-titânio martensítico como o mais flexível e, possivelmente, mais resistente à fadiga por flexão.

Palavras-chave: Instrumentos endodônticos, ligas de níquel-titânio, comportamento mecânico, método dos elementos finitos.

Abstract

The mechanical behavior of different nickel-titanium rotary endodontic instruments was evaluated using the finite element method. Mtwo 25/.06, RaCe 25/.06, ProTaper Universal S2 and F1 and Hyflex 30/.06 instruments were scanned by computed micro tomography aiming to obtain the tridimensional models of their geometries. The boundary and loading conditions were chosen based on the specification ISO 3630-1, for bending and torsion tests of endodontic instruments. A specific subroutine for superelastic materials was used to describe the behavior of the material. A comparison among the numerical and experimental results was performed for Mtwo, RaCe, ProTaper Universal S2 and F1 instruments. The good agreement between simulation and experiment indicated the accuracy of the numerical models used in this work. Based on the results, ProTaper Universal F1 instrument was the least flexible, presenting a maximum stress of 1,185 MPa when bent until 45°. On the other hand, ProTaper Universal F1 instrument presented the highest torsional strength. The behavior of the Mtwo instrument under bending presented a strong relationship between the orientation of the cross-section and the direction of the bending load, showing that other geometrical parameters of the cross-section, such as the symmetry, must be considered than just the second moment of inertia. Hyflex instrument's behavior was evaluated using different materials: superelastic nickel-titanium, martensitic nickel-titanium and stainless steel. The results indicated that the instrument made of martensitic nickel-titanium is the most flexible and, probably, the most fatigue resistant.

Key Words: Endodontic instruments, nickel-titanium alloys, mechanical behavior, finite element method.

Capítulo 1

Introdução

Instrumentos endodônticos rotatórios, confeccionados a partir de fios superelásticos de níquel-titânio, representam um importante avanço na terapia endodôntica, pois apresentam diversas vantagens quando comparados aos instrumentos fabricados em aço inoxidável. Entre elas, estão uma maior flexibilidade, menos aberrações durante a formatação de canais radiculares e menor tempo de procedimento. Estas vantagens estão intimamente relacionadas com uma propriedade chamada superelasticidade, presente em ligas níquel-titânio equiatômicas. A superelasticidade é uma propriedade típica de materiais que apresentam o efeito memória de forma e confere ao material um comportamento elástico não-linear, permitindo que o mesmo sofra grandes deformações com um mínimo de deformação plástica residual após a retirada da carga. Este comportamento é explicado por uma transformação reversível no estado sólido a partir de uma fase chamada austenita para uma nova fase chamada martensita sob a aplicação de tensão.

Apesar de suas vantagens, a fratura dos instrumentos endodônticos de níquel-titânio permanece sendo uma preocupação na prática clínica. A fratura desses instrumentos pode ocorrer por sobrecarga de torção ou fadiga por flexão durante a preparação de canais curvos. A fratura por torção ocorre quando a ponta do instrumento é presa às paredes do canal enquanto a haste continua a girar. A fadiga por flexão acontece quando o instrumento gira em um canal curvo e é submetido a um número excessivo de ciclos de tração e compressão na região de curvatura máxima do canal. Logo, além da flexibilidade, a resistência à torção e à fadiga são propriedades essenciais para o bom desempenho desses instrumentos.

Recentemente, a análise do comportamento mecânico de instrumentos endodônticos de níquel-titânio através do método dos elementos finitos vem despertando grande

interesse. A maioria dos trabalhos que abordam o comportamento desses instrumentos em flexão e torção tem como base testes mecânicos em laboratório. A grande vantagem do método dos elementos finitos reside no fato de que não há a necessidade de inúmeros corpos de provas para realização de testes ou excessivas horas de ensaios experimentais. Além disso, esse método permite o acesso a informações que são muito difíceis de serem obtidas em laboratório, como a distribuição de valores de tensão ao longo dos instrumentos, de grande importância no estudo da fadiga dos mesmos.

Embora alguns trabalhos sobre instrumentos de níquel-titânio tenham sido publicados utilizando o método dos elementos finitos, este tema ainda carece de mais aprofundamentos e esclarecimentos. Principalmente com relação às condições de contorno utilizadas e a influência do material sobre as propriedades dos instrumentos. Logo, neste trabalho fez-se o uso do método dos elementos finitos para estudar diferentes aspectos dos instrumentos endodônticos de níquel-titânio e sua relação com o comportamento mecânico apresentado por eles. Realizou-se a validação dos modelos numéricos diretamente com resultados experimentais de torção e flexão, algo que, dentro do nosso conhecimento, ainda não foi realizado na literatura. Além da influência de aspectos geométricos, avaliou-se a influência do níquel-titânio martensítico, como material constituinte, sobre o comportamento mecânico dos instrumentos.

Capítulo 2

Objetivos

Este trabalho teve como objetivo geral avaliar o comportamento mecânico de diferentes instrumentos endodônticos de níquel-titânio sob condições de flexão e torção através do método dos elementos finitos. Para tal, os seguintes objetivos específicos foram propostos:

- Avaliar a influência da geometria de diferentes instrumentos endodônticos de níquel-titânio superelástico em seu comportamento sob flexão e torção.
- Comparar os resultados obtidos por simulação numérica com resultados obtidos em ensaios experimentais.
- Avaliar a influência do uso da liga níquel-titânio no estado martensítico como material constituinte sobre o comportamento de um instrumento endodôntico em flexão e torção.

Capítulo 3

Revisão bibliográfica

3.1 Ligas Ni-Ti

As ligas com memória de forma (LMF) são materiais fascinantes do ponto de vista da metalurgia física, pois apresentam efeito memória de forma (EMF) e superelasticidade (SE), também conhecida por pseudoelasticidade, propriedades que não são encontradas em metais e ligas metálicas convencionais. O EMF é característico de ligas que exibem transformação martensítica, onde deformações pseudoplásticas na fase de baixa temperatura dessas ligas são recuperadas por meio da transformação reversa ocasionada pelo aquecimento acima de uma temperatura crítica. Já a SE é um caso particular do EMF, presente na fase de alta temperatura das ligas, onde grades deformações não lineares (até 18%) podem ser recuperadas pela simples retirada da carga aplicada (OTSUKA; WAYMAN, 1998).

O EMF foi descoberto em uma liga Au-47,5at.%Cd¹ por Chang e Read (1951), mas sua popularidade foi alcançada somente com sua descoberta em uma liga Ni-Ti equiatômica por Buehler *et al.* (1963), no *Naval Ordnance Laboratory* (NOL) em Silver Spring, Maryland, EUA. Nesse meio tempo, o EMF também foi descoberto na liga In-Tl (BASINSKI; CHRISTIAN, 1954), porém sem despertar igual interesse da comunidade científica (OTSUKA; REN, 2005). Além das ligas Ni-Ti, somente as LMF à base de cobre e à base de ferro encontram usos práticos no mercado (SUZUKI, 1998).

A fabricação das ligas Ni-Ti engloba as seguintes etapas: (1) fundição da liga, (2) forjamento e laminação a quente, (3) trefilação a frio, (4) conformação e (5) tratamento

¹Todas as composições serão expressas em termos de porcentagem atômica neste trabalho, assim “at.%” será omitido a partir deste ponto, como “Au-47,5Cd”

de memória de forma. (1) Devido à alta reatividade do titânio com o oxigênio, a liga Ni-Ti geralmente é fundida em alto vácuo, em cadinhos de grafita ou cal (CaO), através de métodos de fusão por indução de alta frequência. Outros métodos de fusão também podem ser aplicados, como fusão por feixe de elétrons, fusão a arco com proteção de argônio ou fusão a arco de plasma. A grande vantagem da fusão por indução é o controle da composição química, uma vez que pequenas variações no teor de níquel da liga equiatômica Ni-Ti influenciam enormemente suas temperaturas de transformação, como será discutido em capítulos subsequentes. Após a fusão, o material é vertido no molde de fundição, ainda sob alto vácuo. (2) Depois de solidificado, o material é forjado e laminado a quente na forma de barras ou placas. A trabalhabilidade das ligas Ni-Ti é melhorada com o aumento da temperatura, embora a reatividade da superfície com o oxigênio também aumente paralelamente. Assim, a temperatura ótima para o trabalho a quente é em torno de 800 °C. (3) Em seguida, o material é trefilado a frio, sendo uma das etapas mais difíceis na fabricação da liga Ni-Ti, uma vez que a trabalhabilidade a frio desses materiais é baixa. Essa trabalhabilidade está relacionada intimamente com seu teor de níquel, sendo diminuída com o aumento desse teor. O trabalho a frio torna-se especialmente difícil quando a liga apresenta teores de níquel acima de 51%. Em muitos casos, é necessário empregar-se recozimentos intermediários. (4) A liga Ni-Ti é então conformada em sua forma final (fios, molas, etc.) e passa para a etapa final de fabricação, o tratamento de memorização de forma. (5) Aqui o material é mantido na sua forma final para que memorize esta forma. O tratamento é realizado em temperaturas na ordem de 350-450 °C (SUZUKI, 1998). Mais detalhes sobre o tratamento térmico de memória de forma e sua influência sobre o comportamento das ligas Ni-Ti serão discutidos ao longo deste trabalho.

As ligas Ni-Ti encontram aplicação em diversos segmentos, sendo os principais a indústria de atuadores, acoplamentos, médica e odontológica. A primeira aplicação em grande escala das ligas Ni-Ti aconteceu em 1971, na forma de um acoplamento para conexão de tubos hidráulicos de titânio em aviões Grumman F-14. Desde então, ligas Ni-Ti, com adição de elementos como ferro ou nióbio, vem sendo usadas em acoplamentos com base na contração/expansão que se observa nesses materiais como decorrência das transformações martensíticas através de mudanças na temperatura (MELTON, 1990). Estas mudanças de fases observadas nas ligas Ni-Ti permitem alterações geométricas de tal forma as principais aplicações desses materiais tem sido na indústria de atuadores térmicos, dispositivos capazes de converter energia térmica em energia mecânica e, assim, gerando força e deslocamento (OHKATA;

SUZUKI, 1998).

Outras aplicações de destaque das ligas Ni-Ti nos dias atuais encontram-se no campo da medicina e odontologia. Isso se deve, principalmente, ao fato desses materiais apresentarem biofuncionalidade e biocompatibilidade. A biofuncionalidade se refere à habilidade de um biomaterial em exercer certa função por um determinado período no organismo. Já a biocompatibilidade é a habilidade que os materiais têm em serem não tóxicos durante o seu tempo de implante (MIYAZAKI, 1998). Muitos são os usos das ligas Ni-Ti na medicina, entre os principais estão placas de fixação óssea utilizadas em regiões de fratura e *stents* para próteses endovasculares. Na odontologia, além da aplicação em instrumentos endodônticos, o uso de fios ortodônticos de Ni-Ti já é uma constante.

Na Tabela 3.1 é feita uma comparação entre algumas propriedades da liga Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica e do aço inoxidável austenítico. A variação muito elevada no valor do módulo de elasticidade da liga Ni-Ti se deve ao fato do mesmo poder estar no estado martensítico (baixo módulo de elasticidade) ou no estado austenítico (elevado módulo de elasticidade).

Tabela 3.1: Comparação entre algumas propriedades das ligas Ni-Ti, de composição aproximadamente equiatômica, e do aço inoxidável austenítico.

Propriedade	Ni-Ti	Aço inoxidável
Deformação recuperável	8,0%	0,8%
Biocompatibilidade	Excelente	Boa
Módulo de elasticidade	28-83 GPa	193 GPa
Densidade	6,45 g/cm ³	8,03 g/cm ³
Magnético	Não	Não
Limite de resistência	1240 MPa	760 MPa

3.1.1 Sistema Ni-Ti

O diagrama de fases Ni-Ti foi alvo de grande controvérsia por mais de trinta anos até ser estabelecido um consenso a seu respeito (OTSUKA; REN, 2005), após o estudo de inúmeros pesquisadores (DUWEZ; TAYLOR, 1950; PURDY; PARR, 1961; KOSKIMAKI *et al.*, 1969; WASILEWSKI *et al.*, 1971). Atualmente, o diagrama de fases mais confiável a respeito deste sistema é o publicado por Massalski *et al.* (1990) mostrado na Figura 3.1. Para ligas Ni-Ti com EMF, apenas a região na vizinhança do composto TiNi apresenta real interesse, sendo a discussão a seguir

baseada somente nesta parte do diagrama.

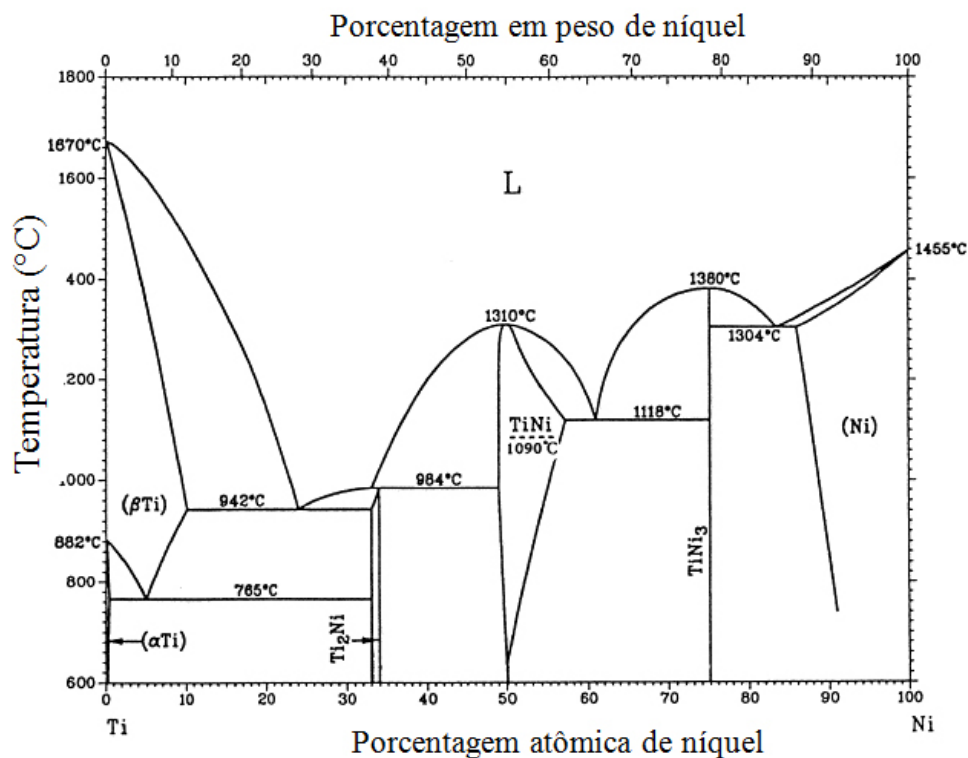


Figura 3.1: Diagrama de fases Ni-Ti. Adaptado de Massalski *et al.* (1990).

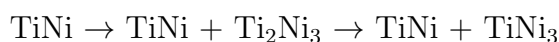
Nota-se que a fronteira da região TiNi, no lado rico em Ti, é praticamente vertical. Em contrapartida, a fronteira do lado rico em Ni decresce com o abaixamento da temperatura (OTSUKA; REN, 2005) e abaixo de 600 °C a região TiNi não é mostrada, porém é aceito que esta região se encontra na composição aproximadamente equiatômica, entre Ti-50Ni e Ti-50,5Ni (SABURI, 1998).

Ligas Ni-Ti com porcentagem atômica de níquel acima de 50,5% se decompõem em resfriamento lento a partir de altas temperaturas ou através de envelhecimento em temperatura abaixo de 700 °C depois de resfriamento rápido. Por exemplo, uma liga com composição Ti-52Ni se decompõe na forma mostrada nas curvas tempo-transformação-temperatura (TTT) da Figura 3.2, quando são envelhecidas em várias temperaturas depois de um resfriamento rápido a partir de 1000 °C. De acordo com a Figura 3.2, observa-se que existem três intervalos de temperatura bastante característicos do processo de decomposição:

1. envelhecimento em temperaturas abaixo de 680 °C



2. envelhecimento em temperaturas entre 680 °C e 750 °C



3. envelhecimento em temperaturas entre 750 °C e 800 °C

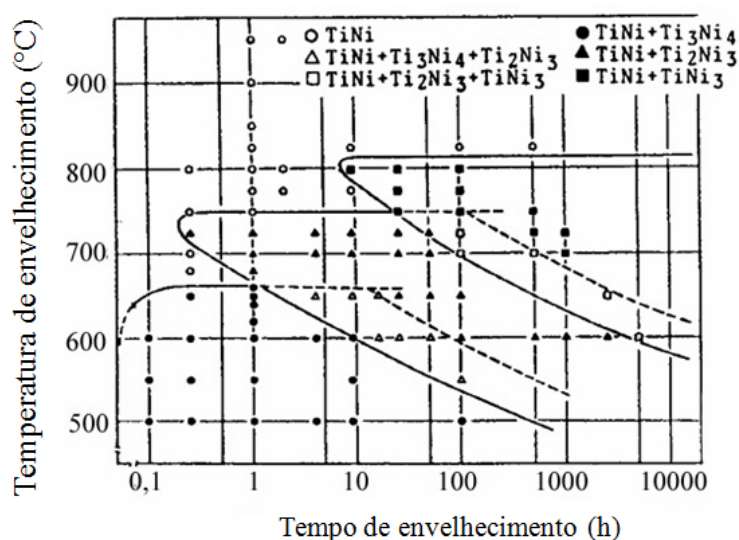


Figura 3.2: Curvas TTT de uma liga Ti-52Ni. Adaptado de Nishida *et al.* (1986).

Assim, para todos os três intervalos de envelhecimento, o produto final de decomposição é a mistura de TiNi_3 e TiNi . As fases Ti_3Ni_4 e Ti_2Ni_3 são fases metaestáveis que surgem na ordem de aumento do teor de níquel nas fases produto, como pode ser observado na Figura 3.2 (SABURI, 1998).

A fase TiNi , também chamada de fase β , possui uma estrutura cúbica do tipo B2 (CsCl), com um parâmetro de rede de 0,3015 nm em temperatura ambiente (Figura 3.3). Esta fase desempenha um papel fundamental na transformação martensítica e, conseqüentemente, no EMF, como será discutido posteriormente (PHILIP; BECK, 1957).

A fase TiNi_3 possui uma estrutura hexagonal do tipo DO_{24} , com parâmetros de rede $a = 0,51010$ nm, $c = 0,83067$ nm e $c/a = 1,6284$. A fase Ti_2Ni_3 possui estruturas cristalinas distintas dependendo da temperatura, já que é um composto que também sofre transformação martensítica. A fase de alta temperatura do composto Ti_2Ni_3 é tetragonal, grupo espacial I4/mmm , com parâmetros de rede $a = 0,3095$ nm e $c = 1,3585$ nm, enquanto a fase de baixa temperatura possui estrutura ortorrômbica, grupo espacial Bbmm , com parâmetros de rede $a = 0,4398$ nm, $b = 0,4370$ nm e $c = 1,3544$ nm (MUELLER; KNOTT, 1963).

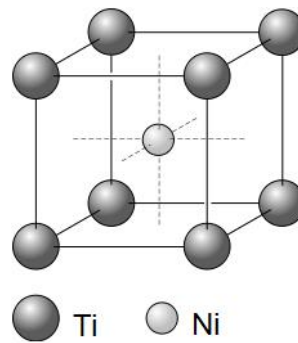


Figura 3.3: Representação da célula unitária da fase β : estrutura cúbica do tipo B2.

A fase Ti_3Ni_4 , possui uma estrutura romboédrica, com parâmetros de rede $a = 0,670 \text{ nm}$ e $\alpha = 113,8^\circ$ e grupo espacial R3, apresentando-se na forma de precipitados lenticulares na matriz da fase β . Esta estrutura deriva da matriz B2 através da substituição de átomos de Ti por Ni. Como consequência, formam-se precipitados coerentes com a matriz B2 (Figura 3.4), produzindo campos de tensão ao seu redor. Estes precipitados são gerados nos estágios iniciais do envelhecimento e desempenham um papel importante no EMF, endurecendo a matriz e melhorando a recuperabilidade da mesma. (SABURI, 1998).

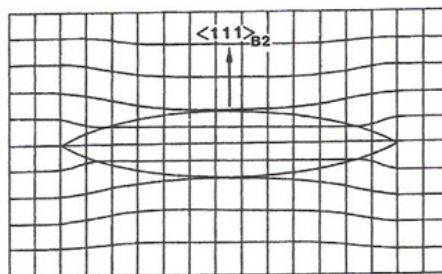


Figura 3.4: Representação esquemática da distorção de rede ocasionada pela precipitação de Ti_3Ni_4 (TADAKI *et al.*, 1986).

3.1.2 Transformação martensítica em ligas Ni-Ti

Como o EMF e a SE estão intimamente relacionados à transformação martensítica (TM), a compreensão desse tipo de transformação torna-se necessária. A TM é uma transformação de fase adifusional dos sólidos, onde os átomos se movem cooperativamente e, frequentemente, através de um mecanismo de cisalhamento. Usualmente, a fase de origem ou de alta temperatura (austenita) é cúbica e a fase de baixa temperatura (martensita) tem uma menor simetria. A TM é esquematicamente exibida na Figura 3.5. Quando um sólido é resfriado a uma temperatura abaixo de um valor

crítico, a TM inicia-se através de um mecanismo de cisalhamento, dando origem a uma região com uma nova estrutura cristalina. A essa região é dado o nome de variante de martensita. Uma vez que a martensita tem menor simetria, muitas variantes podem ser formadas a partir da fase de origem, apresentando a mesma estrutura entre si, porém, com diferentes orientações. Ao contrário do que acontece nos aços, a TM em LMF é usualmente termoelástica e reversível. Logo, se a temperatura for aumentada, levando à instabilidade da martensita formada, a transformação reversa (TR) irá ocorrer, havendo a reversão da martensita em austenita com a mesma orientação original (OTSUKA; WAYMAN, 1998).

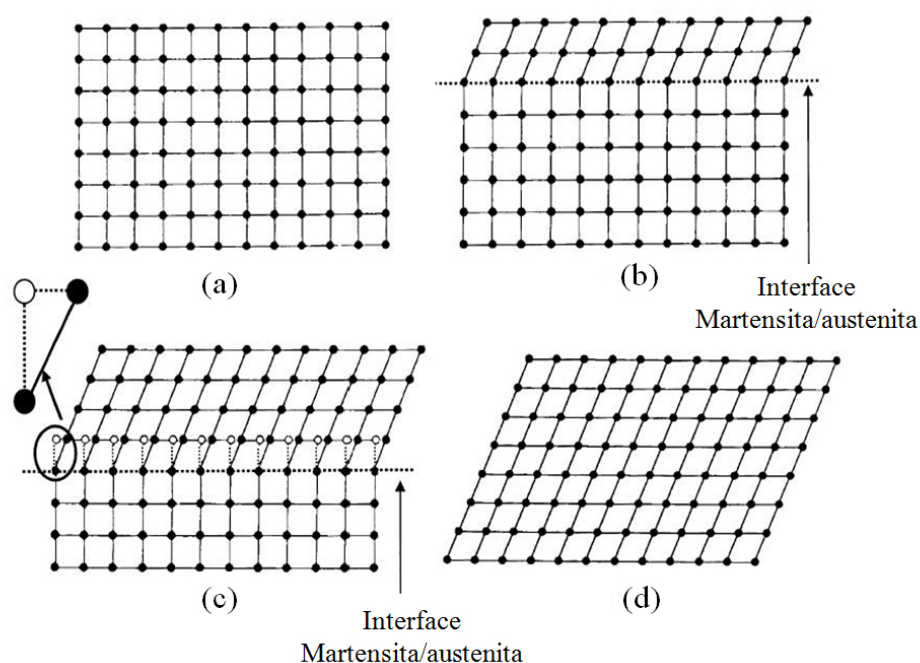


Figura 3.5: Transformação martensítica: (a) estrutura totalmente austenítica; (b) formação de uma variante de martensita separada da fase austenita por uma interface também conhecida como plano de hábito; (c) crescimento da variante de martensita; (d) estrutura totalmente martensítica. Adaptado de Wayman e Duerig (1990).

Segundo Otsuka e Ren (1999), a força motriz para a ocorrência da TM é a diferença de entropia entre as fases austenita e martensita. Sabe-se que um estado de baixa entropia é favorecido em baixas temperaturas e que um estado de alta entropia é favorecido em temperaturas mais elevadas. Além disso, a austenita possui entropia vibracional maior que a martensita. Logo, a transformação de um estado de alta entropia (austenita) para um estado de baixa entropia (martensita) ocorrerá em alguma temperatura.

Como a TM é uma transformação de primeira ordem, ela acontece por nucleação e crescimento. Além disso, a TM está associada a uma mudança de forma, mostrada na Figura 3.6(a), gerando uma zona de alta deformação ao redor da variante de martensita que está inserida na matriz de austenita. Para o processo de nucleação e crescimento, é muito importante que essa deformação gerada seja reduzida. Existem duas maneiras possíveis de redução dessa deformação: por escorregamento ou por maclação - Figura 3.6(b) e (c), respectivamente. Estes mecanismos de acomodação de deformação são conhecidos como deformações invariantes de rede, pois não resultam em qualquer alteração na estrutura cristalina da martensita. Seus efeitos formam a chamada subestrutura da martensita, caracterizada pela presença de deslocamentos no interior das variantes, quando a deformação invariante da rede ocorre por escorregamento, ou por falhas de empilhamento, quando o mecanismo de deformação invariante é a maclação. Independente do mecanismo de acomodação, a estrutura martensítica é mantida, mas a forma macroscópica do sólido permanece igual à original de estrutura austenítica. A maclação é um mecanismo de acomodação reversível, não envolvendo quebra de ligações, ao contrário do escorregamento. Logo, para que o EMF ocorra, é necessário que a acomodação seja totalmente reversível, tornando a maclação o principal mecanismo de acomodação para as LMF (WAYMAN; DUERIG, 1990; OTSUKA; WAYMAN, 1998).

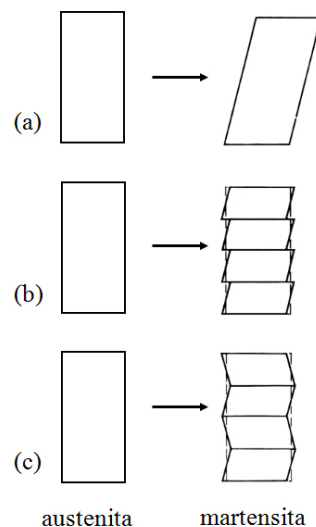


Figura 3.6: Representação esquemática dos tipos de deformação invariante de rede que ocorrem na transformação martensítica: (a) mudança de forma na transformação martensítica; (b) acomodação de deformações por escorregamento; (c) acomodação de deformações por maclação.

No processo de acomodação por maclação, são criadas regiões com configurações

energeticamente equivalentes e com diferentes orientações locais. Tais regiões são rotações e/ou imagens especulares umas das outras. Essas regiões possuem interfaces coerentes entre si, denominadas contornos de macla (Figura 3.7). Esses contornos são locais de energia relativamente baixa e, devido à coerência atômica, podem se mover com facilidade pela aplicação de tensão. A análise cristalográfica mostra que contornos entre variantes de martensita também se comportam como contornos de maclas, isto é, as próprias variantes individuais de martensita são maclas em relação às variantes adjacentes. Logo, o termo contorno de macla, pode se referir tanto aos contornos entre as maclas que formam a subestrutura da martensita quanto aos contornos de variantes. A existência de múltiplas variantes combinadas na forma de maclas se deve ao fato de que os mecanismos de deformação invariante de rede (maclação) não são suficientes para aliviar toda a deformação ocasionada pela TM. Assim, para eliminar a deformação global ocasionada pela TM, múltiplas variantes se combinam resultando no processo chamado auto-acomodação da martensita (OTSUKA; REN, 2005). A TM resulta em até 24 diferentes modos, com 24 diferentes planos de hábito, resultando na formação de variantes de martensita com até 24 orientações diferentes. Usualmente, durante a TM, duas ou quatro variantes são formadas lado a lado, no intuito de favorecer o processo de auto-acomodação da martensita (WAYMAN; DUERIG, 1990; OTSUKA; WAYMAN, 1998).

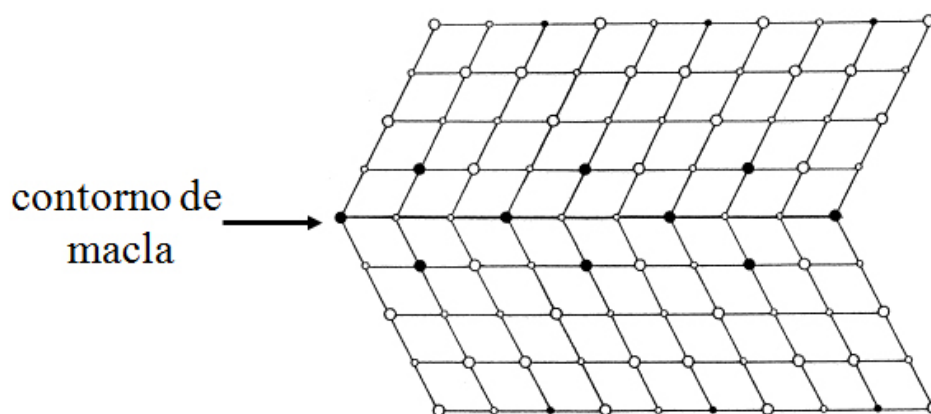


Figura 3.7: Representação esquemática de um contorno de macla.

A aplicação de uma tensão irá resultar na movimentação de contornos de variantes, promovendo o crescimento das variantes que estão favoravelmente orientadas em relação à direção de aplicação da tensão em detrimento das outras variantes menos favoravelmente orientadas nessa direção. A esse processo é dado o nome de reorientação da martensita. Concomitantemente, também ocorre a movimentação dos

contornos entre as maclas que formam a subestrutura da martensita, gerando o processo conhecido por demaclação (WAYMAN; DUERIG, 1990). Na Figura 3.8 estão ilustrados os processos de demaclação e reorientação da martensita, resultantes da aplicação de tensão.

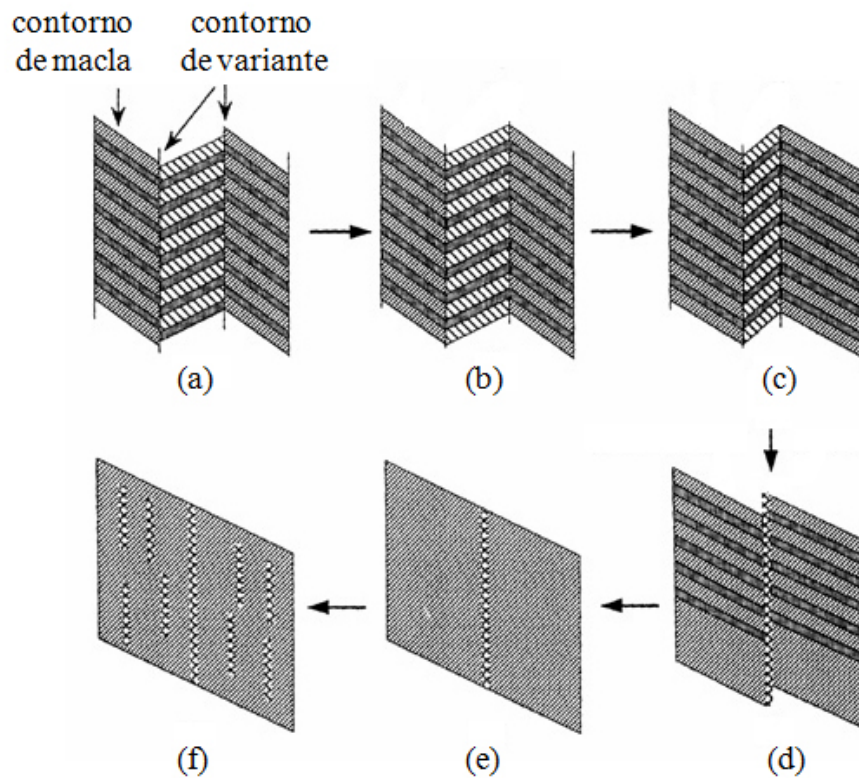


Figura 3.8: Representação esquemática dos processos decorrentes da aplicação de tensão na estrutura martensítica: (a) estado não deformado; (b) acomodação de maclas e formação de maclas compostas; (c) reorientação da martensita; (d) reorientação adicional e demaclação da martensita; (e) processo de demaclação; (f) geração de deslocamentos pela deformação adicional. Adaptado de Liu *et al.* (1999).

A TM não ocorre em uma temperatura única, mas em um intervalo de temperaturas que varia para cada liga. Na Figura 3.9 são mostradas as temperaturas de início e fim da TM durante o resfriamento, M_s e M_f respectivamente, e as temperaturas de início e fim da TR durante o aquecimento, A_s e A_f respectivamente. A histerese apresentada pelas transformações está associada ao atrito gerado pelo movimento dos contornos de macla e variantes, e pode ser interpretada como a energia dissipada pelo sistema durante o ciclo TM e TR. A magnitude dessa histerese varia de acordo com a liga, mas valores de 20 a 40 °C são muito comuns em LMF (WAYMAN; DUERIG, 1990).

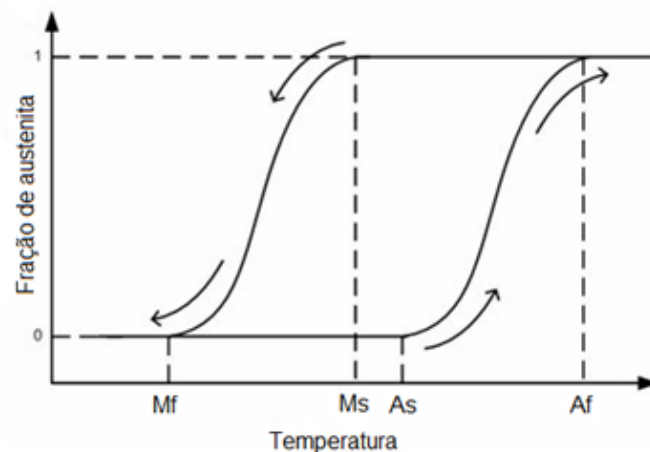


Figura 3.9: Temperaturas de início e fim da transformação martensítica e da transformação reversa.

Nas ligas Ni-Ti, de composição aproximadamente equiatômica, a austenita é a própria fase β , de estrutura B2, descrita anteriormente. Durante a TM, a fase β se transforma em martensita B19', que possui estrutura monoclinica e é pertencente ao grupo espacial $P2_1/m$. Os parâmetros de rede para uma liga Ti-49,2Ni são: $a = 0,2898$ nm, $b = 0,4108$ nm, $c = 0,4646$ nm e $\beta = 97,78^\circ$ e são dependentes da composição (OTSUKA; WAYMAN, 1998). A estrutura da fase B19' é mostrada na Figura 3.10.

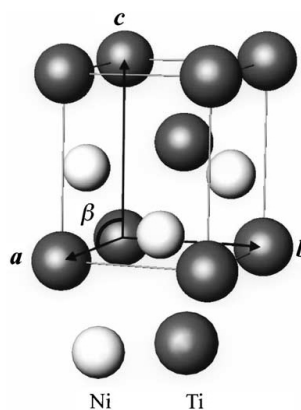


Figura 3.10: Representação da célula unitária da martensita B19' (OTSUKA; REN, 2005).

As temperaturas de transformação estão fortemente atreladas à composição química da liga. No caso das ligas Ni-Ti, um pequeno aumento no teor de níquel (menor que 1%) causa a diminuição das temperaturas de transformação (OTSUKA; REN, 2005). Em muitos casos, Af pode ser diminuída para valores abaixo da temperatura ambiente, obtendo-se uma estrutura austenítica em temperatura ambiente.

Em ligas Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica que passaram por recozimento pleno, a TM ocorre em uma etapa, $B2 \rightarrow B19'$. Entretanto, em ligas Ni-Ti que foram submetidas a tratamentos de envelhecimento, tratamentos termomecânicos ou ainda possuem em sua estrutura outros elementos de liga, a TM pode ocorrer em duas etapas, $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$, como mostram as curvas de calorimetria exploratória diferencial (DSC) na Figura 3.11. A curva superior mostra o resfriamento do material de aproximadamente 75 a -30°C . O primeiro pico apresenta uma transição exotérmica que representa a TM $B2 \rightarrow R$, entre as temperaturas de início e fim de formação da fase R, R_s e R_f respectivamente. O pico exotérmico seguinte representa a TM $R \rightarrow B19'$. A curva inferior apresenta um vale endotérmico, caracterizando a TR. A fase R possui estrutura trigonal e também é resultado de uma TM. A transformação $B2 \rightarrow R$ pode ser associada a diferentes fenômenos: geração de campos de tensão ao redor de precipitados coerentes Ti_3Ni_4 em ligas que passaram por tratamento de envelhecimento, campos de tensão ao redor de deslocamentos induzidas por tratamentos termomecânicos anteriores ou pela adição de ferro ou alumínio (SABURI, 1998; STRÓZ, 2002). A transformação $B2 \rightarrow R$ apresenta uma histerese muito pequena (aproximadamente $1,5^\circ\text{C}$) o que favorece a aplicação do material em atuadores térmicos (OTSUKA, 1990).

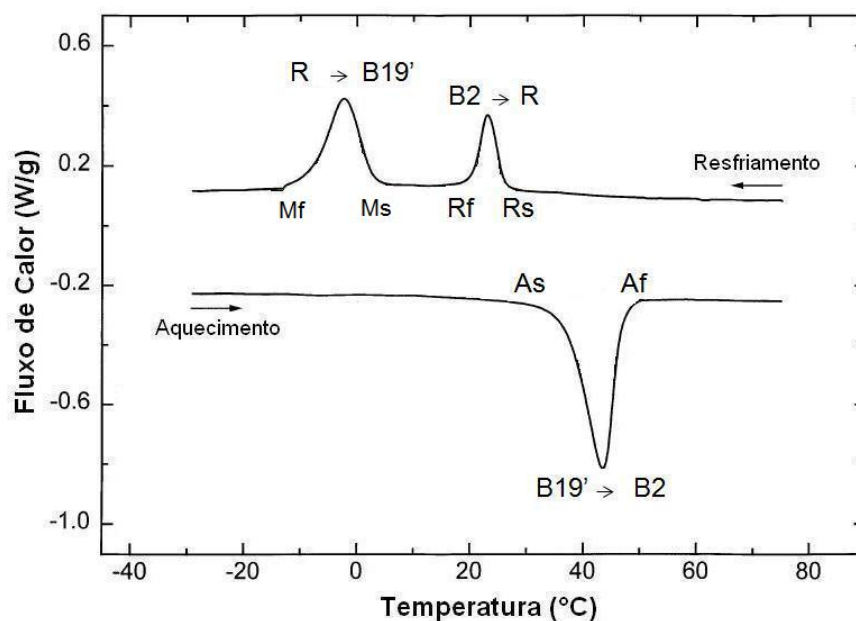


Figura 3.11: Curvas DSC de uma liga Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica.

A TM não ocorre somente pelo abaixamento da temperatura. A martensita também

pode ser formada em temperaturas acima de M_s (ou A_f) se uma tensão for aplicada, dando origem à chamada martensita induzida por tensão (MIT). Nestes níveis de temperatura, a MIT é estável somente sob aplicação tensão. Assim, com a retirada da carga, a martensita torna-se instável, promovendo a TR para a austenita mais estável nessas temperaturas. Neste caso, a energia cedida ao sistema para promover a TM não é mais térmica e sim mecânica. Ao contrário da TM induzida termicamente, onde variantes com diferentes orientações se auto-acomodavam, na TM induzida por tensão somente as variantes favoravelmente orientadas em relação à tensão irão crescer (OTSUKA; WAYMAN, 1998; AIROLDI *et al.*, 1998). Na Figura 3.12 é esquematizada a TM induzida por tensão.

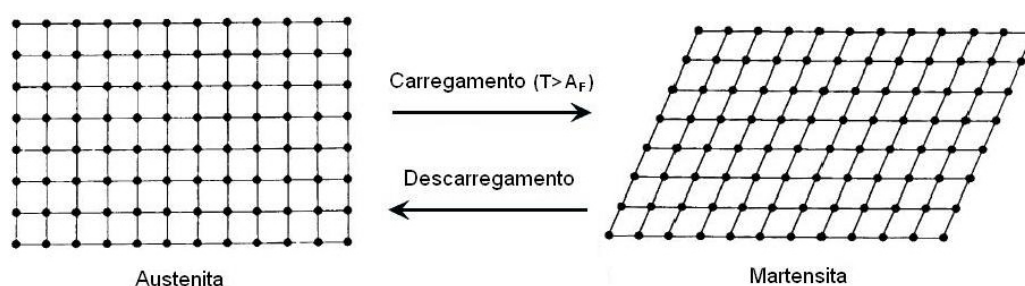


Figura 3.12: Representação esquemática da TM induzida por tensão.

Acima de M_s (ou A_f) a tensão crítica para a formação da martensita aumenta linearmente com o aumento da temperatura, uma vez que a austenita se torna cada vez mais estável. Esse aumento obedece a relação de Claucius-Clapeyron:

$$\frac{d\sigma}{dT} = -\frac{\Delta S}{\varepsilon} = -\frac{\Delta H}{\varepsilon T} \quad (3.1)$$

onde σ é a tensão uniaxial, T é a temperatura, ε é a deformação de transformação, ΔS é a entropia de transformação por unidade de volume e ΔH é a entalpia de transformação por unidade de volume (WAYMAN; DUERIG, 1990; OTSUKA, WAYMAN, 1998).

O aumento da tensão crítica para a formação da martensita acontece até uma temperatura limite, chamada de M_d . A partir dessa temperatura, a tensão crítica para a formação da martensita se torna maior que a tensão crítica para promover o escorregamento da austenita. Logo, acima de M_d não há formação de MIT e sim deformação plástica da austenita. A Figura 3.13 exhibe este comportamento em função do aumento da temperatura.

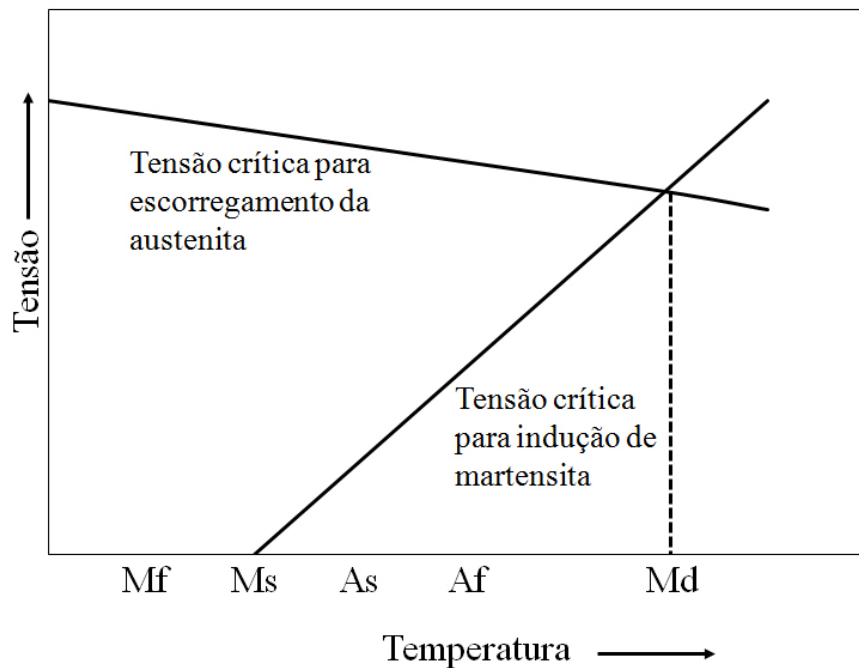


Figura 3.13: Relação entre tensão crítica para a formação da martensita, tensão crítica para o escorregamento da austenita e temperatura.

3.1.3 Efeito memória de forma e superelasticidade

Uma vez entendidos os fenômenos que permeiam a transformação martensítica em LMF, torna-se mais claro o entendimento do EMF e da SE.

O EMF, como definido anteriormente, é a recuperação de deformações pseudoplásticas na fase de baixa temperatura por meio da transformação reversa ocasionada pelo aquecimento acima de uma temperatura crítica. Assim, quando o material é deformado em temperaturas abaixo de M_f , ou em temperaturas entre M_f e A_s , é capaz de recuperar essa deformação por meio da TR que ocorre em decorrência de seu aquecimento acima de A_f . A deformação pode ser de qualquer natureza (tração, compressão, flexão, torção), desde que aconteça abaixo da deformação plástica da martensita reorientada. Caso a deformação plástica ocorra, a recuperação da deformação será incompleta. A Figura 3.14 exibe a representação esquemática do EMF. Como pode ser visto, a deformação da martensita ocorre através do mecanismo de reorientação/demaclação, e a recuperação da forma acontece por meio da TR da martensita deformada em austenita (OTSUKA; WAYMAN, 1998; OTSUKA; REN, 2005).

A SE, por sua vez, ocorre em temperaturas acima de A_f e abaixo de M_d . A alta

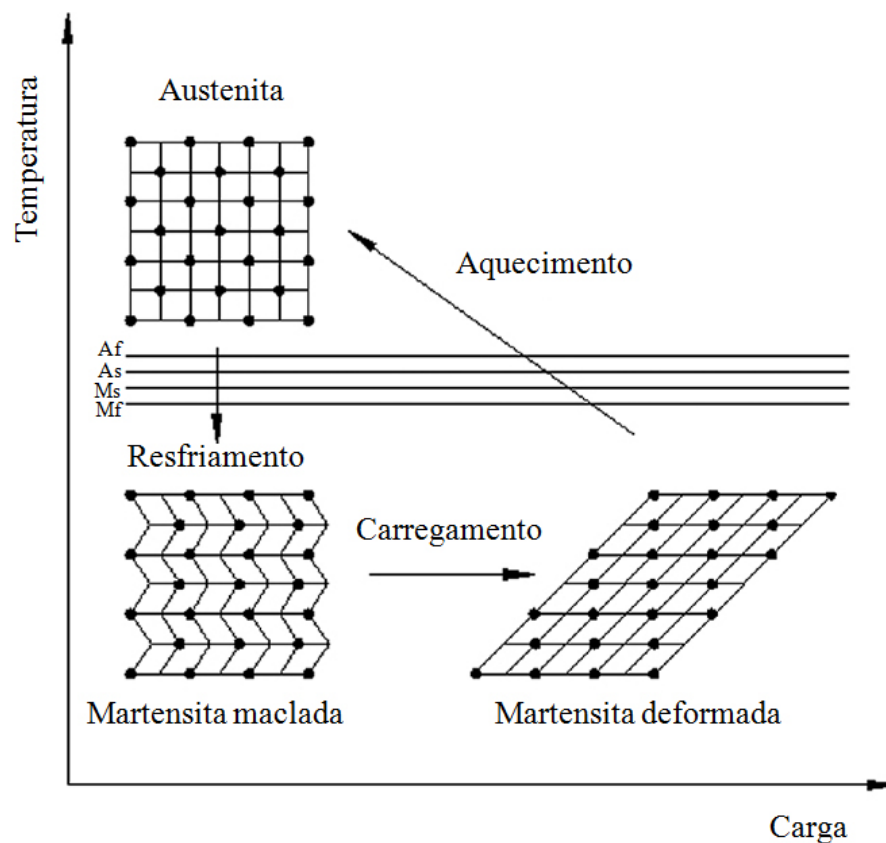


Figura 3.14: Representação esquemática do EMF.

deformação recuperável apresentada por materiais superelásticos é resultado da indução de martensita sob tensão que acontece nessa faixa de temperatura. Com a retirada da carga, a TR subsequente será percebida macroscopicamente através da recuperação da deformação. Em termos práticos, diz-se que um material é superelástico quando ele apresenta este comportamento em temperatura ambiente, ou seja, A_f está abaixo da temperatura ambiente.

3.1.4 Comportamento termomecânico das ligas Ni-Ti

O comportamento das ligas Ni-Ti em resposta à aplicação de uma tensão, segundo Miyazaki *et al.* (1981), está relacionado diretamente à temperatura de deformação (T_d). Assim, torna-se necessário o entendimento de três regimes importantes: deformação abaixo de M_f ($T_d < M_f$), deformação entre A_f e M_d ($A_f < T_d < M_d$) e deformação acima de M_d ($T_d > M_d$).

$$T_d < M_f$$

Neste caso, o material encontrar-se-á inicialmente com a estrutura da martensita maclada, composta por inúmeras variantes com diferentes orientações. Logo, a de-

formação ocorrerá por meio do movimento dos contornos de maclas e variantes (demaclação/reorientação), com o crescimento da variante melhor orientada em relação à tensão às expensas das outras variantes. Assim, o resultado será a martensita reorientada. Na Figura 3.15 é mostrada uma curva tensão-deformação para uma liga Ni-Ti abaixo de M_f .

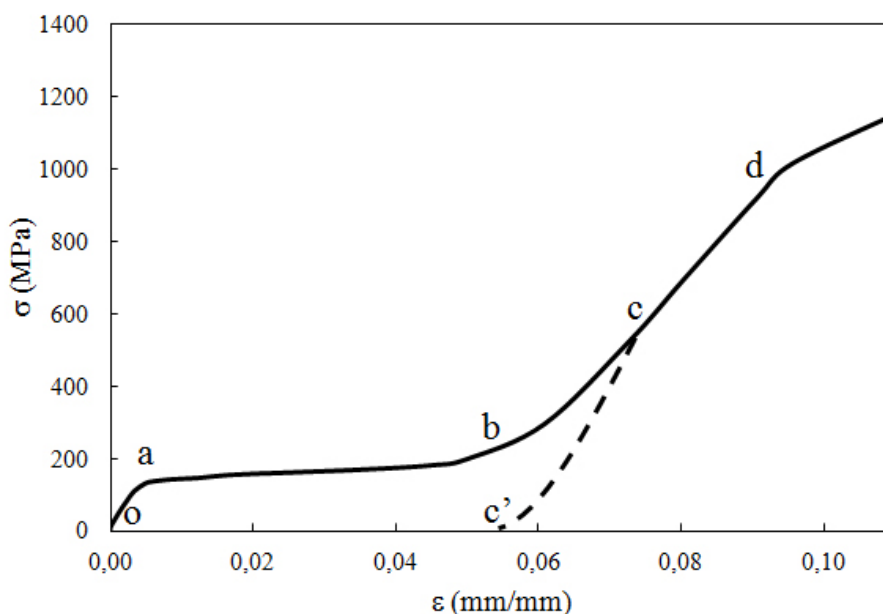


Figura 3.15: Curva tensão-deformação para uma liga Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica com estrutura martensítica.

Com a aplicação de tensão sobre a martensita maclada e auto-acomodada, inicialmente o material experimentará um regime de deformação elástica (o-a) até o início do patamar (a-b) de reorientação da martensita. É nesse patamar onde ocorre a demaclação e o crescimento da variante melhor orientada em relação à aplicação da tensão. Com o aumento da tensão, ocorre a reorientação de martensita maclada retida (que não foi reorientada no intervalo a-b) acompanhada de deformação elástica (b-d). Caso a carga seja removida nesse intervalo, como no caso do ponto c, o material apresentará uma deformação residual igual a o-c'. Porém, com o aumento da temperatura acima de A_f , toda a deformação é recuperada através da TR, ou seja, o EMF acontece. Com o aumento da tensão além do ponto d, a martensita será deformada plasticamente, sendo toda deformação imposta a partir desse ponto não reversível.

$$A_f < T_d < M_d$$

Neste caso o material apresenta-se com estrutura inicialmente austenítica, havendo a

formação MIT durante o carregamento. Na Figura 3.16 é exibida uma curva tensão-deformação para uma liga Ni-Ti neste intervalo de temperatura.

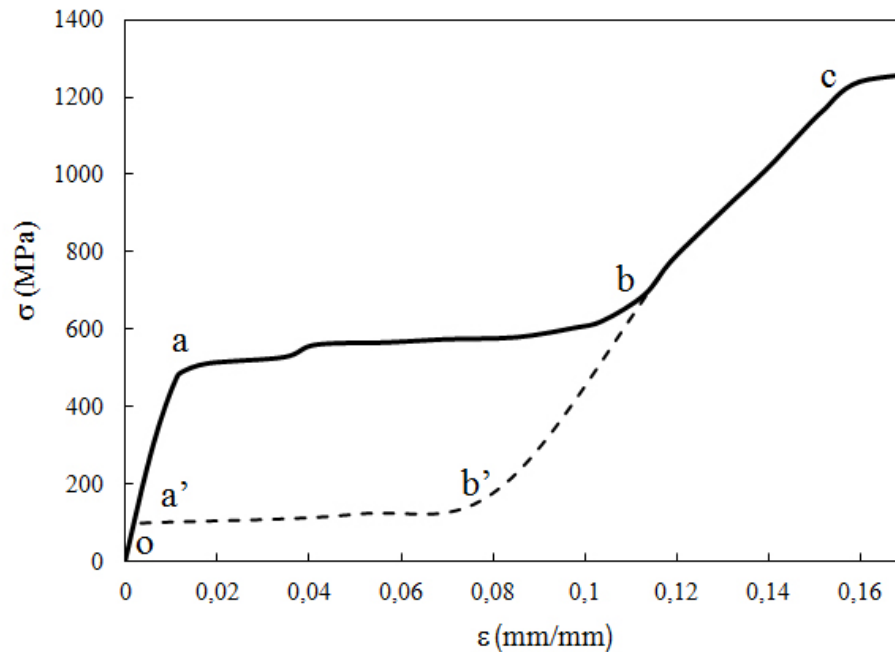


Figura 3.16: Curva tensão-deformação para uma liga Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica com estrutura inicialmente austenítica.

Primeiramente, a tensão causa somente a deformação elástica na austenita (o-a). O ponto a é denominado tensão crítica para a formação da martensita, e marca o momento onde a austenita se torna instável e a MIT começa a nuclear. Nota-se que a partir deste ponto um patamar característico (a-b), onde ocorre uma grande deformação e pouco ou nenhum acréscimo da tensão. Este patamar se deve à nucleação e crescimento das variantes de MIT. Para continuar a deformação além do ponto b, ocorre um acréscimo considerável na tensão aplicada. No intervalo b-c, é observada a deformação elástica da MIT juntamente com a transformação de eventual austenita residual em martensita. Após o ponto c, toda a deformação será de caráter plástico, ou seja, permanente. Porém, com a remoção da carga em qualquer ponto no intervalo a-c, a TR irá acontecer e o comportamento será semelhante àquele exibido pela linha tracejada entre b-a', exibindo também uma histerese. Com a remoção da carga, a MIT torna-se instável abaixo de um determinado valor de tensão (b'), com o patamar da TR representado pelo intervalo b'-a'.

Caso haja a presença de fase R, e a temperatura de deformação esteja entre R_f e

Ms, haverá um patamar de reorientação da fase R no intervalo o-a. Esse patamar representa uma deformação na ordem de 0,8% (OTSUKA; WAYMAN, 1998).

$Td > Md$

Como discutidos anteriormente, acima de Md não há a indução de martensita por tensão. Logo, o material apresentará um comportamento elasto-plástico característico de metais convencionais, como aquele exibido pela curva tensão-deformação da Figura 3.17.

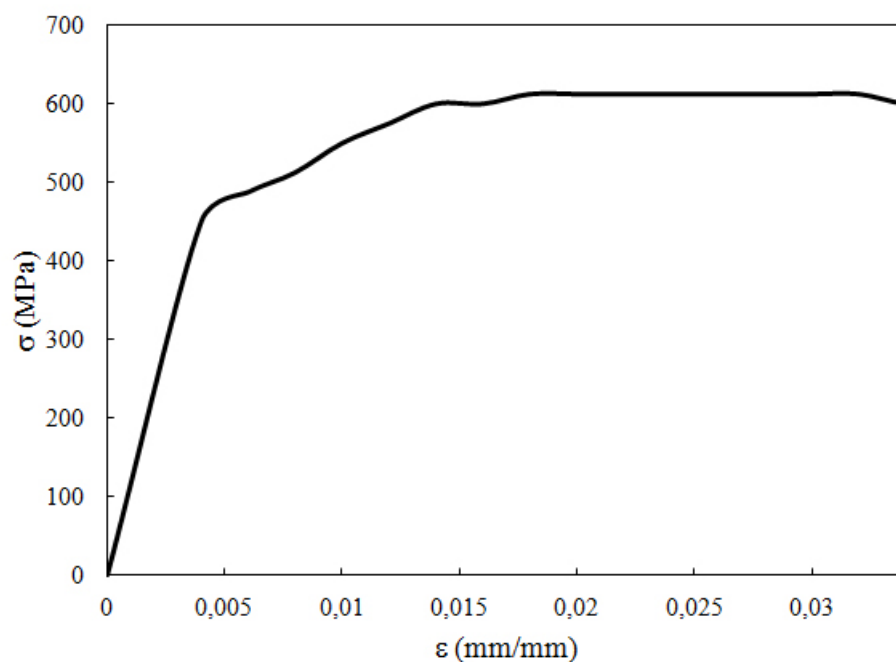


Figura 3.17: Curva tensão-deformação para um metal convencional apresentando comportamento elasto-plástico.

Algumas observações são pertinentes a partir desses três comportamentos discutidos. Quando o material encontra-se entre Ms e As, apresenta estrutura austenítica. Com a aplicação de tensão, ocorre a formação de MIT que, por ser estável nesse intervalo de temperatura, permanece após a retirada da carga. Caso a deformação ocorra em uma temperatura entre Mf e Ms, com variantes de martensita em uma matriz de austenita, tanto a formação de MIT estável quanto a reorientação de variantes de martensita já existentes irá ocorrer.

3.1.5 Efeito do tratamento termomecânico nas ligas Ni-Ti

Ligas com teor de níquel entre 50-50,5% são insensíveis a tratamentos térmicos pois não apresentam precipitação de Ti_3Ni_4 . Entretanto, essas ligas são sensíveis a tratamentos termomecânicos (recozimento abaixo de 500 °C após trabalho a frio). Os tratamentos termomecânicos são utilizados pois ligas Ni-Ti de composição aproximadamente equiatômica, quando passam por recozimento pleno, somente apresentam EMF e SE parciais. Ou seja, em uma temperatura acima de A_f , somente parte da deformação será recuperada após a remoção de uma carga aplicada. A deformação residual será produto da deformação plástica, resultado da movimentação de deslocações. Logo, o tratamento termomecânico apropriado aumenta a resistência à deformação plástica em relação ao material recristalizado, pois cria uma subestrutura de deslocações na austenita, aumentando assim a tensão necessária para promover o escorregamento. Dessa forma, o tratamento termomecânico aumenta M_d , permitindo que a deformação realizada abaixo de M_d seja totalmente reversível. O recozimento em temperaturas abaixo de 500 °C permite o alívio de tensões causado pelo trabalho a frio, sem destruir a subestrutura de deslocações gerada (SABURI, 1998).

3.2 Instrumentos endodônticos de Ni-Ti

A Endodontia é o ramo da odontologia que lida com o diagnóstico e tratamento de doenças da polpa dentária, estrutura interna do dente formada por tecido conjuntivo frouxo altamente vascularizado e innervado (Figura 3.18a). Um tratamento endodôntico consiste, de maneira simplificada, em remover-se todo o tecido afetado do interior do elemento dentário e, subsequentemente, obturar-se tridimensionalmente a cavidade formada (WALTON; TORABINEJAD, 2002). Um exemplo de tratamento endodôntico é mostrado na Figura 3.18b.

A etapa de limpeza e formatação de canais radiculares curvos e atresícos representa um problema considerável no tratamento endodôntico, pois erros inadvertidamente causados, como formação de degrau, desvio e transporte, podem ocorrer e alterar a morfologia do canal radicular assim como o prognóstico do caso. Entre outros fatores, o sucesso da terapia endodôntica depende da qualidade da preparação do canal radicular (PETTIETTE *et al.*, 2001).

Nas últimas décadas, houve um aprimoramento considerável dos instrumentos endodônticos, também conhecidos como *limas*, utilizados nesta etapa de formatação

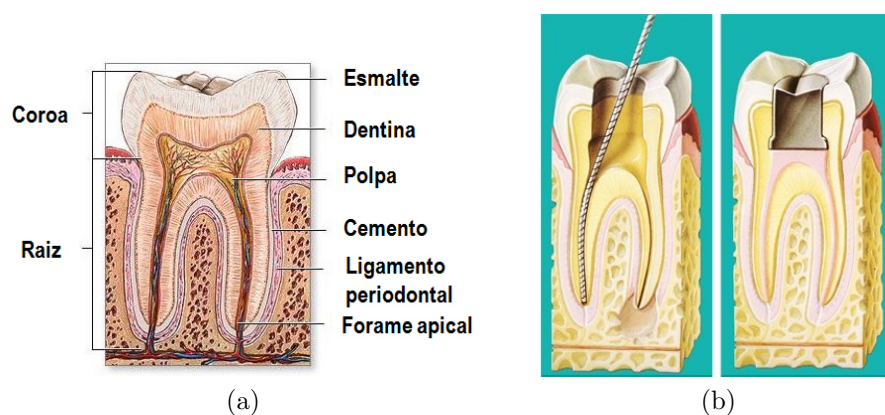


Figura 3.18: (a) Regiões anatômicas do canal radicular. (b) Etapas do tratamento endodôntico: um dente apresentando inflamação na região apical do canal radicular passa pela etapa de limpeza e formatação, onde o tecido inflamado é removido e o canal formatado com o auxílio de um instrumento endodôntico rotatório. Posteriormente, o canal formatado é obturado.

de canais. Inicialmente, as limas eram manufaturadas em aço inoxidável e usadas manualmente. Porém, com o advento das limas de Ni-Ti superelásticas na década de 1980, estabeleceu-se um novo padrão na prática clínica (WALIA *et al.*, 1988). As limas de Ni-Ti são mais flexíveis que aquelas de aço inoxidável. Além disso, as propriedades mecânicas favoráveis dessa liga permitiram novos desenhos de lâmina, sistemas de calibre e conicidade alternativos e a introdução de movimento rotatório acionado a motor, permitindo uma formatação do canal mais rápida, eficiente e com menos erros (GLOSSON *et al.*, 1995). Essas vantagens estão relacionadas diretamente à superelasticidade, propriedade presente nas ligas Ni-Ti que permite a recuperação quase total de grandes deformações.

Atualmente, existem diversos modelos de instrumentos endodônticos disponíveis comercialmente, com geometrias variáveis em termos de diâmetro da ponta, passo de rosca (chamado de *pitch*), conicidade (também chamado de *taper*), comprimento da parte ativa e comprimento total (Figura 3.19). O diâmetro de uma lima aumenta do valor do *taper* a cada milímetro percorrido desde a ponta. Por exemplo, em uma lima 25/.06, o diâmetro da ponta é 0,25 mm e o *taper* é 0,06 mm, ou seja, o diâmetro do instrumento aumenta 0,06 mm a cada milímetro de comprimento desde a ponta até a haste. A nomenclatura utilizada para classificar os instrumentos endodônticos, dessa forma, torna-se bastante importante por trazer informações geométricas a seu respeito. Além de todas as diferenças geométricas já discutidas, as limas disponíveis no mercado apresentam diversas geometrias de secção transversal (Figura 3.20). A disponibilidade de diferentes geometrias não se dá unicamente por questões merca-

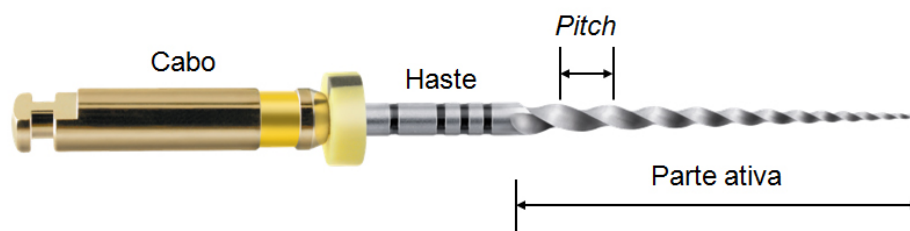


Figura 3.19: Geometria de um instrumento endodôntico rotatório modelo *ProTaper Universal F1* (Dentsply Maillefer, Ballaigues, Suíça).

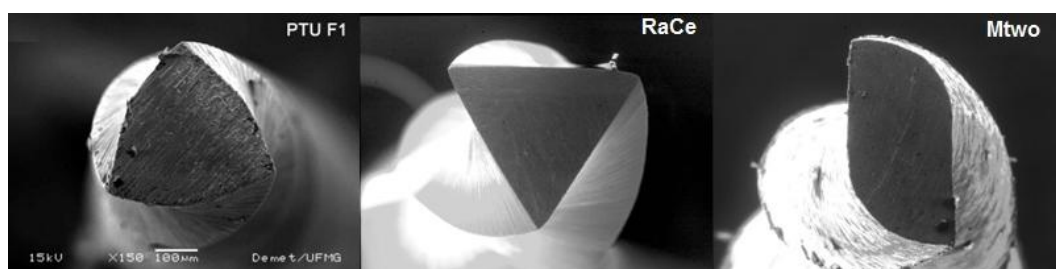


Figura 3.20: Imagens de seções transversais de diferentes instrumentos endodônticos obtidas por microscopia eletrônica de varredura. Respectivamente: lima *ProTaper Universal F1* (Dentsply Maillefer), lima *RaCe* (FKG) e lima *Mtwo* (VDW).

dológicas. A sequência de instrumentos mais utilizada é a denominada *crown-down*, onde limas curtas com maior diâmetro são usadas para limpar a região cervical do canal, progredindo-se para a formatação da região apical do canal com instrumentos de menor calibre (BIRD *et al.*, 2009). Durante este procedimento, a ponta guia o instrumento para o centro e no sentido apical do canal, enquanto as regiões da lâmina de corte fazem contato com as paredes dentinárias e realizam a formatação. Em geral, utiliza-se durante a formatação uma solução de hipoclorito de sódio para dissolver os tecidos e eliminar micro-organismos.

A fabricação de limas endodônticas de Ni-Ti é feita a partir de fios superelásticos e é mais complexa que a fabricação de seus equivalentes em aço inoxidável, devido à necessidade de usinagem (THOMPSON, 2000). A usinagem de limas de Ni-Ti é um procedimento complexo, resultando geralmente em superfícies com alta concentração de defeitos, além de bordas cortantes embotadas, comprometendo a capacidade de corte e facilitando a corrosão do instrumento (MELO *et al.*, 2002; MARTINS *et al.*, 2002).

Apesar de suas vantagens, os instrumentos endodônticos de Ni-Ti podem sofrer fratura em serviço, o que caracteriza uma preocupação clínica. A fratura de limas durante a instrumentação do canal pode acontecer devido a dois motivos principais:

torção e fadiga por flexão (CÂMARA *et al.*, 2009). A fratura por torção acontece quando a ponta do instrumento prende-se às paredes do canal enquanto sua haste continua a girar. Por sua vez, a fadiga por flexão acontece quando o instrumento é aplicado em canais curvos, sendo submetido a um excessivo número de ciclos de tração-compressão na região de curvatura máxima do canal devido à rotação do instrumento (PRUETT *et al.*, 1997; BAHIA *et al.*, 2005; CÂMARA *et al.*, 2009). O fenômeno de carregamento cíclico e conseqüente fadiga do material podem ser os fatores mais importantes na fratura dos instrumentos rotatórios de Ni-Ti (SERENE *et al.*, 1995; SOTOKAWA, 1998). Os níveis de tensão durante o carregamento cíclico são dependentes, principalmente, da geometria do instrumento e da curvatura do canal. Canais com curvatura abrupta, concentrada em um pequeno segmento da raiz, são os que representam maior desafio, principalmente quando se localizam próximos à região apical. Pruett *et al.* (1997) definiram a curvatura do canal radicular através de dois parâmetros: raio e ângulo de curvatura (Figura 3.21). O raio de curvatura é o raio de um círculo que coincide com o caminho tomado pelo canal na região de curvatura mais abrupta. O ângulo de curvatura é o arco formado entre os pontos de desvio sobre o círculo, ou o ângulo de intersecção formado entre as linhas traçadas a partir dos pontos de desvio até o centro da circunferência. Pruett *et al.* (1997) também afirmam que destes dois parâmetros, o raio de curvatura é o mais importante na determinação do número de ciclos até a fadiga dos instrumentos. Logo, quanto menor o raio de curvatura mais abrupto é o desvio do canal.

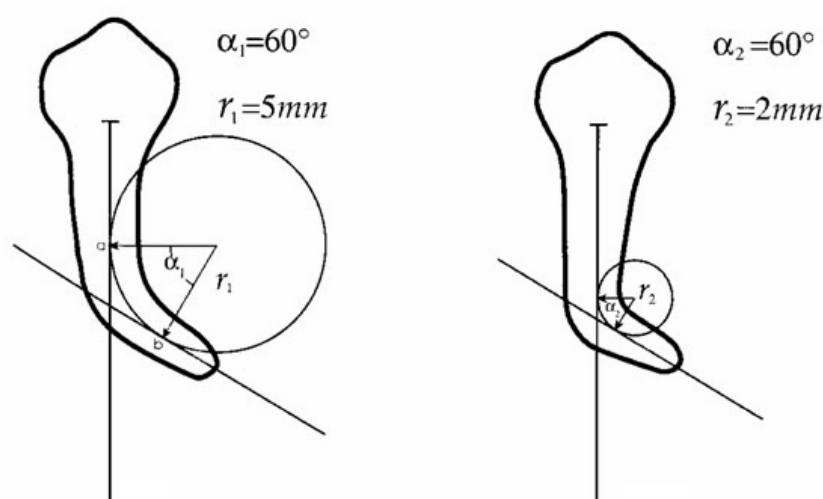


Figura 3.21: Raio e ângulo de curvatura descritos pelos parâmetros r e α (PRUETT *et al.*, 1997).

Em resumo, para a avaliação do comportamento mecânico dos instrumentos endodônticos de Ni-Ti em serviço é necessário o estudo destes instrumentos sob duas condições básicas de carregamento: flexão e torção. Existem especificações, como a ISO 3630-1, que estabelecem critérios para a realização de ensaios experimentais nas condições de carregamento requeridas e vários trabalhos experimentais (ZINELIS *et al.*, 2002; ULLMANN; PETERS, 2005; BAHIA *et al.*, 2005; MELO *et al.*, 2008; CÂMARA *et al.*, 2009; VIANA *et al.*, 2010) já foram publicados com base nestes ensaios.

3.3 Método dos elementos finitos

Para a solução de um problema de mecânica, tal como o comportamento de um corpo sob solicitações externas, escoamento de um fluido ou distribuição de temperaturas em um corpo, é necessário o desenvolvimento de uma descrição matemática do mesmo. Os modelos matemáticos simplificam os problemas, sendo válidos e aplicáveis dentro de determinados limites. Para problemas simples, os modelos matemáticos podem ser resolvidos de maneira analítica, utilizando métodos matemáticos apropriados.

Evidentemente, a maioria dos problemas de mecânica são muito complexos e não podem ser resolvidos analiticamente. Por exemplo, quando deseja-se analisar a distribuição de tensões em uma lima endodôntica de Ni-Ti que foi submetida a um carregamento, é necessário considerar a teoria da elasticidade, recaindo-se agora em um sistema de equações diferenciais que deve ser resolvido para cada ponto do corpo. Logo, a solução do problema será dada por uma função que assume um valor diferente para cada ponto da lima, tornando-o bastante complexo. A partir desse ponto, surge a necessidade de substituir o modelo contínuo por um modelo discreto, ou seja, não se procura mais uma solução em todos os infinitos pontos do corpo, mas apenas em um número pré-determinado de pontos. Dessa forma, com o auxílio de técnicas numéricas designadas métodos discretos, é possível transformar o problema inicial em um sistema de equações algébricas que podem ser resolvidas por computador.

Existem diversos métodos discretos disponíveis, como o método das diferenças finitas, método dos volumes finitos, método dos elementos de contorno e o método dos pontos finitos. Porém, o método dos elementos finitos (MEF), devido à sua grande versatilidade e capacidade de aplicação em quase todos os problemas, é o mais empregado como base para um grande número de programas comerciais para a análise

numérica de problemas de engenharia (como os programas ABAQUS e ANSYS). De acordo com Huebner e Thornton (1982), o MEF pode ser resumido em três etapas: pré-processamento, solução e pós-processamento.

Pré-processamento

É a etapa onde se prepara o problema, introduzindo-se as condições iniciais e de contorno, carregamentos, escolhe-se os elementos, propriedades dos materiais e onde são feitas simplificações para facilitar a análise. Nessa etapa é feita a discretização do modelo, onde o modelo contínuo é subdividido em um número equivalente de elementos finitos, os quais podem ser triângulos e quadriláteros para problemas em duas dimensões, ou tetraedros e hexaedros para problemas tridimensionais. Os elementos possuem nós, que podem ser internos ou externos, e estão interligados. O deslocamento desses nós são as incógnitas básicas do problema. De acordo com o tipo de elemento escolhido, existem funções de interpolação ou deslocamento associadas.

Solução

A solução se baseia num algoritmo numérico que objetiva solucionar eficientemente uma equação diferencial com todas as restrições (condições) impostas ao modelo durante o pré-processamento. Primeiramente, obtém-se a matriz de rigidez elementar, que relaciona os deslocamentos dos nós às forças aplicadas nos mesmos. Assim, a relação de equilíbrio entre a matriz de rigidez $[k]$, o vetor força $\{F\}$ e o vetor deslocamento $\{u\}$ é expressa como um conjunto de equações algébricas lineares simultâneas, $\{F\} = [k]\{u\}$. Essa matriz de rigidez depende da função de interpolação, da geometria do elemento e das propriedades locais do material. Uma matriz de rigidez global é realizada através das interconexões entre os nós. Em grande parte dos casos, os deslocamentos dos nós são as variáveis de estudo. Entretanto, em outras circunstâncias, outras variáveis como tensão e deformação devem ser calculadas. Em geral, tensão e deformação são proporcionais às derivadas dos deslocamentos.

Pós-processamento

Última etapa do método e depende das necessidades do engenheiro que está modelando o problema. Pode fornecer informações como deslocamento dos nós, deformações da geometria, gradientes de tensão, gradientes de temperatura, deslocamentos dos nós, entre outros.

No caso de uma análise de tensões utilizando o MEF, a incógnita principal do pro-

blema são os deslocamentos. Como dito antes, estes deslocamento podem ser relacionados a deformações e estas a tensões atuantes em cada ponto do corpo. As tensões são descritas de forma tensorial, ou seja, para cada ponto existe nove componentes de tensão atuando em três planos perpendiculares entre si. Cada plano possui duas componentes planares e uma normal. O estado de tensões e suas nove componentes também pode ser disposto na forma de uma matriz (Figura 3.22).

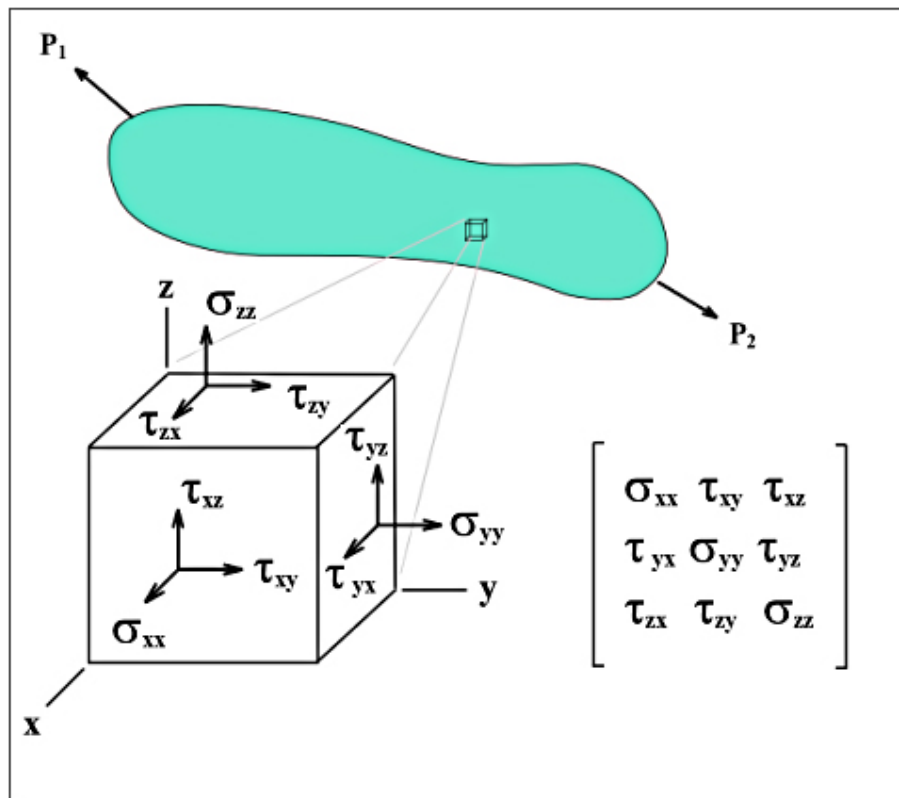


Figura 3.22: Estado de tensões em um ponto de um corpo submetido a um carregamento.

As tensões σ_{xx} , σ_{yy} e σ_{zz} são chamadas de tensões principais. Quando deseja-se analisar se um determinado estado de tensões pode levar um dado material a escoamento ou ruptura, lança-se mão de critérios para definir este estado de tensões. Um dos critérios mais utilizados em materiais metálicos é o critério de von Mises. Segundo este critério, pode-se relacionar a tensão em que ocorre a ruptura de um corpo de prova submetido à tração a uma tensão equivalente (σ_e) da seguinte maneira:

$$\sigma_e = \sqrt{\frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2}{2}} \quad (3.2)$$

sendo σ_1 , σ_2 e σ_3 as tensões principais daquele ponto. Assim, se um ponto do material

atingir uma tensão equivalente igual à tensão de escoamento desse material sob um ensaio de tração experimental, quer dizer que o material entrou em escoamento.

3.4 Estado da arte

Recentemente, alguns trabalhos sobre o uso do MEF na análise do comportamento de instrumentos endodônticos de Ni-Ti foram publicados. Esta seção tem como objetivos discutir, em termos gerais, aquilo que vem sendo estudado neste campo, apontando os avanços obtidos e as muitas possibilidades de melhoria e aprofundamento.

O primeiro trabalho publicado que utilizou o MEF no estudos das limas de Ni-Ti foi realizado por Berutti *et al.* (2003). Neste trabalho, os autores comparam as tensões em torção e flexão de dois instrumentos endodônticos, *ProTaper* e *ProFile* (fabricadas pela Dentsply Maillefer). Durante a simulação, os instrumentos eram engastados em uma extremidade e submetidos a momentos de torção ou flexão na outra extremidade. Os resultados mostraram que, sob iguais condições de carregamento, os instrumentos *ProTaper* apresentaram valores de tensão menores e melhor distribuídos quando comparados aos instrumentos *ProFile*. Entretanto, os modelos, tanto geométrico quanto constitutivo, foram aproximados. Não foi levado em consideração o *taper* dos instrumentos e o comportamento não linear da liga Ni-Ti foi aproximado através da implementação de uma curva tensão-deformação composta por três seguimentos lineares, sem a utilização de uma sub-rotina específica para materiais superelásticos.

Xu e Zheng (2006) estudaram a influência da secção transversal de diversas limas de Ni-Ti em seu comportamento mecânico através do MEF. Melhorando o modelo proposto por Berutti *et al.* (2003), um *taper* constante foi aplicado nos volumes gerados. As pontas dos instrumentos foram engastadas e os extremos livres foram submetidos a um torque. O comportamento superelástico do Ni-Ti também foi levado em consideração, utilizando-se uma curva padrão. Neste caso, o descarregamento foi ignorado. Os autores concluíram que diferentes secções transversais exercem uma grande influência sobre o comportamento mecânico dos instrumentos. Os instrumentos *ProTaper* e *Hero642* apresentaram os menores níveis de tensão e, conseqüentemente, mostraram-se como os mais resistentes à torção. Mesmo que este trabalho tenha mostrado melhorias em relação ao modelo proposto anteriormente por Berutti *et al.* (2003), ainda apresentou limitações referentes às condições de

contorno e carregamento, que não correspondem à qualquer norma de ensaio. A geometria dos instrumentos também apresentou muitas simplificações.

Zhang *et al.* (2010) também tinham como objetivo avaliar a influência de diferentes seções transversais no comportamento das limas sob torção e flexão. Assim, foram obtidos diversos modelos de limas com o auxílio de uma ferramenta do tipo CAD (*computer-aided design*). Os instrumentos foram submetidos a diferentes torques e deslocamentos lineares em sua ponta, enquanto a extremidade oposta permanecia engastada. Estas condições de carregamento são bastante distintas daquelas encontradas na prática ou em ensaios padronizados. Como esperado, foi concluído que a secção transversal tem grande influência no comportamento mecânico das limas, especialmente sob torção (com torques aplicados acima de 1 Nmm), onde alguns dos instrumentos alcançava valores de tensão suficientes para promover sua fratura. De forma geral, instrumentos com secções triangulares foram mais sujeitos a fratura em torção quando comparados aos instrumentos com outras geometrias de seções.

Além disso, Zhang *et al.* (2011) propuseram um modelo matemático para avaliar o comportamento das limas sob flexão e torção, levando em consideração parâmetros geométricos (*taper*, *pitch*, etc.) e condições de carregamento. Este modelo foi inserido no software ANSYS, para análises pelo MEF, obtendo-se bons resultados em termos de distribuição de tensões nas limas sob carregamento.

Kim, H. C. *et al.* (2008) compararam o comportamento de três modelos de limas distintos (*ProFile*, *ProTaper* e *ProTaper Universal*) em termos da tendência de sofrerem parafusamento, da distribuição de tensões durante o uso e das tensões residuais após o uso. Para tal, os autores obtiveram imagens de todas as limas por micro-TC e construíram modelos tridimensionais tanto das limas quanto de um canal com curvatura de 45°. Durante a simulação, as limas foram inseridas no canal e a distribuição de tensões foi avaliada. A rotação virtual do instrumento foi ajustada para um valor de 240 rpm. A tendência ao parafusamento foi considerada como a força que atua na lima na direção apical. Ao final das simulações, as tensões residuais nos instrumentos também foram examinadas. Os resultados mostraram que a lima *ProTaper* apresentou os maiores valores em termos de força na direção apical, ou seja, maior tendência ao parafusamento, e maior torque exercido nas paredes do canal. A magnitude geral das tensões durante a simulação foi maior para o instrumento *ProTaper* e menor para o instrumento *ProFile*. As tensões residuais também foram maiores para a lima *ProTaper*. Seus valores máximos foram encontrados na

região de máxima curvatura sofrida pela lima. Tais valores máximos de tensões residuais correspondiam a valores próximos da tensão de transformação martensítica (504 MPa), sendo um alto nível de tensão que pode levar a fratura do material quando submetido a ciclos de carregamento dessa natureza. Entretanto, os autores não esclarecem pontos importantes da realização da simulação no canal radicular, como as condições de contato entre parede do canal e superfície do instrumento. A ausência dessas informações não permite uma análise criteriosa dos resultados obtidos durante e após a simulação, como a magnitude das tensões residuais. Além disso, a tendência ao parafusamento medidas e discutidas pelos autores podem ser interpretadas como o esforço que os instrumentos estão exercendo na tentativa de retornar à sua forma original. A força resultante desse comportamento é exatamente na direção apical, considerada pelos autores como a tendência ao parafusamento. Uma discussão mais aprofundada só seria possível com um maior detalhamento das condições de simulação, mas com base nessa interpretação é possível afirmar que os instrumentos *ProTaper* apresentaram maior força da direção apical pois são mais resistentes à flexão.

Esses resultados são corroborados por Kim, T. O. *et al.* (2009), que submeteram os mesmos modelos de instrumentos endodônticos (*ProFile*, *ProTaper* e *ProTaper Universal*) a diferentes condições de flexão e torção. Neste trabalho, os autores constataram que devem ser aplicadas forças maiores aos instrumentos *ProTaper* para alcançarem níveis de deslocamento iguais aos instrumentos *ProFile* e *ProTaper Universal*, quando submetido à flexão. Assim, concluíram que a lima *ProTaper* possui maior resistência à flexão que a lima *ProFile*. Comportamento semelhante foi observado em torção, onde um mesmo torque aplicado aos diferentes instrumentos resultou em valores de tensões internas mais elevados para a lima *ProFile*, pois possui menor resistência à torção que as limas *ProTaper*. A resistência à flexão é proporcional ao segundo momento de inércia do instrumento, que é maior para os instrumentos *ProTaper*, bem como a resistência à torção que é proporcional ao momento de inércia polar, também maior para as limas *ProTaper* (TIMOSHENKO; GOODIER, 1970).

Paralelamente, Kim, H. C. *et al.* (2009) submeteram dois modelos de instrumentos com secções transversais baseadas na geometria triangular (*ProFile* e *HeroShaper*, fabricada pela Micromega) e dois modelos de instrumento com secções transversais baseadas em retângulos (*Mtwo*, fabricada pela VDW e *NRT*, fabricada pela MANI) às mesmas condições de flexão e torção descritas por Kim, T. O. *et al.* (2009). Os

modelos de instrumentos também foram inseridos em um modelo de canal radicular em condições iguais às descritas por Kim, H. C. *et al.* (2008). A comparação entre os comportamentos mostrou que os instrumentos *NRT* possuem a maior resistência à torção e à flexão, quando analisadas separadamente. Porém, durante a simulação no canal radicular, os instrumentos com secções de base retangular apresentaram as maiores magnitudes em termos de distribuição de tensões. Além disso, os instrumentos com secções de base retangular apresentaram os maiores níveis de tensão residual após a simulação. Esse comportamento dos instrumentos *NRT* e *Mtwo* indica que os mesmos são mais suscetíveis à fratura por fadiga durante a formatação do canal. Embora os resultados obtidos pelos autores sejam relevantes comparativamente, as condições de simulação no canal radicular (assumiu-se um canal rígido, baixo coeficiente de atrito) abrem margem à necessidade de melhoramentos na simulação dentro do canal radicular.

Lee *et al.* (2011) relacionaram resultados obtidos experimentalmente com resultados gerados pela simulação através do MEF para analisar o comportamento das limas em fadiga. Os autores submeteram diferentes dispositivos (*ProTaper Universal*, *HeroShaper*, *ProFile* e *Mtwo*) a ensaios de fadiga, em uma máquina que consistia em blocos de aço temperado contendo cavidades que se aproximavam da geometria de canais radiculares com diferentes ângulos de curvatura. As limas eram inseridas nesses canais e submetidas a movimento de rotação, sendo contabilizado o número de ciclos até a fratura. Estas informações foram traçadas com as magnitudes de distribuição de tensões e tensões residuais dos mesmos instrumentos calculadas através da simulação pelo MEF, em condições semelhantes às de ensaio. A principal conclusão foi a direta relação que há entre os maiores níveis de tensão durante a simulação, bem como maiores tensões residuais, e a vida em fadiga. O instrumento *ProTaper Universal* apresentou a menor vida em fadiga por ser o instrumento submetido aos maiores níveis de tensão durante a simulação e que apresentou os maiores níveis de tensões residuais por motivos já discutidos por Kim, H. C. *et al.* (2008) e Kim, T. O. *et al.* (2009).

Necchi *et al.* (2008) compararam o comportamento mecânico da lima *ProTaper* com o de um instrumento de aço inoxidável de mesma geometria. Ambos os instrumentos foram submetidos à simulação de ensaios rotativos dentro de canais com diferentes geometrias: ângulos de curvatura de 30° e 45°, posição da curvatura no meio do canal e na região apical, raio de curvatura de 2 e 5 mm. Os resultados obtidos revelaram que a diminuição do raio e o aumento do ângulo de curvatura

resultam em um aumento dos níveis de deformação e tensão. Estes resultados são confirmados por trabalhos experimentais realizados anteriormente, como Pruett *et al.* (1997), Haikel *et al.* (1999) e Li *et al.* (2002). Além disso, a posição da curvatura no meio do canal também aumenta esses níveis. Os autores ainda ressaltam que os níveis de tensão e deformação encontrados são mais severos para o instrumento de aço inoxidável e que o instrumento de Ni-Ti, ao final do processo, não apresentou deformação ou tensão residual. Isso vai contra os resultados encontrados por Kim, H. C. *et al.* (2008, 2009), que realizaram simulações com o mesmo instrumento e em condições semelhantes. Esta discordância de resultados evidencia a importância em se aprofundar o estudo do comportamento mecânico dos instrumentos endodônticos através do MEF. Outro ponto que carece de desenvolvimento é um estudo que inclua as condições de torção e contato com as paredes do canal, algo que também não foi considerado pelo trabalho de Necchi *et al.* (2008).

A comparação do comportamento mecânico de limas *ProTaper* de Ni-Ti com diferentes propriedades foi investigada por Petrini *et al.* (2009), em condições iguais às descritas por Necchi *et al.* (2008). Neste estudo os autores utilizaram três tipos de liga Ni-Ti, classificados como Ni-Ti “padrão” (caracterizado por possuir propriedades médias entre as ligas Ni-Ti encontradas na literatura), Ni-Ti “longo” (caracterizado por possuir um longo patamar de transformação) e o “super” Ni-Ti (liga que não apresenta patamar de transformação). A principal conclusão do estudo foi o melhor desempenho do instrumento de Ni-Ti que apresenta um longo patamar de transformação, pois foi o único que não apresentou deformação plástica da martensita em todas as situações.

Necchi *et al.* (2010) compararam o comportamento de uma lima *ProTaper* com o de uma lima *SystemGT* (fabricada pela Dentsply Maillefer) nas condições já descritas por Necchi *et al.* (2008). Os autores também aplicaram um torque de 2 Nmm durante a aplicação no canal modelado. Foi verificado que o sistema *ProTaper* apresenta as melhores propriedades em termos de torção, porém a lima *SystemGT* apresentou um comportamento melhor em flexão. Esses resultados confirmam aqueles obtidos por Kim, T. O. *et al.* (2009), apontando a lima *ProTaper* como mais resistente à torção e menos à flexão.

Outros autores também exploraram o efeito da geometria sobre o comportamento das limas de Ni-Ti sob flexão e torção. He e Ni (2010) estudaram a influência do *taper* durante a flexão e torção, concluindo que um *taper* maior aumenta a resistência

à torção mas também diminui a flexibilidade. Além disso, trabalhos complementares foram publicados (CHEVALIER, 2010; CHIRANI, 2011), com conclusões que corroboravam com os trabalhos discutidos anteriormente.

Recentemente Gao *et al.* (2011) estudaram o efeito da curvatura dos canais nas limas, através um modelo dinâmico onde foi variado o raio de curvatura e a posição da mesma, confirmando que curvaturas mais abruptas geram maiores níveis de tensão. O objetivo dos autores foi o de propor um modelo para avaliar o efeito dessas curvaturas em limas com diferentes geometrias. Montalvão e Alçada (2011) estudaram o efeito do uso do *M-Wire* (liga de Ni-Ti superelástica que passou por tratamentos termomecânicos especiais) para fabricação de limas através do MEF e verificaram uma redução considerável dos níveis de tensão sob flexão e torção. Por fim, Versluis *et al.* (2012) realizaram um longo levantamento da influência de diversos tamanhos de *pitch* e geometria da secção transversal sobre o comportamento mecânicos das limas, utilizando MEF.

De forma geral, todos os trabalhos que utilizam o MEF no estudo do comportamento da limas de Ni-Ti abordam duas principais frentes: a influência da geometria e a influência do material das limas. Porém, no que tange nosso conhecimento, nenhum trabalho publicado até o momento trouxe uma comparação direta entre os resultados numéricos e experimentais, o que possibilitaria a validação do modelo utilizado. Além disso, vários aspectos no tocante à geometria ou material utilizado nas limas ainda podem ser abordados, como o uso de Ni-Ti martensítico (com EMF) na confecção dos instrumentos *Hyflex* (Coltene-Whaledent, Allstetten, Suíça).

Capítulo 4

Simulações numéricas

4.1 Validação dos modelos numéricos

Em vista da necessidade de validação dos modelos numéricos utilizados, realizou-se a avaliação do comportamento mecânico pelo MEF de quatro tipos de lima sob flexão e torção, comparando-se com resultados experimentais. Os tipos de lima utilizados, comercialmente disponíveis, foram: *Mtwo 25/.06* (VDW, Munique, Alemanha), *RaCe 25/.06* (FKG Dentaire, La-Chaux-de-Fonds, Suíça), *ProTaper Universal (PTU) S2* e *F1* (Dentsply Maillefer, Ballaigues, Suíça). Todas as limas apresentam 25 mm de comprimento total (parte ativa mais haste), variando-se entre si o comprimento de *pitch*, *taper*, área e geometria da secção transversal. Todos os tipos foram fabricados em Ni-Ti superelástico.

A elaboração de um modelo de elementos finitos é constituída de muitas etapas e depende daquilo que se deseja avaliar. No caso do comportamento mecânico de instrumentos endodônticos comercialmente disponíveis, a primeira etapa do processo é a elaboração de um modelo geométrico acurado, que represente de forma fidedigna a geometria do instrumento e que esteja num formato aceito pelo programa computacional que será utilizado na análise numérica. Posteriormente, esse modelo será discretizado, ou seja, uma malha de elementos finitos será escolhida, com base em critérios bem definidos. A escolha criteriosa das condições de contorno e carregamento também faz parte do processo, bem como a escolha do modelo constitutivo do material, suas propriedades e o melhor modelo disponível que descreva essas propriedades. Todas estas etapas serão discutidas detalhadamente a seguir. Na Figura 4.1 é apresentado um resumo dos pontos mais importantes da elaboração do modelo de elementos finitos neste estudo.

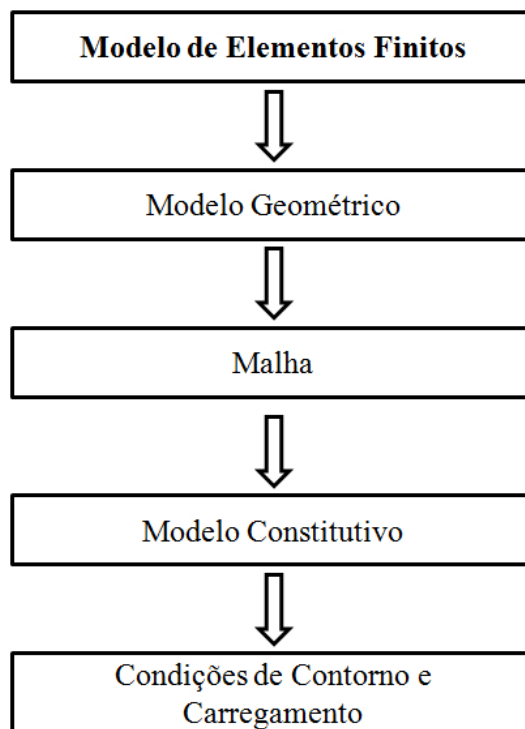


Figura 4.1: Etapas da elaboração do modelo de elementos finitos.

4.1.1 Elaboração dos modelos geométricos

Os modelos tridimensionais (3D) dos quatro tipos de limas utilizadas neste estudo foram obtidos através de microtomografia computadorizada (micro-CT), utilizando-se um micro-tomógrafo modelo *eXplore Locus SP* (GE Healthcare, Waukesha, WI, EUA). A micro-CT é uma técnica que reconstrói e modela interiores de amostras em escala micrométrica, obtendo-se informações sobre sua geometria tridimensional, através de projeções bidimensionais. Essa técnica tem como princípio básico a interação de radiação com a matéria. A geração de imagens de micro-CT inicia-se com a obtenção de projeções de raios X, que incidem sobre a amostra, coletadas por um detector. A amostra ou a fonte (dependendo do equipamento) é rotacionada em intervalos estabelecidos, e a projeção é capturada pelo detector a cada incremento. No caso de um instrumento endodôntico, o resultado são diversas imagens da secção transversal desse instrumento, desde a ponta até a haste. A varredura foi realizada em intervalos de $2 \mu\text{m}$ e as imagens salvas no formato Dicom (*digital imaging and communications in medicine standard*). Por fim, para cada lima, um montante de aproximadamente 1.200 imagens das secções transversais foram coletadas. As imagens no formato Dicom foram exportadas para um programa de reconstrução digital (Mimics, Materialise HQ, Leuven, Bélgica) com o objetivo de obter um modelo 3D a partir das imagens de micro-CT. O modelo 3D resultante foi salvo no formato STL

(*stereolithography*, 3D Systems, Rock Hill, EUA). Na Figura 4.2 é mostrada uma ilustração do processo de varredura por micro-CT e a obtenção de um modelo 3D para a lima *PTU F1*.

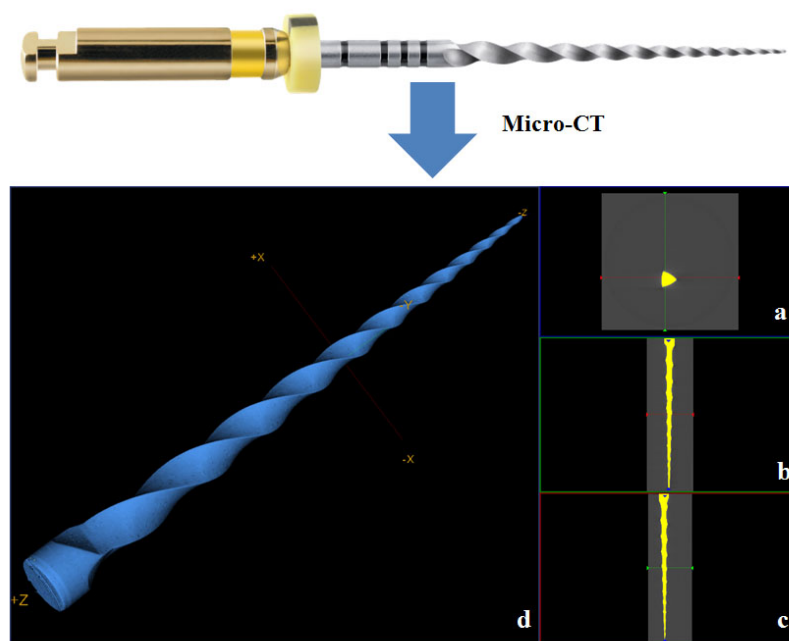


Figura 4.2: Obtenção de um modelo geométrico por micro-CT da lima *PTU F1*: (a) secção transversal; (b) e (c) vistas laterais; (d) modelo 3D resultante.

Após a reconstrução das imagens e obtenção de um modelo 3D para cada tipo de lima, partiu-se para a etapa de edição do modelo 3D. Essa etapa foi necessária pois, como pode ser observado na Figura 4.2, somente a parte ativa da lima foi varrida pela micro-CT, dada à sua complexidade geométrica - motivo pelo qual a técnica micro-CT foi escolhida - necessitando-se a inserção virtual da haste dos instrumentos. Para tal, utilizou-se um programa do tipo CAD, SolidWorks 2009 (*three-dimensional computer-aided design software*, Concord, MA, EUA). Programas de reconstrução de imagens, como o Mimics, geram modelos 3D que são constituídos por uma malha de polífaces de superfície. Essas polífaces são exclusivamente triangulares e planas, sendo, em muitos casos, necessárias milhares de polífaces para definir um sólido. Porém, a maioria dos programas do tipo CAD não aceita a importação de modelos com mais de dez mil faces. Assim, utilizou-se um suplemento de importação do Solidworks, chamado *scan to 3D*. Este suplemento permite a transformação das polífaces em superfícies do tipo NURBS (*non uniform rational basis splines*) para a geração de modelos sólidos. Essas superfícies possuem a capacidade de serem curvas e se adequarem aos detalhes geométricos do sólido. Assim, permite-se a redução

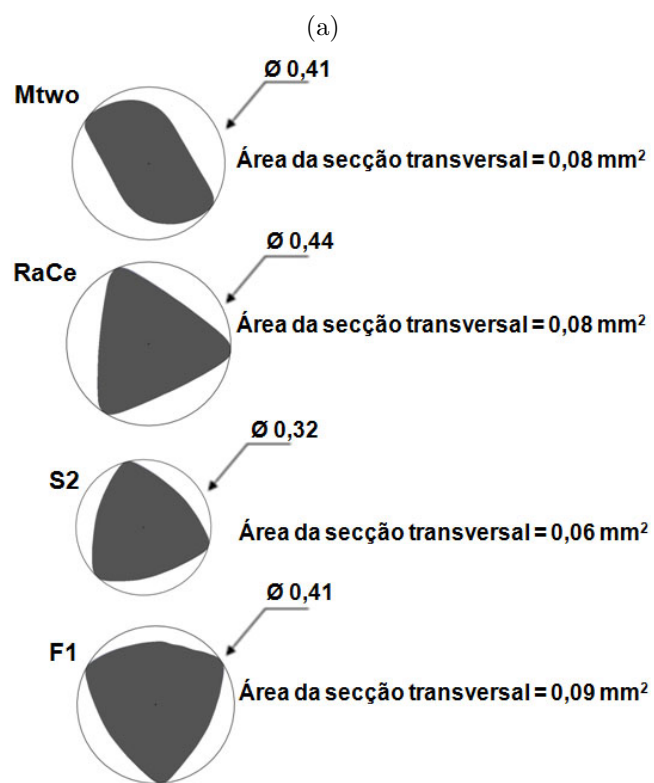
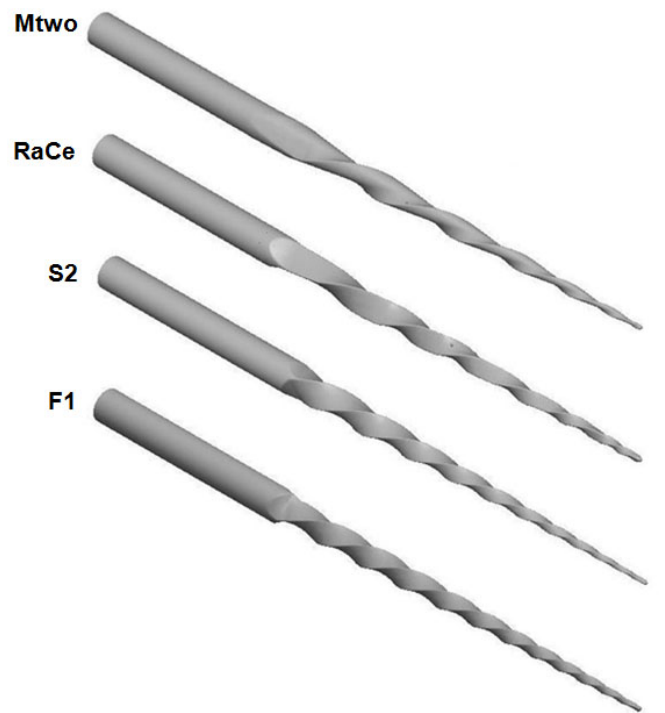
do número de superfícies que constitui o modelo 3D, sem perda considerável da precisão geométrica. Na Figura 4.3a são exibidos os modelos geométricos finais, para cada tipo de lima. Na Figura 4.3b as secções transversais de cada lima podem ser apreciadas, juntamente com informações dimensionais importantes ao entendimento dos resultados.

4.1.2 Elaboração das malhas

Uma vez editados os modelos no Solidworks, os mesmos foram exportados no formato IGES (*Initial Graphics Exchange Specification*) e importado para o programa ABAQUS 6.9-1 (Simulia, Providence, RI, EUA) onde os modelos foram malhados. A malha escolhida consistia de elementos tetraédricos quadráticos de dez nós (tipo C3D10M). Ao final, os modelos eram constituídos de malhas com 48.460 elementos para *Mtwo*, 55.009 elementos para *RaCe*, 50.350 elementos para *PTU S2* e 51.184 elementos para *PTU F1*. Na Figura 4.4 são mostradas as malhas resultantes.

O número de elementos, que é inversamente proporcional ao tamanho dos mesmos, foram resultados de testes de convergência de malha. Estes testes são realizados para que se escolha uma malha que permita a obtenção de resultados acurados e com um mínimo de tempo computacional. Por exemplo, uma malha com poucos elementos (elementos grandes) pode permitir um cálculo com um mínimo de tempo de processamento, porém, os resultados serão menos confiáveis quando comparados com os resultados obtidos com uma malha mais fina (elementos menores e mais numerosos). Em contrapartida, uma malha mais fina exige um tempo maior de processamento. O balanço entre estes dois parâmetros é importante, pois se deseja obter o resultado mais acurado possível, sem tornar o tempo de processamento longo o suficiente para tornar a análise inviável. Os testes de convergência foram realizados no modelo *PTU F1*, consistindo em engastar a limas a 3 mm da ponta e flexionar sua outra extremidade até 45° , medindo-se a força necessária para executar este deslocamento. Essas condições de contorno serão discutidas com maior detalhe adiante. Os resultados dos testes podem ser apreciados na Figura 4.5. Com base no valor de força obtido e tempo de processamento, escolheu-se a malha com 51.184 elementos. Embora a malha com 215.472 elementos tenha apresentado um valor de força levemente superior, o elevado tempo de processamento não justificava a sua utilização.

Deve-se levar em consideração que o mesmo tamanho de elementos foi adotado para os outros instrumentos, com base no resultado dos testes realizados apenas para a lima *PTU F1*. Esta é uma das simplificações utilizadas nestes modelos, levando em



(b)

Figura 4.3: (a) Modelos 3D. (b) Secções transversais a 3 mm da ponta.

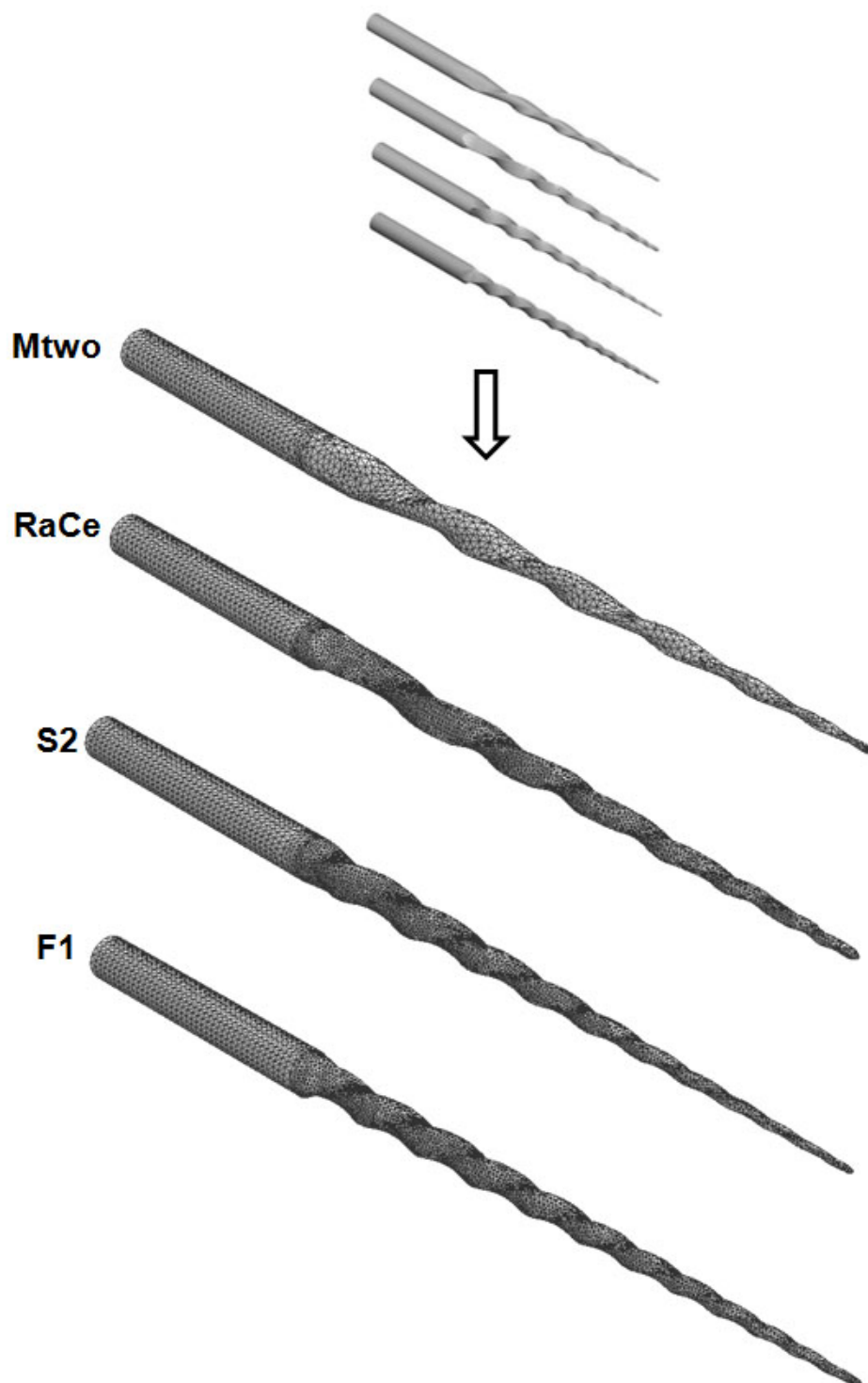


Figura 4.4: Malhas.

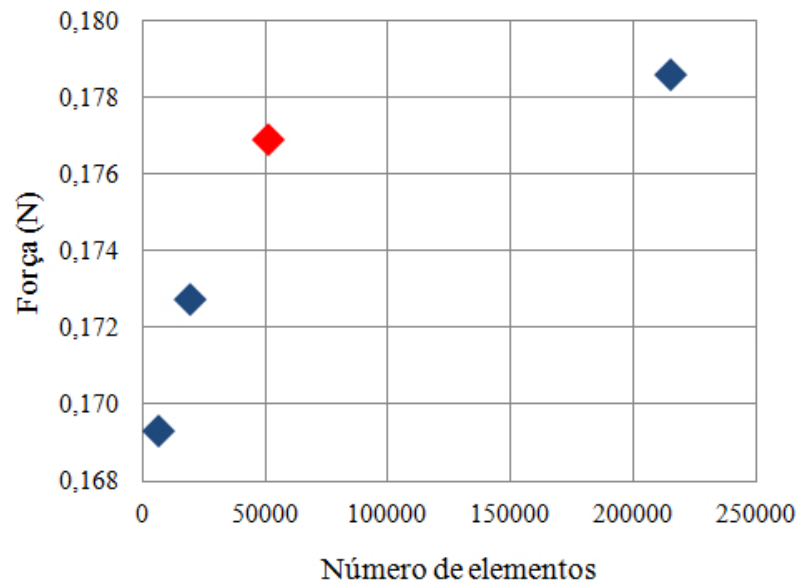


Figura 4.5: Teste de convergência: o ponto em vermelho marca o número de elementos que foi utilizado para o modelo *PTU F1*.

conta que todos os instrumentos possuem dimensões da mesma ordem.

4.1.3 Modelo constitutivo

Auricchio e Petrini (2004) desenvolveram uma sub-rotina implementada em ABAQUS na forma de uma UMAT (*user material subroutine*) para a simulação de materiais superelásticos. Essa sub-rotina é descrita por um modelo matemático que utiliza determinados parâmetros para descrever o comportamento do material submetido a um ciclo de carregamento e descarregamento. Estes parâmetros podem ser visualizados diretamente sobre um diagrama tensão-deformação e um diagrama tensão-temperatura (Figura 4.6).

Uma vez que uma sub-rotina foi implementada comercialmente para descrever o material em questão, realizou-se a validação dessa sub-rotina para verificar a acuracidade da mesma. Essa validação consistiu em simular-se o comportamento de uma viga com secção retangular submetida à tração, fazendo uso de parâmetros próprios da liga Ni-Ti superelástica a ser estudada. Todos os parâmetros utilizados deste trabalho foram extraídos de ensaios de tração em fios de Ni-Ti superelásticos, realizados no Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da UFMG, e são exibidos na Tabela 4.1. Os parâmetros geométricos da viga são mostrados na 4.2

Na Figura 4.7a são mostradas as condições de contorno utilizadas na simulação para

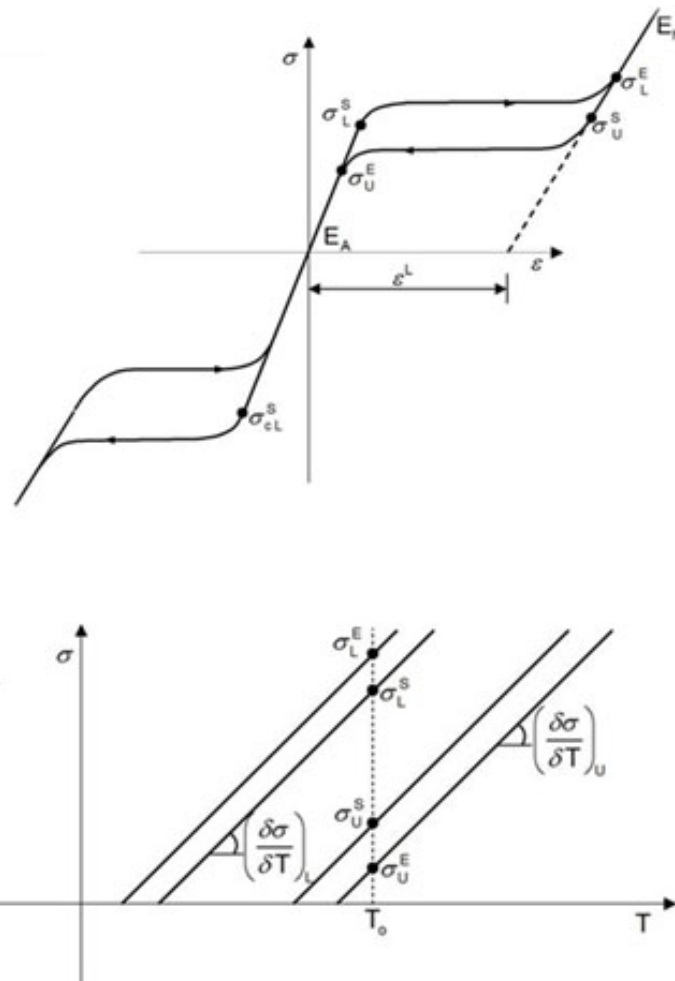


Figura 4.6: Parâmetros necessários para o uso da UMAT para materiais superelásticos (ABAQUS, 2004).

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados no modelo constitutivo.

Parâmetros	Descrição	Valor
E_A	módulo de elasticidade da austenita	42.530 MPa
ν_A	razão de poisson da austenita	0,33
E_M	módulo de elasticidade da martensita	12.828 MPa
ν_M	razão de poisson da martensita	0,33
ε^L	deformação durante a TM	10%
$(\frac{\delta\sigma}{\delta T})_L$	$\frac{\delta\sigma}{\delta T}$ no carregamento	6,7
σ_L^S	início da TM	492 MPa
σ_L^E	fim da TM	630 MPa
T_0	temperatura de referência	22 °C
$(\frac{\delta\sigma}{\delta T})_U$	$\frac{\delta\sigma}{\delta T}$ no descarregamento	6,7
σ_U^S	início da TR	192 MPa
σ_U^E	fim da TR	97 MPa
σ_{CL}^S	início da TM durante compressão	-

Tabela 4.2: Parâmetros geométricos da viga.

comprimento	10 mm
secção transversal	0,5 mm x 1,0 mm

validação da UMAT. A viga foi engastada em uma das extremidades e foi aplicado um deslocamento no sentido do eixo longitudinal (eixo z) na outra extremidade. Na Figura 4.7b é mostrada a distribuição de tensões de von Mises sobre a viga quando tracionada 14%.

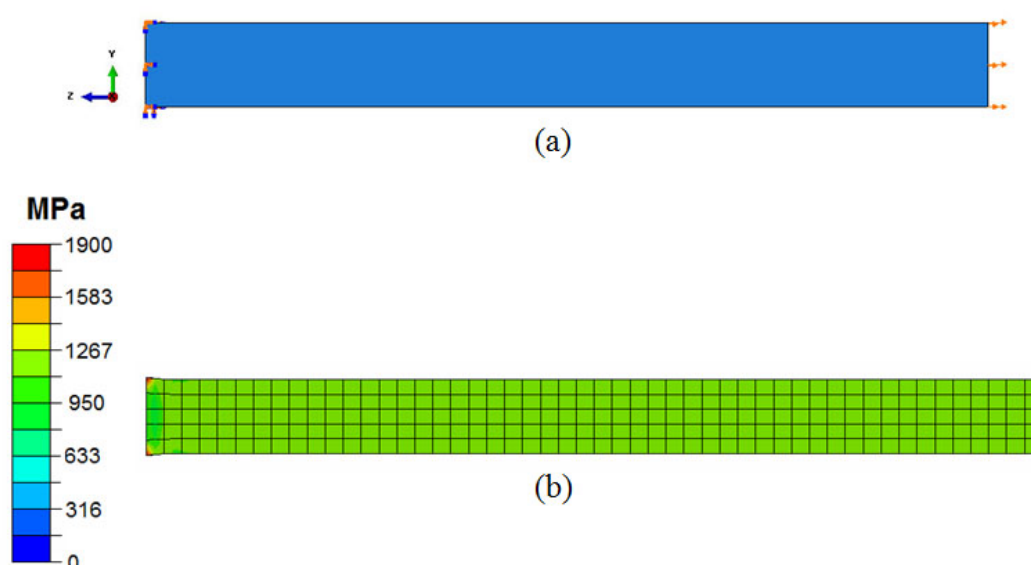
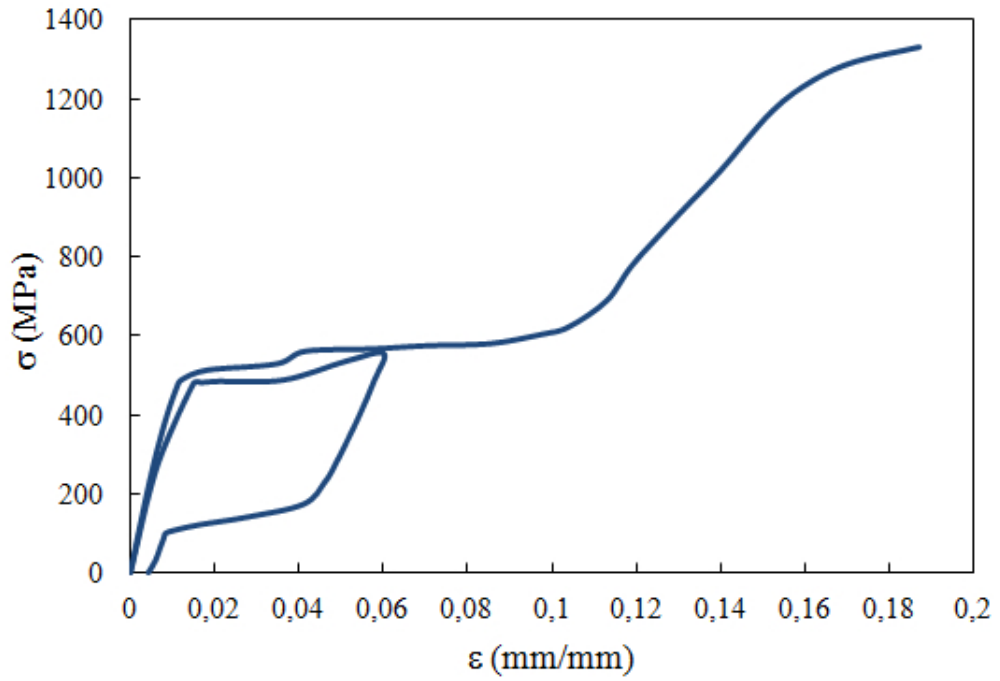


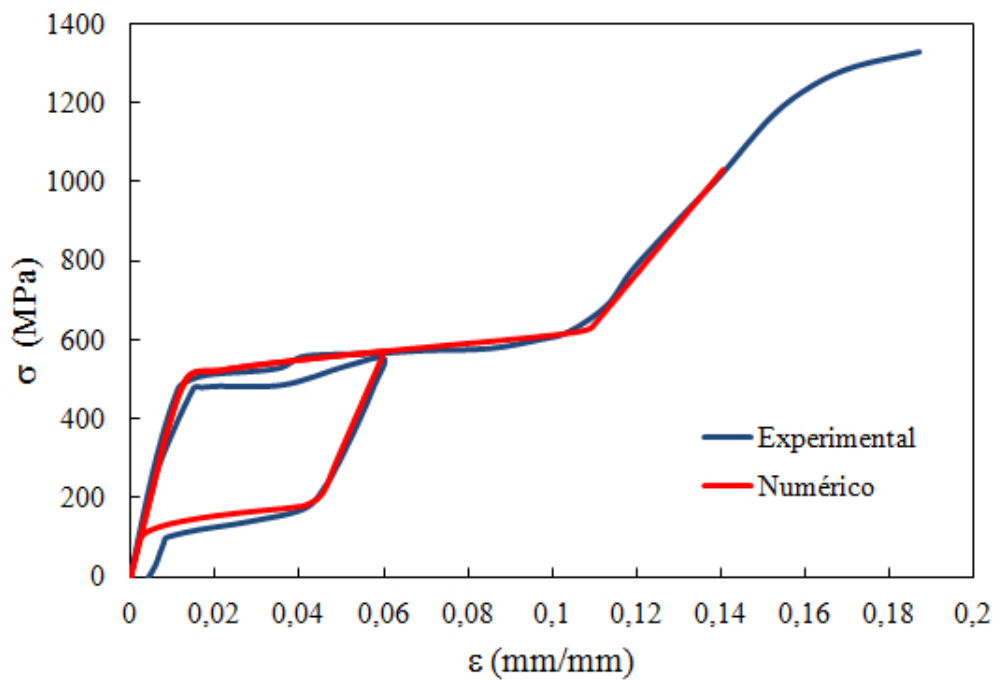
Figura 4.7: (a) Condições de contorno e carregamento. (b) Distribuição de tensões de von Mises para a viga tracionada em 14%.

A simulação foi realizada em duas etapas. Primeiramente, aplicou-se um deslocamento de 14%, valor próximo ao fim do regime elástico da MIT e obteve-se a curva tensão-deformação calculada. Em um segundo cálculo, aplicou-se um deslocamento de 6% seguido da remoção do mesmo e obteve-se uma segunda curva tensão-deformação. Os resultados são exibidos na Figura 4.8. Na Figura 4.8a podem ser vistas as duas curvas experimentais de onde foram retirados os parâmetros utilizados para descrever o material. Na Figura 4.8b é exibido o ajuste entre as curvas experimentais e as curvas calculadas através da simulação. Nota-se que um ajuste bastante satisfatório entre experimental e simulado, confirmando a acuracidade da UMAT e permitindo o uso confiável da mesma.

Algumas considerações devem ser feitas com relação ao uso da sub-rotina para materiais superelásticos. O valor de σ_{CL}^S somente é utilizado em análises onde o material



(a)



(b)

Figura 4.8: (a) Curvas experimentais. (b) Ajuste numérico.

é submetido a altos níveis de deformação compressiva, o que não se aplica neste estudo. O valor de $(\frac{\delta\sigma}{\delta T})_L$ foi escolhido com base em trabalhos anteriores (REBELO *et al.*, 2004). Além disso, a sub-rotina de superelásticos não descreve o comportamento plástico da martensita. Diante desta limitação, os resultados obtidos com o uso desta UMAT somente podem ser considerados quando tensão e deformação estiverem abaixo do regime plástico da MIT.

4.1.4 Condições de contorno e carregamento

As condições de contorno e carregamento foram escolhidas com base em ensaios experimentais que visam a avaliação do comportamento dos instrumentos em flexão e torção. Estes ensaios foram realizados de acordo com a especificação ISO 3630-1.

Para o ensaio experimental de flexão, um grupo de doze instrumentos ($n = 12$) de cada tipo de lima foi testado. Um aparato (Figura 4.9a) foi desenvolvido em laboratório (Belo Horizonte, MG, Brasil) para promover condições similares de ensaio descritos na especificação ISO 3630-1. Durante o ensaio, os instrumentos eram presos a uma distância de 3 mm da ponta e então fletidos até uma inclinação de 45° em relação ao seu eixo longitudinal. A força para realizar a flexão era aplicada na extremidade da haste dos instrumentos, com o auxílio de um dispositivo acionado a motor, sendo registrada ao longo do ensaio. O momento resultante era obtido multiplicando-se a força registrada pela distância entre a aplicação da força e o ponto onde o instrumento era preso.

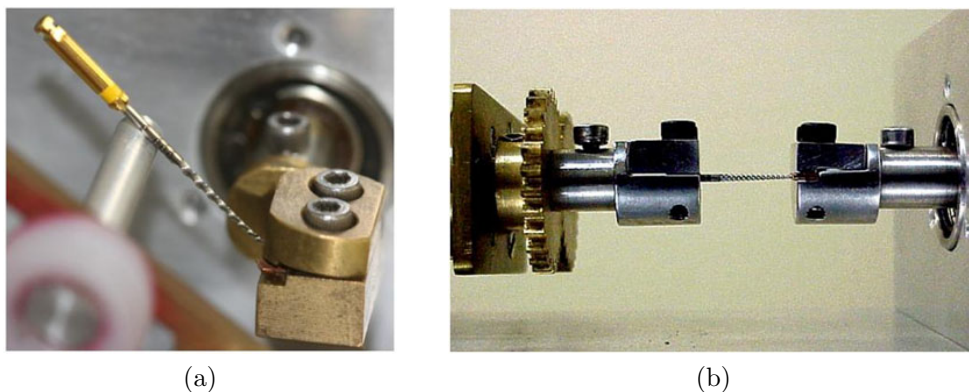


Figura 4.9: (a) Ensaio de flexão. (b) Ensaio de torção.

Durante os testes de torção, também foi selecionado um grupo ($n = 12$) de cada tipo de instrumento para ensaio. Foi utilizada uma máquina de torção (AN8050, Analógica, Belo Horizonte, MG, Brazil), onde o instrumento era preso também a

uma distância de 3 mm da ponta e a extremidade da haste presa e conectada a um motor (Figura 4.9b). O ensaio consistia em rotacionar a haste no sentido horário, enquanto a outra parte do instrumento permanecia presa, até sua ruptura. O torque era registrado enquanto o motor realizava o movimento e a deflexão angular medida por meio de um programa de computador projetado especificamente para o ensaio.

Para realizar a comparação entre os resultados obtidos na simulação com os experimentais, foi necessário elaborar condições de contorno e carregamento com base na especificação ISO 3630-1. Assim, para a simulação dos testes de flexão, engastou-se a lima a 3 mm da ponta e aplicou-se um deslocamento da outra extremidade até uma inclinação de 45° . Para a simulação em torção, também engastou-se a lima a 3 mm e aplicou-se um momento torsor de 0,3 Ncm na haste. As condições utilizadas na simulação, para ambas as análises, podem ser vistas na Figura 4.10.

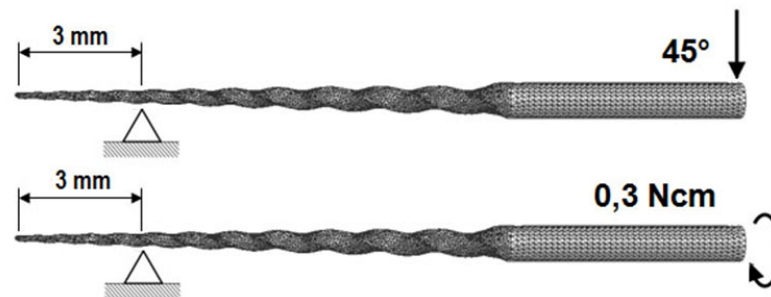


Figura 4.10: Condições de contorno e carregamento.

O valor de 0,3 Ncm foi escolhido com base na limitação do modelo constitutivo. Como discutido anteriormente, a UMAT implementada no ABAQUS descreve o comportamento do material somente até o fim do regime elástico da MIT. Logo, a maior limitação contida nas condições descritas acima reside no fato de não se poder reproduzir o ensaio experimental de torção até a ruptura, uma vez que valores de tensão e/ou deformação acima do regime elástico da MIT não podem ser considerados. Dessa maneira, procurou-se eleger um valor baixo de momento para evitar que a deformação do material incorra em deformação plástica.

4.1.5 Resultados e discussão

As distribuições de tensões de von Mises ao longo dos instrumentos fletidos, obtidas por simulação numérica, são exibidas na Figura 4.11.

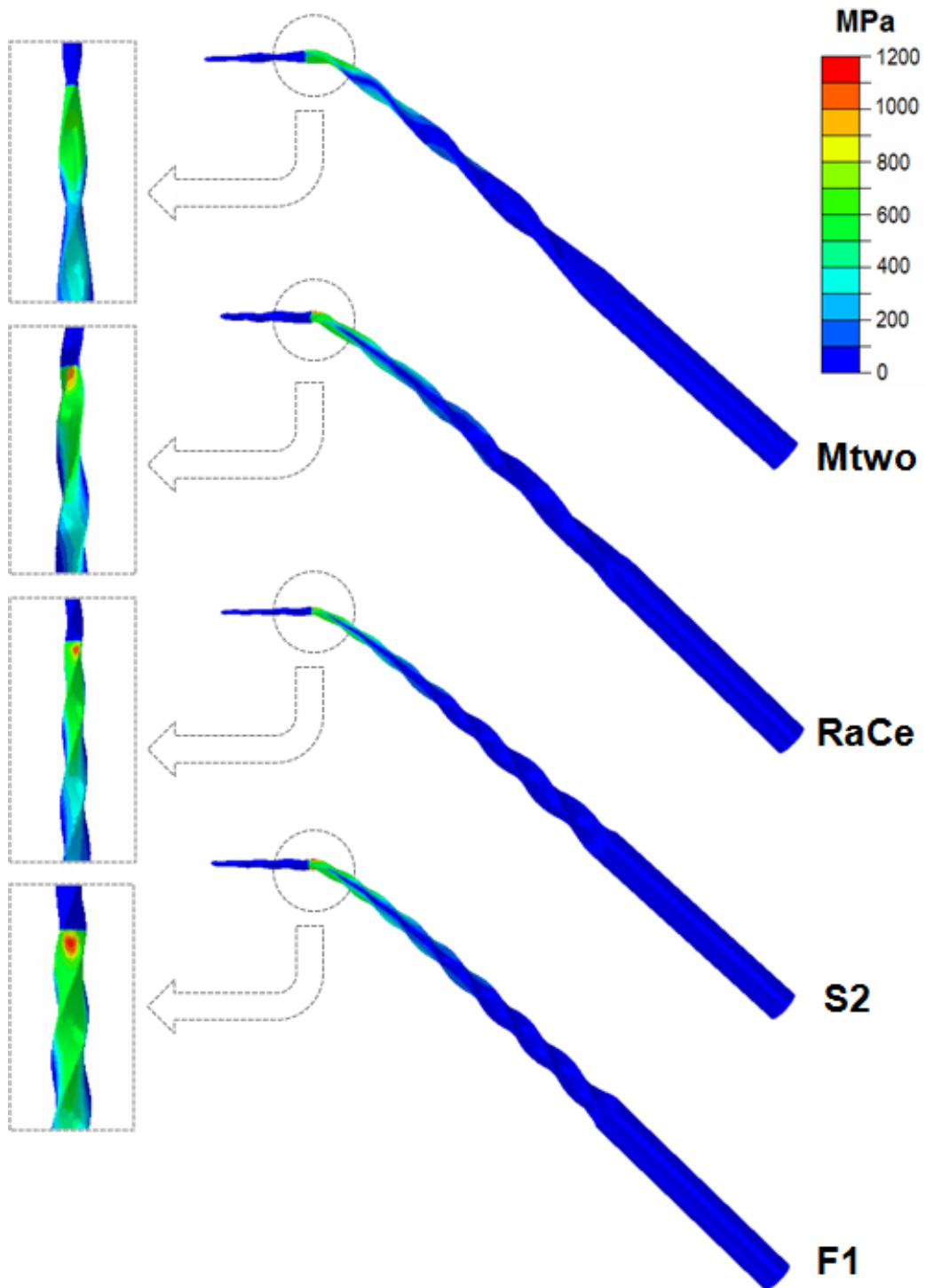


Figura 4.11: Resultados numéricos em flexão.

O maior valor de tensão encontrado foi de 1.185 MPa para o instrumento *PTU F1*, seguido por 1.081 MPa para o instrumento *RaCe*, 1.009 MPa para o instrumento *PTU S2* e 810 MPa para o instrumento *Mtwo*.

A análise pelo MEF mostrou que o instrumento *PTU F1* é o mais resistente à flexão quando comparado aos outros instrumentos analisados. Essa resistência à flexão, de maneira geral, está associada ao módulo de elasticidade do material e o segundo momento de inércia do sólido (TIMOSHENKO; GOODIER, 1970). O módulo de elasticidade é uma medida da rigidez do material, ou seja, a resistência que o material apresenta à deformação elástica. Em termos práticos, corresponde à inclinação da porção elástica do diagrama tensão-deformação (SOUZA, 1982). Como o modelo constitutivo utilizado nas simulações foi o mesmo para todos os instrumentos, não se pode associar as diferenças de comportamento entre os instrumentos a diferenças nas propriedades mecânicas do material.

Por sua vez, o segundo momento de inércia é uma propriedade geométrica da seção transversal de elementos estruturais e está relacionado com as tensões e deformações máximas resultantes da aplicação de flexão. Juntamente com as propriedades do material, determina a resistência de um elemento sob flexão. Como discutido anteriormente, uma vez que o material para todos os instrumentos é o mesmo, o segundo momento de inércia torna-se o grande responsável pelas diferenças de comportamento encontradas. Essa propriedade é diretamente proporcional à área da seção transversal, logo o instrumento *PTU F1* apresentou-se como o menos flexível por possuir uma seção transversal ligeiramente maior que os outros instrumentos, como pode ser visto na Figura 4.3b. Em outras palavras, para alcançar o mesmo grau de flexão durante a formatação de canais curvos, o profissional dentista terá que impor mais força sobre o instrumento quando estiver trabalhando com a lima *PTU F1* do que com as limas *RaCe* ou *Mtwo* que possuem um calibre similar, mas se distinguem em termos de geometria da seção transversal.

Como discutido, o maior valor de tensão encontrado para o instrumento *PTU F1* é um parâmetro que o indica como aquele que oferece maior resistência à flexão. Para confirmar, curvas de momento versus flexão foram calculadas durante a simulação e comparadas com curvas experimentais obtidas durante os ensaios de flexão. Essas curvas podem ser observadas na Figura 4.12.

As curvas calculadas mostram uma boa concordância com as curvas obtidas experi-

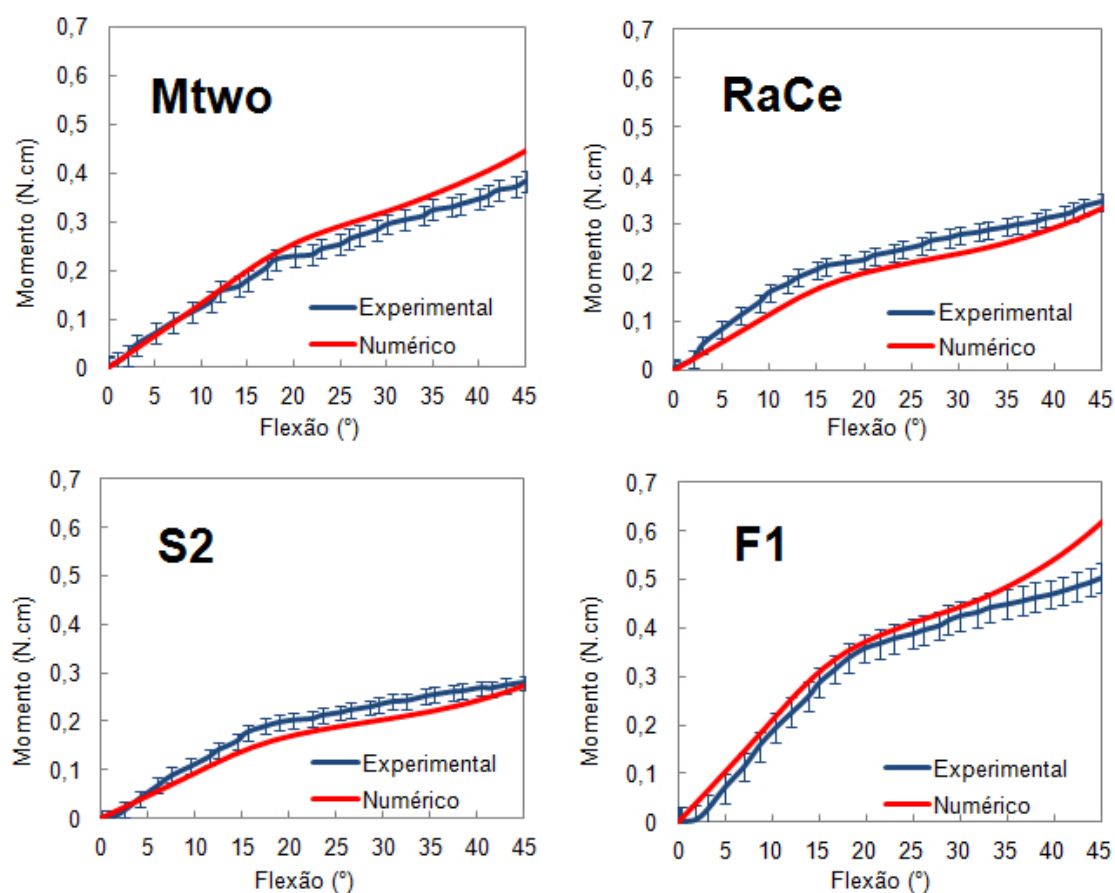


Figura 4.12: Comparação entre curvas de flexão calculadas numericamente e curvas obtidas experimentalmente.

mentalmente, indicando que o modelo de elementos finitos utilizado é confiável. As curvas experimentais exibidas na Figura 4.12 são, em verdade, a média entre as medidas de 12 amostras para cada tipo de instrumento, sendo o desvio padrão indicado pelas barras de erro. Observa-se um comportamento não linear para todos os instrumentos sob flexão. Segundo Montalvão e Alçada (2011), a linearidade é observada apenas em pequenas deformações, sendo que para grandes deslocamentos a relação força versus deformação é não-linear, inclusive para vigas simples. Como pode ser observado, em todos os casos a linearidade deixa de existir em um determinado valor de flexão. A divergência observada no fim das curvas dos instrumentos *Mtwo* e *PTU F1* podem ser atribuídas tanto à aproximações realizadas na elaboração dos modelos de elementos finitos quanto ao fato de que o resultado numérico tem como base o comportamento de um único instrumento, enquanto a curva experimental é resultante da média de 12 experimentos.

Com base nas curvas de flexão, confirma-se que os instrumentos *PTU F1* são menos

flexíveis, uma vez que, além de apresentarem os maiores níveis de tensão, exigem maior momento aplicado durante a flexão. Paralelamente, o instrumento *PTU S2* apresentou-se como o mais flexível, em concordância com o fato de ter uma menor área de secção transversal.

O resultado mais curioso foi aquele obtido para o instrumento *Mtwo*. Com base nas curvas de flexão, pode-se apontar o instrumento *Mtwo* como mais resistente à flexão quando comparado aos instrumentos *RaCe* e *PTU S2*. Porém, os valores de tensão obtidos durante a simulação são menores para este instrumento (Figura 4.11). Outros trabalhos (KIM, H. C. *et al.*, 2009; VERSLUIS *et al.*, 2012) já relataram a mesma discrepância, mostrando que é arbitrário relacionar de forma direta a resistência à flexão e os valores de tensão obtidos durante a simulação.

Recentemente, Zhang *et al.* (2011) desenvolveram uma equação que relaciona a tensão em instrumentos endodônticos sob flexão com vários parâmetros geométricos da secção transversal:

$$\sigma = \frac{2Ef}{L^2} \frac{Ae^{|K-\frac{1}{r_m}|}}{\pi r_m^2} h \quad (4.1)$$

onde σ é a tensão no ponto, E o módulo de elasticidade do material, f uma grandeza que mede o grau de concentração de tensão, L o comprimento da flexão do corpo, A a área da secção transversal, K uma constante geométrica, r_m raio máximo na direção de h , que é a distância entre o ponto em consideração e a linha neutra. A linha neutra é o eixo na secção transversal de um corpo sob flexão onde não há tensões ou deformações, separando a zona comprimida e a zona tracionada. Exemplos de linha neutra podem ser observados através das secções transversais dos instrumentos simulados em flexão na Figura 4.13.

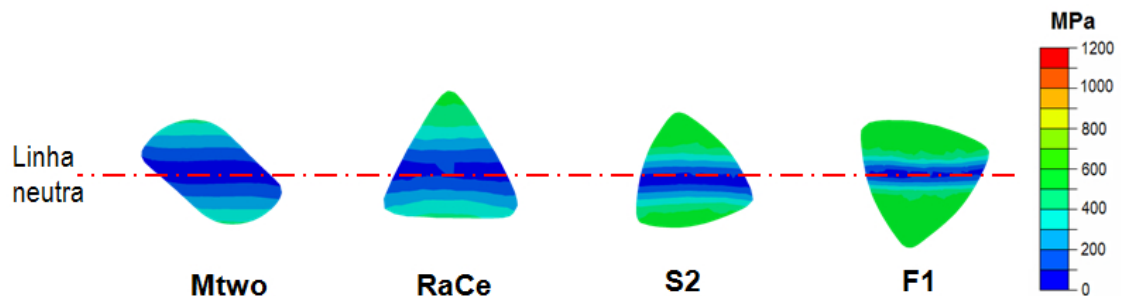


Figura 4.13: Secções transversais a 4 mm da ponta dos instrumentos submetidos à flexão. Sentido da flexão: de cima para baixo

A Equação 4.1 deriva de:

$$\sigma = \frac{M_b}{I_b} \frac{Ae^{|K-\frac{1}{r_m}|}}{\pi r_m^2} h \quad (4.2)$$

onde I_b é o segundo momento de inércia e M_b é o momento fletor. Logo, conclui-se que o segundo momento de inércia não é suficiente para definir qual instrumento (com o mesmo material) irá apresentar o maior nível de tensão quando fletido, sendo necessário levar em consideração outros aspectos geométricos dos mesmos (i.e. distância h). Versluis *et al.* (2012) afirmam que a tensão varia de acordo com a orientação da flexão, da mesma maneira que o segundo momento de inércia varia. Isso quer dizer que instrumentos com secções de geometria aproximadamente retangular, como é o caso dos instrumentos *Mtwo*, apresentam níveis de tensão diferenciados dependendo da orientação da secção transversal em relação à força aplicada. Em outras palavras, a variação do valor de h é muito mais acentuada para secções menos simétricas e, como consequência, o valor da tensão também varia bastante de acordo com essa orientação. Assim, o instrumento *Mtwo* exige uma maior força para fletir por conta de seu calibre, mas apresentou níveis de tensão menores pois sua secção transversal estava favoravelmente orientada em relação à aplicação do deslocamento.

Clinicamente, este comportamento da lima *Mtwo* indica que a mesma impõe forças menos estáveis nas paredes do canal radicular (XU; ZHENG, 2006; VERSLUIS *et al.*, 2012). A importância maior do estudo das tensões em instrumentos endodônticos reside no fato que estas estão diretamente relacionadas à fadiga de instrumentos rotatórios durante a formatação de canais curvos. Lee *et al.* (2011) inclusive apresentaram *Mtwo* como um instrumento bastante resistente à fadiga quando comparado a outros modelos. Entretanto, é necessário um estudo mais abrangente do comportamento desse tipo de instrumento em flexão, principalmente no tocante à posição da secção transversal em relação ao deslocamento aplicado.

As distribuições de tensões de von Mises ao longo dos instrumentos submetidos à torção, obtidas por simulação numérica, são exibidas na Figura 4.14. O maior valor de tensão encontrado foi 542 MPa para o instrumento *Mtwo*, 531 MPa para o instrumento *RaCe* e 520 MPa para o instrumento *PTU F1*. O instrumento *PTU S2* apresentou níveis de tensão e deformação superiores ao limite elástico da MIT. Assim, os valores absolutos de tensão para esse instrumento não podem ser levados em conta, porém pode-se afirmar que é o instrumento que sofreu maior deformação em resposta ao momento de 0,3 Ncm aplicado, sendo o menos resistente à torção.

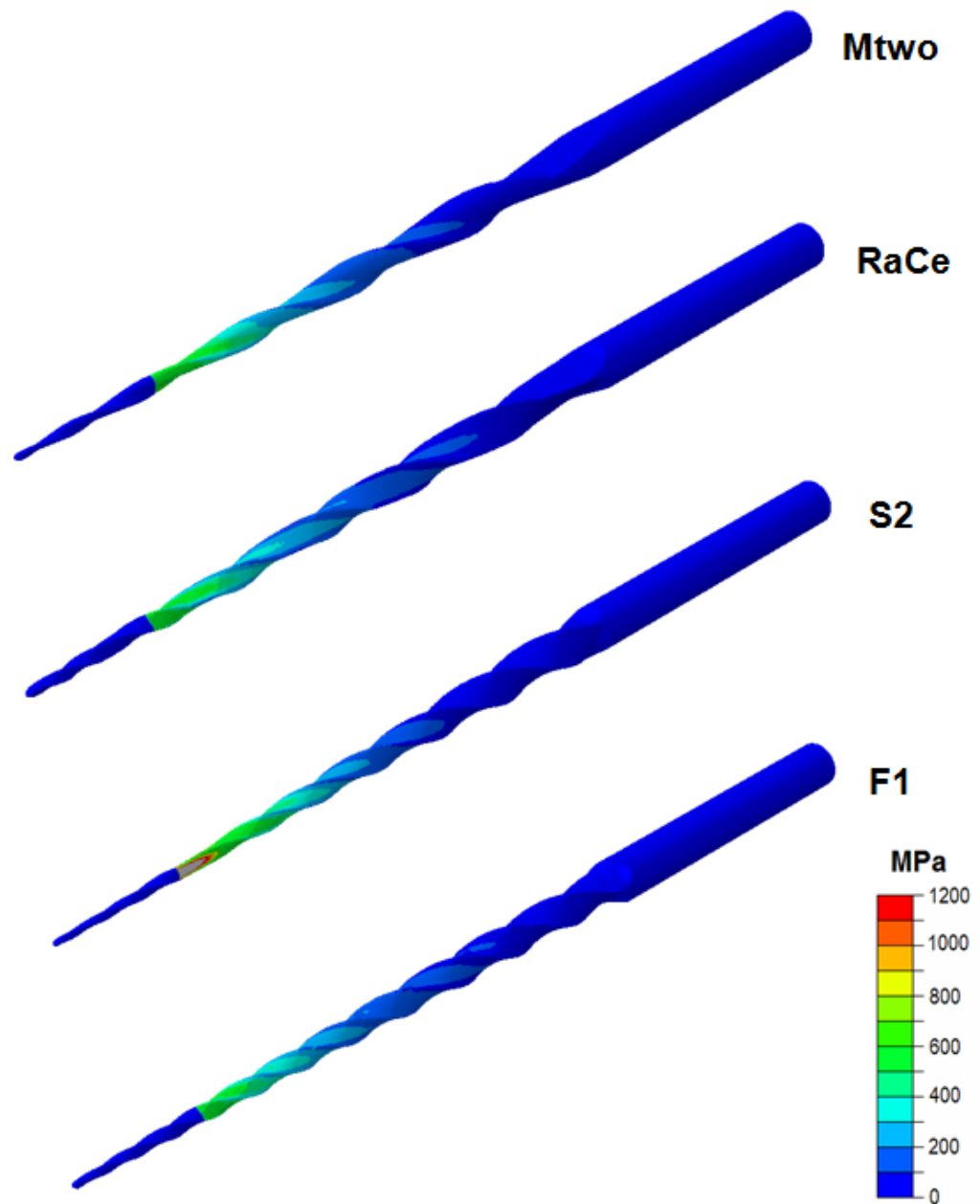


Figura 4.14: Resultados numéricos de torção.

A resistência à torção é diretamente proporcional ao momento polar de inércia do corpo (TIMOSHENKO; GOODIER, 1970), grandeza análoga ao segundo momento de inércia, que mede a habilidade de um corpo em resistir à torção. Isso explica o fato do instrumento *PTU F1* ter apresentado os menores níveis de tensão, seguido de perto pelos instrumentos *Mtwo* e *RaCe*. Dessa maneira, pode-se afirmar que os instrumentos *PTU F1* possuem menor flexibilidade, porém, apresentam um risco menor de fratura por torção dentro do canal radicular. A alta deformação experimentada pelo instrumento *PTU S2* está relacionada diretamente ao fato de possuir uma menor área de secção transversal, ou seja, menor momento polar de inércia. A distribuição de tensões nas secções transversais dos instrumentos torcidos no exato ponto do engaste são exibidas na Figura 4.15.

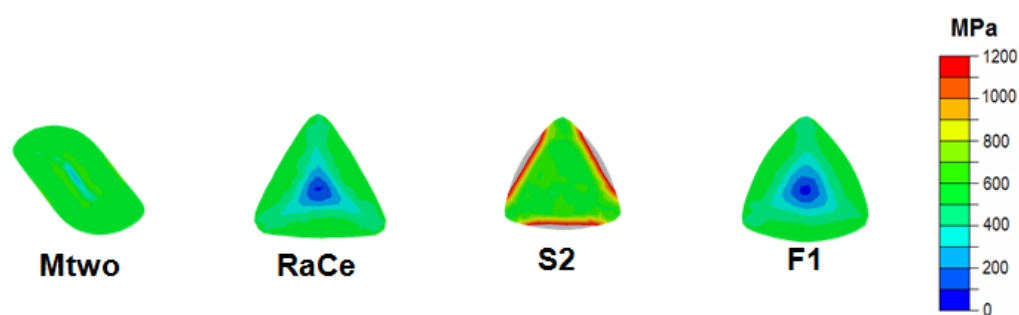


Figura 4.15: Secções transversais, a 3 mm da ponta, dos instrumentos submetidos à torção no sentido horário.

Zhang *et al.* (2011) também desenvolveram uma equação que descreve a relação entre a tensão num ponto da secção e parâmetros do instrumento durante a torção. Porém, neste caso, a distância entre um ponto e o centroide livre de tensões e deformações não varia de acordo com a orientação da aplicação do deslocamento.

A comparação entre os resultados de torção numéricos e experimentais foi realizada através de curvas de deflexão angular versus momento exibidas na Figura 4.16. Com base nessas curvas, observa-se uma boa concordância entre simulado e experimental, salvo poucas divergências como a observada para o instrumento *RaCe* devida à aproximações do modelo. Como esperado, o instrumento *PTU F1* apresentou a menor deflexão angular em resposta ao momento aplicado.

A diferença de pontos observada entre as curvas experimentais de torção é explicada pelo processo de obtenção dos dados, onde a velocidade de torção e número de pontos por segundo era mantido constantes. Logo, os instrumentos que apresentam maior deflexão angular apresentam também maior número de pontos nas curvas ex-

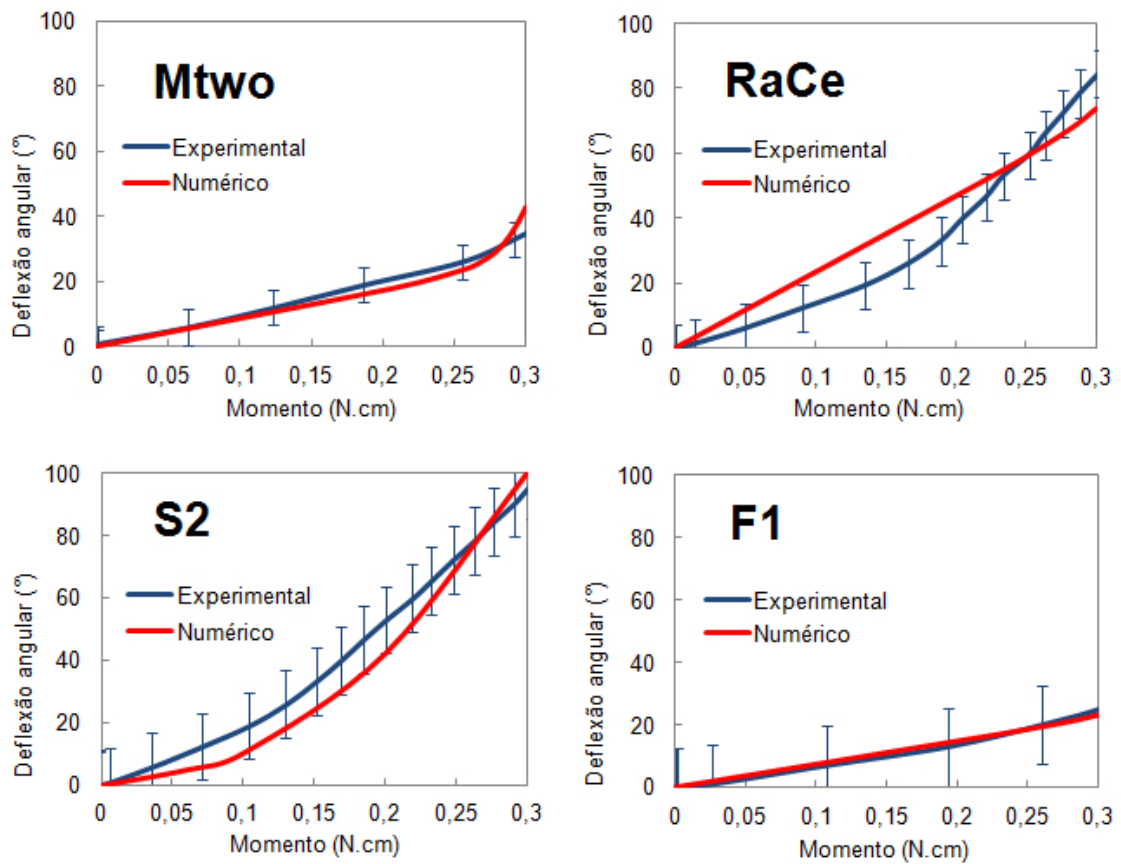


Figura 4.16: Comparação entre curvas de torção calculadas numericamente e curvas obtidas experimentalmente.

perimentais.

Em resumo, a resistência à flexão e à torção foram determinada através do MEF e os resultados foram comparados com aqueles obtidos via ensaios experimentais normalizados. Uma boa concordância entre simulação e experimento foi alcançada, confirmando a viabilidade e confiabilidade do modelo numérico utilizado no estudo do comportamento mecânico de instrumentos endodônticos.

4.2 Comportamento mecânico dos instrumentos

Mtwo

Com base nos resultados das simulações em flexão obtidas para o instrumento *Mtwo*, decidiu-se aprofundar o estudo do comportamento desse instrumento em flexão. A relevância desse estudo se acentua pelo fato de, até o momento, nenhum trabalho ter abordado de forma peremptória como se comporta mecanicamente esse tipo de

instrumento quando fletido em diferentes pontos. Do ponto de vista clínico, essas informações são muito importantes, uma vez que auxiliam o profissional dentista na escolha do instrumento mais adequado às suas atividades.

De acordo com a Equação 4.2, as tensões resultantes da flexão de um instrumento endodôntico estão intimamente relacionadas com parâmetros geométricos da secção transversal. Entre estes parâmetros, o segundo momento de inércia, que é proporcional à área da secção, desempenha um papel fundamental. Quanto maior a área da secção, menos flexível é o instrumento, sendo necessária uma maior força aplicada durante a flexão e, por consequência, maiores serão os valores de tensão no interior desse instrumento. Porém, de acordo com a geometria da secção transversal, um outro parâmetro deve ser levado em consideração, a distância h , que em alguns casos se faz muito importante.

Essa distância h , como discutido anteriormente, é a distância de um ponto qualquer na secção até a linha neutra. Na Figura 4.17a é exemplificado de forma clara como o valor de h pode variar consideravelmente de acordo com a orientação da secção em relação à direção de flexão. Considerando-se somente pontos na superfície, a tensão próxima à superfície do instrumento $Mtwo$ varia de forma considerável em função do valor de h , uma vez que este instrumento possui uma secção que pode ser aproximada com um retângulo.

Comparativamente, na Figura 4.17b, é exibida a secção transversal de um instrumento *PTU F1*, de secção triangular convexa, que pode ser inscrita dentro de um retângulo de lados com comprimentos muito próximos, ou seja, uma forma mais simétrica e que evidencia o fato de que, independente da posição da secção em relação à linha neutra, a distância h praticamente não varia.

Como mostrado na Figura 3.21, a região de máxima curvatura do canal é de grande consideração, uma vez que é neste ponto onde a maioria dos instrumentos rompe por fadiga. Logo, estudou-se o comportamento mecânico do instrumento *Mtwo* em flexão, variando-se a posição de máxima flexão do mesmo.

4.2.1 Condições de contorno

As condições de contorno escolhidas são exibidas na Figura 4.18. Estas condições tem como base o ensaio de flexão até 45° descrito na especificação ISO 3630-1, excetuando-se o fato de que aqui variou-se as posições de engaste, justamente com o

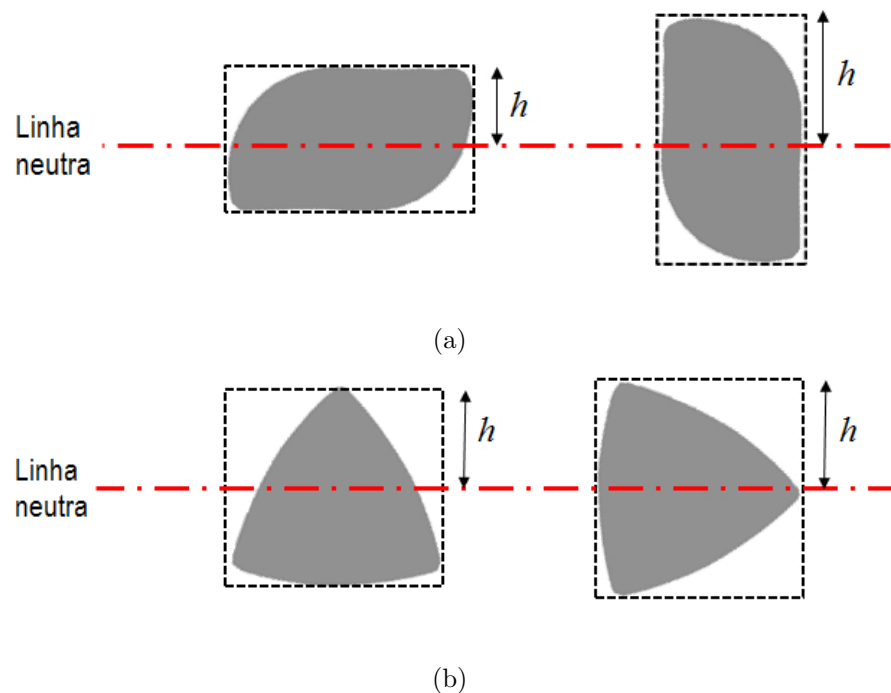


Figura 4.17: Variação do valores de h devido à orientação da secção transversal em relação à direção de flexão: (a) para o instrumento *Mtwo*; (b) para o instrumento *PTU F1*.

objetivo de variar o ponto de flexão máxima no instrumento e verificar a influência da orientação da secção transversal em relação à direção de flexão.

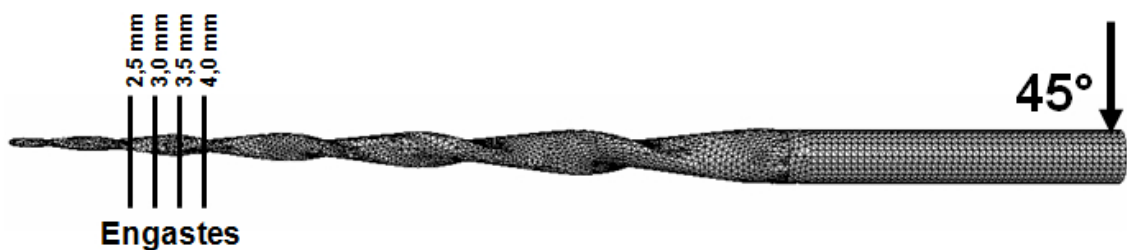


Figura 4.18: Condições de contorno.

Além da posição de engaste descrita na ISO 3630-1, 3 mm desde a ponta, engastou-se a lima em outras 3 posições: 2,5 mm, 3,5 mm e 4 mm desde a ponta. Em todas as simulações, o instrumento foi fletido até 45° em relação ao seu eixo longitudinal na posição original. O mesmo procedimento foi realizado com o modelo da lima *PTU F1*, devido à sua secção transversal simétrica, para comparação.

Todo o procedimento de elaboração das geometrias, malhas e modelo constitutivo foi realizado como descrito na seção anterior.

4.2.2 Resultados e discussão

Na Figura 4.19 são dispostos os resultados de flexão para o instrumento *Mtwo* nas diferentes posições de engaste.

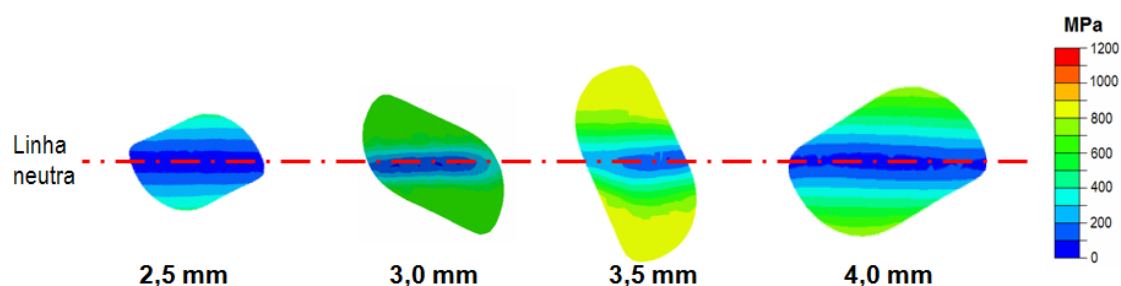


Figura 4.19: Distribuições de tensões ao redor da secção transversal da lima *Mtwo* no ponto de engaste: desde 2,5 mm, 3 mm, 3,5 mm e 4 mm da ponta. Sentido da flexão: de cima para baixo

Observa-se que, caso o instrumento seja engastado a 2,5 mm ou 3 mm desde a ponta, os níveis de tensão mantêm-se relativamente baixos, não maiores que 650 MPa. Entretanto, com o engaste em 3,5 mm desde a ponta, há um aumento significativo do valor de tensão na superfície do instrumento para 883 MPa. Em princípio, poderia-se afirmar que o aumento gradativo dos valores de tensão até 3,5 mm da ponta é uma resposta ao aumento da área de secção devido ao *taper* da lima. Porém, o engaste em 4 mm desde a ponta revela que, mesmo com uma área de secção maior, os valores de tensão são menores em relação ao ponto em 3,5 mm. O máximo valor de tensão encontrado na secção a 4 mm da ponta foi 702 MPa.

Os resultados para a lima *PTU F1* podem ser observados na Figura 4.20. Nota-se que o aumento dos níveis de tensão é gradativo, com o aumento da área da secção, independente da orientação da secção em relação à direção de flexão.

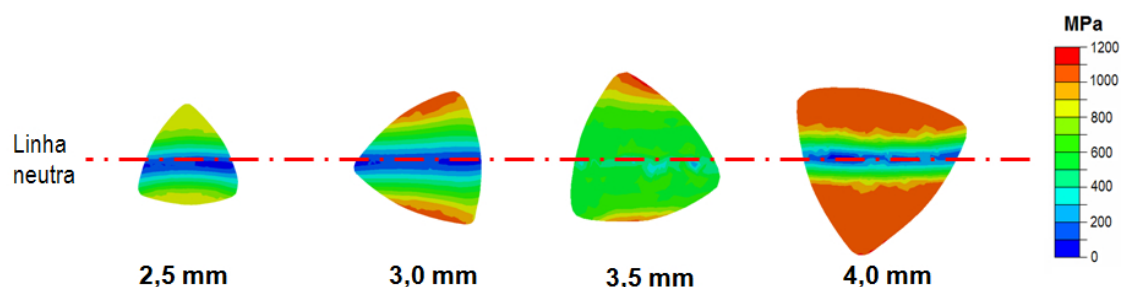


Figura 4.20: Distribuições de tensões ao redor da secção transversal da lima *PTU F1* no ponto de engaste: desde 2,5 mm, 3 mm, 3,5 mm e 4 mm da ponta. Sentido da flexão: de cima para baixo

Fica evidenciado, através dos resultados, que a proposição de Zhang *et al.* (2011) sobre a influência do deslocamento da linha neutra na secção transversal do instrumento tem influência determinante em seu comportamento em flexão. Isso também é indicado através das curvas momento-flexão para o instrumento *Mtwo* (Figura 4.21a), onde o aumento do momento não é proporcional ao aumento da secção transversal, ao contrário do que acontece para o instrumento *PTU F1* (Figura 4.21b).

Em resumo, estudou-se o comportamento mecânico da limas *Mtwo* em função de diferentes pontos de flexão. Constatou-se que a teoria proposta por Zhang *et al.* (2011), que aponta a importância da distância h sobre os valores de tensão na secção transversal da lima, pode ser comprovada através da simulação numérica.

4.3 Comportamento mecânico de um instrumento de níquel-titânio martensítico

Como discutido anteriormente, apesar do avanço que as limas fabricadas com a liga Ni-Ti representam no campo da endodontia, a fratura destes instrumentos rotatórios dentro do canal radicular ainda pode acontecer sem nenhum aviso prévio (PRUETT *et al.*, 1997). Com o intuito de melhorar a resistência mecânica das limas de Ni-Ti, os fabricantes buscam novas alternativas de forma continuada, como a introdução de novas ligas ou o desenvolvimento de novos processos de fabricação. Entre essas novas alternativas, encontra-se uma liga Ni-Ti com menor teor de níquel em comparação às ligas Ni-Ti superelásticas convencionalmente utilizadas na fabricação de limas. A essa liga é dada o nome de Ni-Ti com memória controlada (MC) e, segundo seu fabricante (Coltene-Whaledent, Allstetten, Suíça), pode apresentar até 300% mais resistência à fratura por fadiga durante a formatação de canais curvos. Na prática, o uso de limas de Ni-Ti com MC irá causar deformações aparentes nas mesmas após a formatação do canal. Entretanto, durante a esterilização em temperaturas elevadas, o material é aquecido e a lima recupera sua forma original. Isso permite ao profissional dentista a reutilização da lima com suas formas originais em outros procedimentos

Com base nas características apresentadas pelo fabricante e de estudos sobre sua composição química e propriedades mecânicas (CASPER *et al.*, 2011; ZHOU *at al.*, 2012), as ligas com MC possivelmente são ligas Ni-Ti que se apresentam no estado martensítico em temperatura ambiente, ou seja, sua temperatura M_f é mais elevada que a temperatura ambiente. Isso explica o fato dessas ligas possuírem um baixo

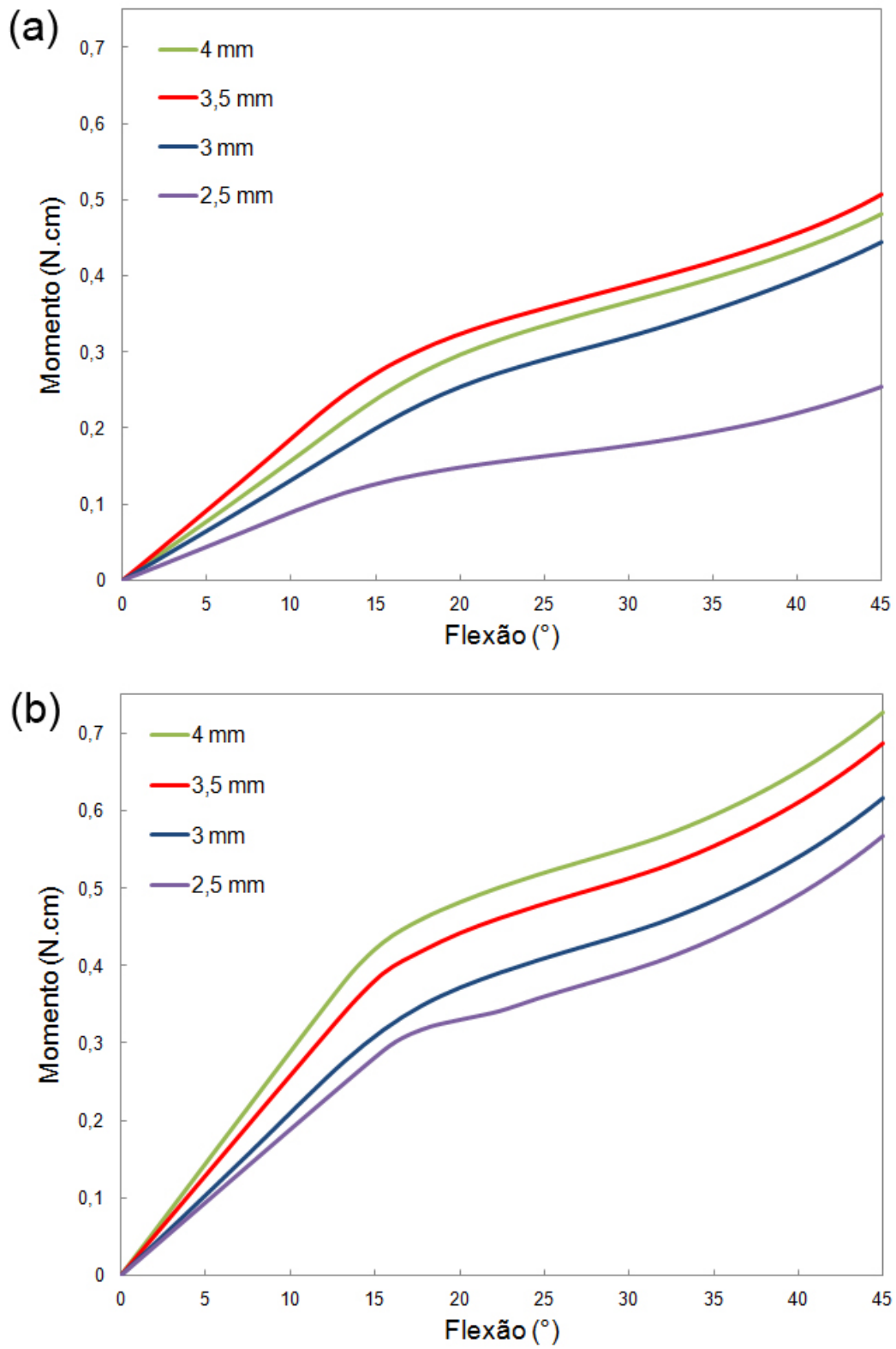


Figura 4.21: Curvas de momento-flexão para o instrumento: (a) *Mtwo* e (b) *PTU F1*, nas diferentes posições de engaste.

teor de níquel, uma vez que o maior teor desse elemento abaixa as temperaturas de transformação.

Alguns trabalhos (FIGUEIREDO *et al.*, 2008; CASPER *et al.*, 2011; TESTARELLI *et al.*, 2011; ZHOU *et al.*, 2012) já apontam uma maior flexibilidade e vida em fadiga da liga Ni-Ti martensítica através de ensaios mecânicos, porém, no que tange nosso conhecimento, nenhum estudo foi realizado diretamente em instrumentos endodônticos fabricados com essa liga através do MEF. Na realidade, a grande maioria dos estudos que fazem uso do MEF para avaliar as respostas de instrumentos endodônticos de Ni-Ti priorizam a influência de características geométricas das limas e poucos abordam a influência de diferentes materiais.

Logo, estudou-se o comportamento mecânico de um lima com a mesma geometria do instrumentos *Hyflex 30/.06* (Coltene), com propriedades do Ni-Ti martensítico, sob flexão e torção. Para efeito de comparação, submeteu-se a mesma geometria às mesmas condições mas com as propriedades do Ni-Ti superelástico e do aço inoxidável.

4.3.1 Geometria, malha e condições de contorno

O modelo tridimensional da lima *Hyflex* também foi obtido através de micro-CT, com o uso do micro-tomógrafo *eXplore Locus SP*. As imagens resultantes e todo o processo de elaboração da geometria tridimensional e conversão em formato reconhecível pelo programa ABAQUS foram realizados exatamente como descrito na Seção 4.1.1.

A malha final consistiu de elementos tetraédricos quadráticos de dez nós, com 57.865 elementos ao todo. O modelo geométrico, bem como a malha confeccionada são exibidos na Figura 4.22.

As condições de contorno e carregamento em flexão e torção utilizadas foram exatamente as mesmas exibidas na Figura 4.10, com base na especificação ISO 3630-1.

4.3.2 Modelos constitutivos

Uma vez que o objetivo desta parte do trabalho foi analisar o comportamento mecânico de um instrumento de Ni-Ti martensítico e compará-lo com o Ni-Ti superelástico, a única diferença em termos de modelo numérico foram as propriedades dos

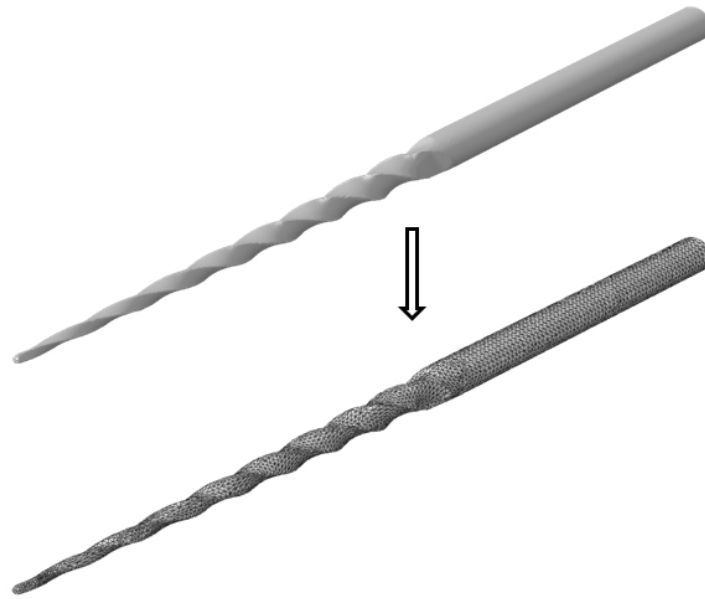
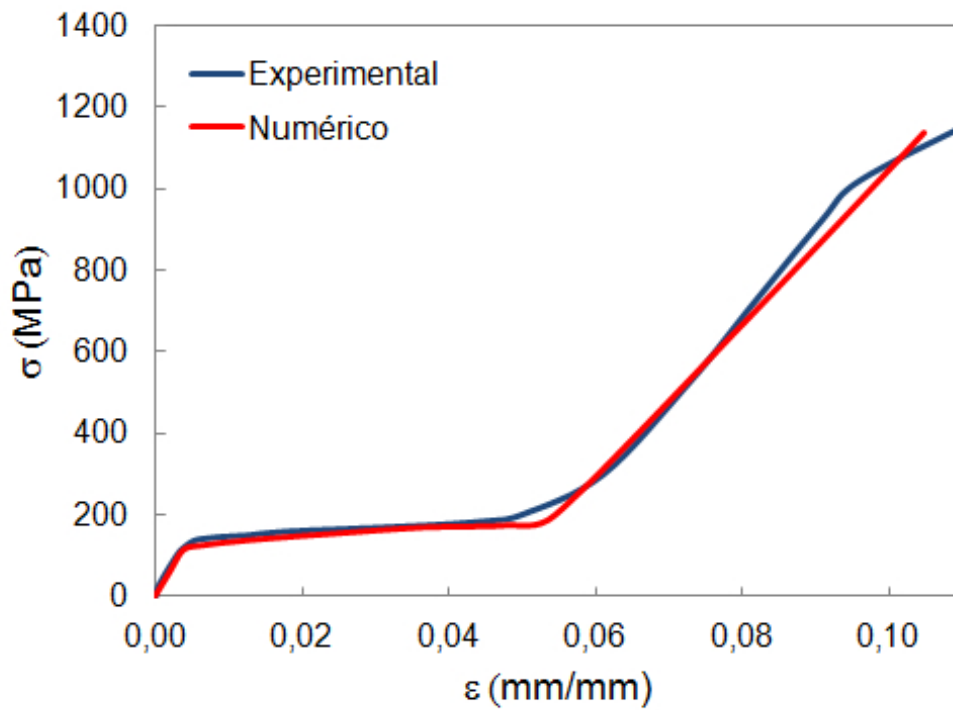


Figura 4.22: Modelo geométrico para a lima *Hyflex* e respectiva malha.

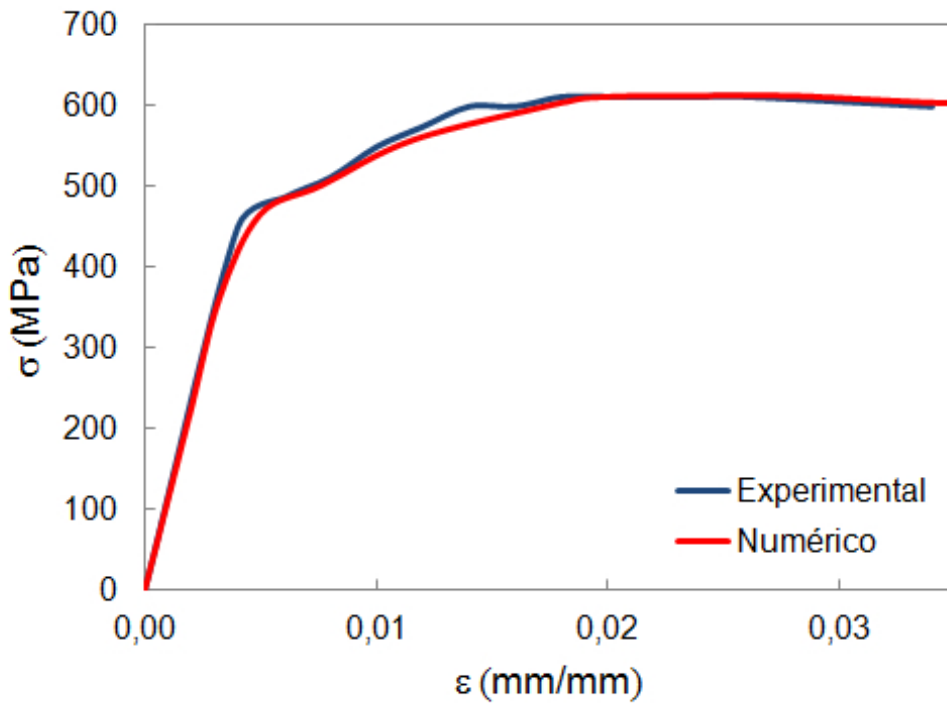
materiais em si.

Com base no diagrama tensão-deformação, obtido através de um ensaio de tração em um fio de Ni-Ti martensítico, os parâmetros necessários para descrever o comportamento do Ni-Ti com MC foram coletados. Utilizou-se a UMAT para materiais superelásticos, implementada no ABAQUS, para a realização das simulações. É sabido que esta sub-rotina tem como base teórica (AURICCHIO; PETRINI, 2004) a TM em materiais superelásticos, sendo que o processo de deformação em materiais martensíticos consiste simplesmente em reorientação/demaclação da martensita antes da deformação plástica. Entretanto, a forma da curva (a despeito dos valores de patamar e módulos de elasticidade) do Ni-Ti martensítico, durante o carregamento, é muito semelhante à forma de uma curva de Ni-Ti superelástico. Além disso, essa UMAT é a sub-rotina que melhor descreve o comportamento da martensita durante o carregamento entre os modelos disponíveis em ABAQUS, como pode ser visto na Figura 4.23a. Esta validação foi realizada sob as mesmas condições descritas anteriormente, na Figura 4.7. Outros modelos foram testados, como um modelo elasto-plástico comum, mas com resultados muito aquém daquele obtido com a UMAT superelástica.

Na Figura 4.23b é exibido o resultado da validação do modelo elasto-plástico para um aço inoxidável, também realizada nas condições descritas na Figura 4.7. A curva



(a)



(b)

Figura 4.23: Curva tensão-deformação e ajuste numérico para: (a) Ni-Ti martensítico; (b) aço inoxidável.

tensão-deformação do aço inoxidável AISI 326L foi obtida através de um ensaio de tração convencional. Por sua vez, as propriedades mecânicas utilizadas no modelo do Ni-Ti superelástico são as mesmas utilizadas ao longo deste trabalho.

4.3.3 Resultados e discussão

As distribuições de tensões de von Mises ao longo dos instrumentos fletidos são exibidas na Figura 4.24. A tensão máxima encontrada para a lima de Ni-Ti martensítico foi 523 MPa, enquanto que a lima de Ni-Ti superelástico apresentou tensão máxima de 1.122 MPa e a lima de aço inoxidável 628 MPa.

Com base nesses resultados, fica evidenciado que os níveis de tensão que se desenvolveram em flexão em uma lima fabricada com Ni-Ti martensítico são muito menores quando comparados a limas de Ni-Ti superelástico, indicando que as informações providas pelo fabricante das limas *Hyflex* podem estar corretas no tocante à maior vida em fadiga. Isso pois, níveis de tensões elevados estão diretamente relacionados com menor vida em fadiga (KIM, H. C. *et al.*, 2009) . A lima de aço inoxidável, embora apresentando valores de tensão menores do que o Ni-Ti superelástico, apresentou elevado grau de deformação permanente, o que compromete de forma significativa sua vida em fadiga, mesmo em baixo ciclo.

Figueiredo *et al.* (2009) relataram, em um estudo sobre a vida em fadiga de fios de Ni-Ti, que o Ni-Ti martensítico apresenta uma vida em fadiga aproximadamente 100 vezes maior em comparação ao Ni-Ti superelástico. Os autores apontam que essa característica do Ni-Ti martensítico está relacionada diretamente aos menores níveis de tensão encontrados nesse tipo de material, confirmando os resultados obtidos por simulação. Além disso, a vida em fadiga do Ni-Ti martensítico está relacionada com seu mecanismo de propagação de trincas, característico por apresentar um sistema eficiente de dissipação de energia, caracterizado pelo aparecimento de um grande número de trincas secundárias, dependentes da direção de orientação das variantes de martensita (BAHIA *et al.*, 2006). Ao contrário do que acontece no Ni-Ti superelástico, onde as trincas tendem a se propagar quase sem ramificações, no material martensítico a propagação dessas trincas é bastante lenta. Em contrapartida, o aumento da amplitude de deformações no Ni-Ti superelástico leva à presença de MIT nos mesmos. Isso pode ocasionar um aumento na vida em fadiga do Ni-Ti superelástico, pois o mecanismo de propagação de trincas na MIT é semelhante àquele que ocorre na martensita estável.

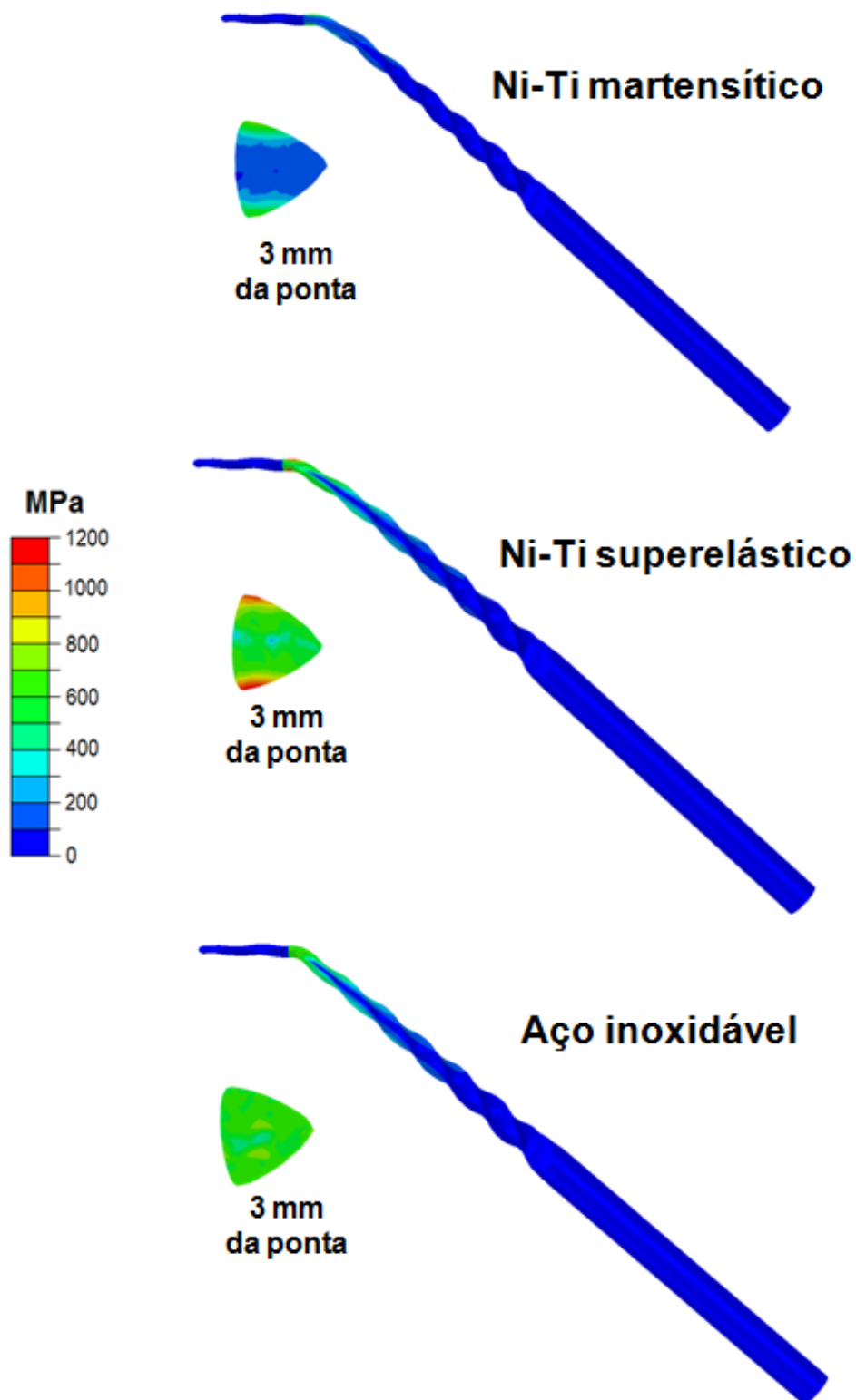


Figura 4.24: Resultados de flexão para o instrumento *Hyflex* com diferentes materiais.

Estes resultados tornam-se importantes do ponto de vista clínico, uma vez que instrumentos fabricados com Ni-Ti martensítico, além de possuírem maior resistência à fadiga durante o preparo de canais curvos, uma das causas mais frequentes de fratura em trabalho desses instrumentos, também necessitam de menos força (ou momento) aplicada para realizarem o movimento de flexão necessário à penetração em canais curvos. Isso é confirmado através da apreciação da Figura 4.25, onde é realizado um comparativo entre os momentos necessários para fletir em 45° o instrumento *Hyflex* constituído dos três diferentes materiais em estudo.

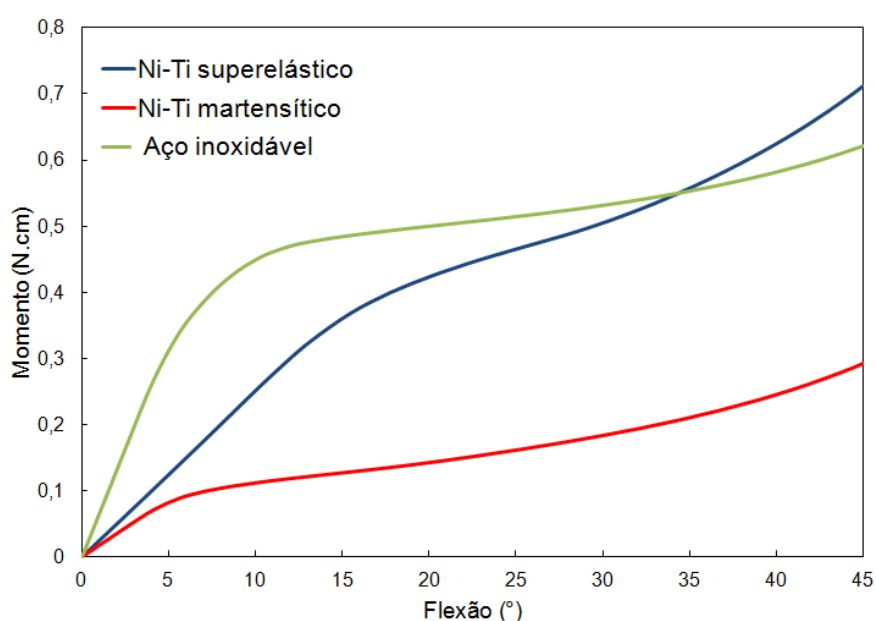


Figura 4.25: Comparativo entre os resultados de flexão para o instrumento *Hyflex* constituído de Ni-Ti martensítico, Ni-Ti superelástico e aço inoxidável.

As distribuições de tensões de von Mises ao longo dos instrumentos submetidos à torção são exibidas na Figura 4.26. Para o instrumento de Ni-Ti martensítico o maior valor de tensão encontrado foi 993 MPa, para o de Ni-Ti superelástico foi de 512 MPa e para o de aço inoxidável de 470 MPa.

Justamente por apresentar uma flexibilidade muito superior aos outros materiais, o Ni-Ti martensítico sofre uma deformação muito maior sob o mesmo momento aplicado. Paralelamente, os níveis de tensões serão mais elevados em torção. Entretanto, as tensões resultantes no Ni-Ti martensítico se concentram principalmente na superfície, mantendo seu interior livre de tensões, ao contrário dos outros materiais onde as tensões e deformações são mais distribuídas em seu interior. Isso é ilustrado pelas secções transversais a 3 mm da ponta, na região do engaste (porção da lima

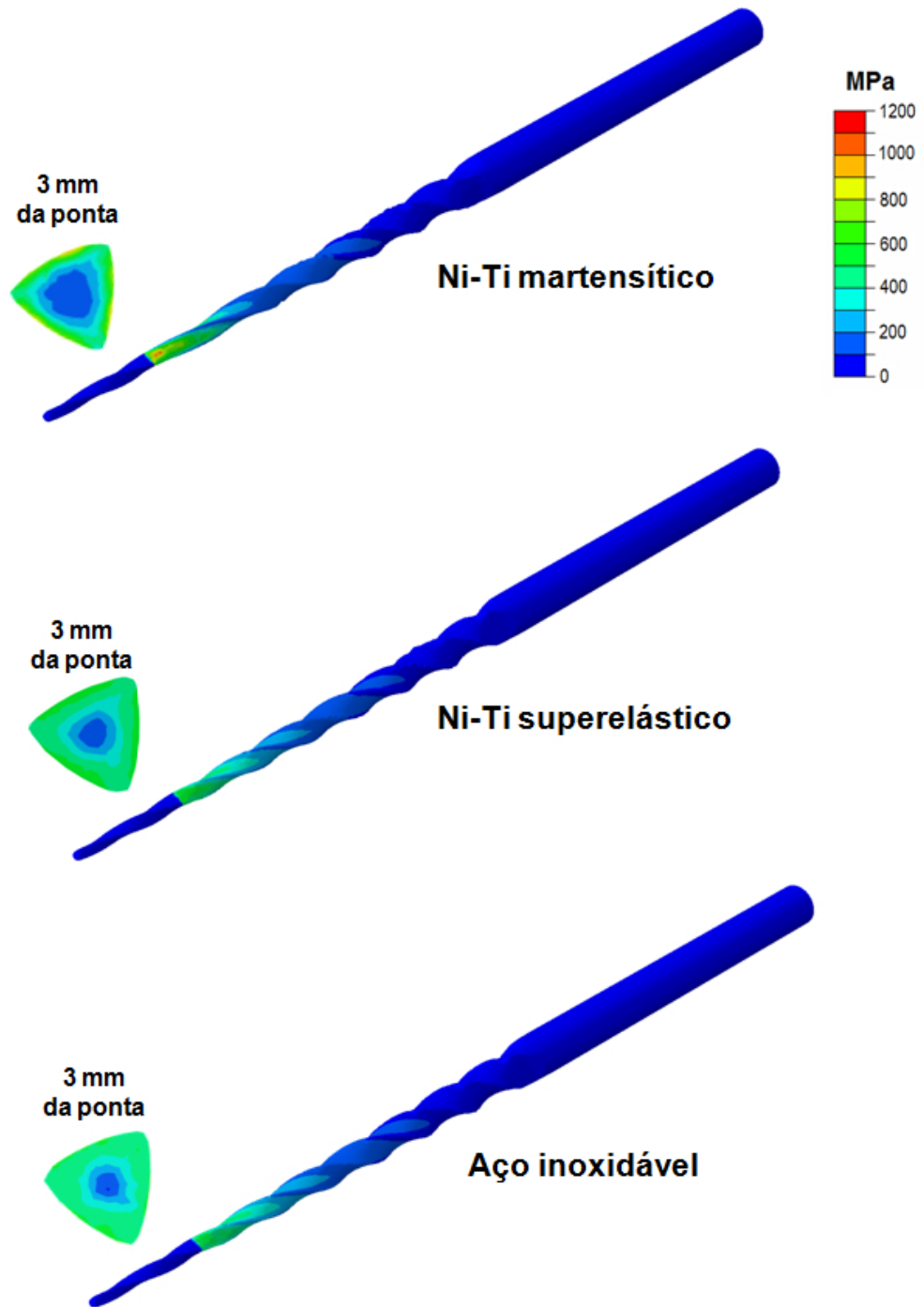


Figura 4.26: Resultados de torção para o instrumento *Hyflex* com diferentes materiais.

onde as tensões são máxima em torção), exibidas na Figura 4.26.

Na Figura 4.27 é exibido o comparativo entre as deflexões angulares dos diferentes tipos de material. A deflexão angular sofrida pelo Ni-Ti martensítico é marcadamente maior que os outros dois materiais, o que justifica os maiores níveis de tensão encontrados.

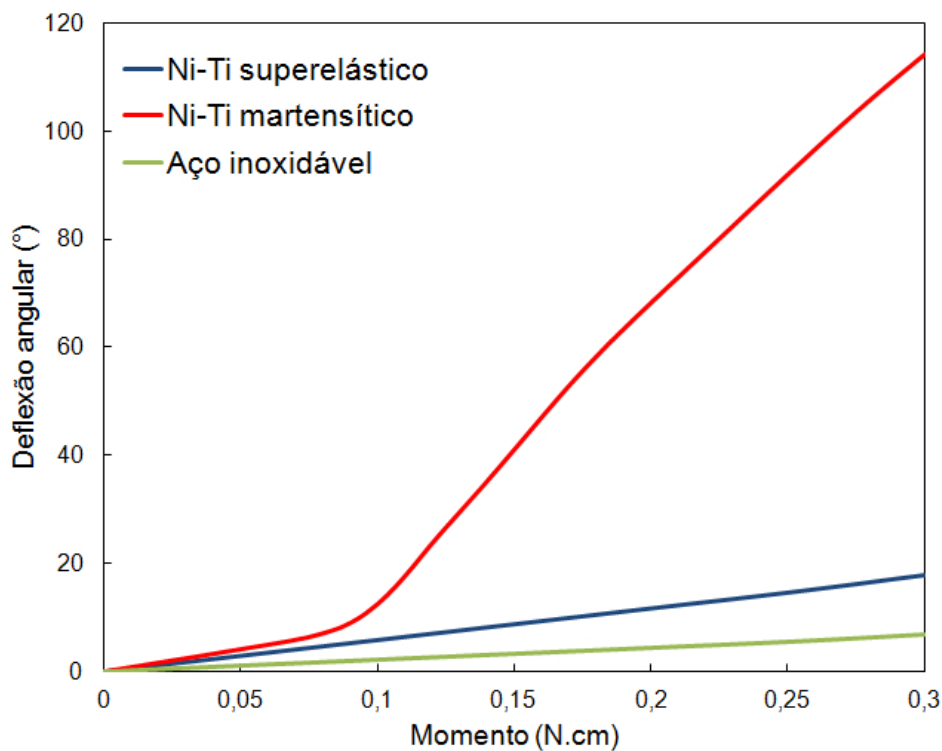


Figura 4.27: Comparativo entre os resultados de torção para o instrumento *Hyflex* constituído de Ni-Ti martensítico, Ni-Ti superelástico e aço inoxidável.

Em resumo, o comportamento de um instrumento feito de Ni-Ti martensítico foi estudado. Os resultados de simulação mostram que limas fabricadas com Ni-Ti martensítico são mais flexíveis e apresentam menores níveis de tensão sob flexão, complementando estudos experimentais que apontam uma maior vida em fadiga desse tipo de material.

Capítulo 5

Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

Neste trabalho, foi avaliado o comportamento mecânico de instrumentos endodônticos de Ni-Ti utilizando-se o método dos elementos finitos. As condições de contorno foram estabelecidas em relação aos dois principais tipos de carregamentos a que estes instrumentos são submetidos em trabalho: flexão e torção. Com base nos resultados obtidos, as seguintes considerações finais são levantadas:

- Os modelos numéricos elaborados neste trabalho apresentaram elevado grau de acuracidade, haja vista a boa concordância entre os resultados numéricos e os resultados experimentais, obtida através das curvas momento-flexão e deflexão angular-momento.
- A lima *PTU F1* apresentou-se como a menos flexível em comparação às outras limas, porém, justamente por possuir um maior calibre, também exibiu a maior resistência à torção.
- A lima *Mtwo* apresentou um comportamento muito particular sob flexão, em virtude da geometria de sua secção transversal. Os valores de tensão encontrados para esta lima sob flexão variam de acordo com a orientação de sua secção transversal em relação à direção de flexão.
- Em comparação com o Ni-Ti superelástico e o aço inoxidável, a utilização de Ni-Ti martensítico para a confecção de instrumentos endodônticos revela-se muito favorável, pois esses instrumentos teriam uma flexibilidade muito mais elevada e a tendência de apresentar uma maior vida em fadiga por flexão devido aos baixos valores de tensão gerados sob flexão.

Em geral, um estudo como este, utilizando um modelo de elementos finitos, envolve algumas simplificações. Em vista disso, como sugestão para trabalhos futuros, melhorias no modelo podem ser realizadas, principalmente no que corresponde à limitação do modelo constitutivo. Como discutido, a UMAT para materiais superelásticos permite a obtenção de resultados somente até o fim do regime elástico da MIT. Uma alternativa seria a utilização em conjunto desse modelo com um modelo elasto-plástico para prever o comportamento além do regime elástico da MIT, uma vez que a martensita deforma-se plasticamente após esse ponto, como um metal comum.

Por fim, estudou-se aqui o comportamento dos instrumentos endodôntico sob flexão e torção, as duas condições principais a que estes instrumentos são submetidos. A escolha dessas condições, com base em especificação internacional, é justificada por serem as formas mais comuns de fraturas desses instrumentos. Porém, um passo adiante, seria o estudo pelo MEF da influência dessas duas condições atuando em conjunto sobre os instrumentos endodônticos.

Referências bibliográficas

AIROLDI, G.; CORSI, A.; RIVA, G. Step-wise martensite to austenite reversible transformation stimulated by temperature or stress: a comparison in Ni-Ti alloys. *Materials Science and Engineering A*, v. 241, n. 1, p. 233-240, 1998.

AURICCHIO, F.; PETRINI, L. A three-dimensional model describing stress temperature induced solid phase transformations: solution algorithm and boundary value problems. *Numerical Methods in Engineering*, v. 61, n. 6, p. 807-836, 2004.

BAHIA, M. G. A.; DIAS, R. F.; BUONO, V. T. L. The influence of high amplitude cyclic straining on the behaviour of superelastic NiTi. *International Journal of Fatigue*, v. 28, p. 1087-1091, 2006.

BAHIA, M. G. A.; MARTINS, R. C.; GONZALEZ, B. M.; BUONO, V. T. L. Physical and mechanical characterization and the influence of cyclic loading on the behaviour of nickel-titanium wires employed in the manufacture of rotary endodontic instruments. *International Endodontic Journal*, v. 38, n. 11, p. 795-801, 2005.

BASINSKI, Z. S.; CHRISTIAN, J. W. Experiments on the martensitic transformation in single crystals of indium-thallium alloys. *Acta Metallurgica*, v. 2, n. 1, p. 148-159, 1954.

BERUTTI, E.; CHIANDUSSI, G.; GAVIGLIO, I.; IBBA, A. Comparative analysis of torsional and bending stresses in two mathematical models of nickel-titanium rotary instruments: ProTaper versus ProFile. *Journal of Endodontics*, v. 29, n. 1, p. 15-19, 2003.

BIRD, D. C.; CHAMBERS, D.; PETERS, O. A. Usage parameters of nickel-titanium rotary instruments: a survey of endodontists in the United States. *Journal of Endodontics*, v. 35, n. 9, p. 1193-1197, 2009.

BUHELER, W. J.; GILFRICH, J. V.; WILEY, R. C. Effect of low-temperature phase changes on the mechanical properties of alloys near composition TiNi. *Journal of Applied Physics*, v. 34, n. 5, p. 1475-1477, 1963.

CÂMARA, A. S.; MARTIS, R. C.; VIANA, A. C. D.; LEONARDO, R. T.; BUONO, V. T. L.; BAHIA, M. G. A. Flexibility and torsional strength of ProTaper and ProTaper Universal rotary instruments assessed by mechanical tests. *Journal of Endodontics*, v. 35, n. 1, p. 113-116, 2009.

CASPER, R. B.; ROBERTS, H. W.; ROBERTS, M. D.; HIMEL, V. T.; BERGERON, B. E. Comparison of autoclaving effects on torsional deformation and fracture resistance of three innovative endodontic file systems. *Journal of Endodontics*, v. 37, n. 11, p. 1572-1575, 2011.

CHANG, L. C.; READ, T. A. Plastic deformation and diffusionless phase changes in metals: the gold-cadmium beta phase. *Transactions AIME*, v. 191, p. 47-52, 1951.

CHEVALIER, V.; CHIRANI, R. A.; CHIRANI, S. A.; CALLOCH, S. An improved model of 3-dimensional finite element analysis of mechanical behavior of endodontic instruments. *Oral Surg. Oral Med. Oral Pathol. Oral Radiol. Endod.*, v. 109, p. 111-121, 2010.

CHIRANI, S. A.; CHEVALIER, V.; CHIRANI, S. A.; CALLOCH, S. Comparative analysis of torsional and bending behavior through finite-element models of 5 nickel-titanium endodontic instruments. *Oral Surg. Oral Med. Oral Pathol. Oral Radiol. Endod.*, v. 111, p. 115-121, 2011.

DUWEZ, P.; TAYLOR, J. L. The structure of intermediate phases in alloys of titanium with iron, cobalt and nickel. *Transactions of AIME*, v. 188, p. 1173, 1950.

FIGUEIREDO, A. M.; MODENESI, P.; BUONO, V. Low-cycle fatigue life of superelastic NiTi wires. *International Journal of Fatigue*, v. 31, p. 751-758, 2009.

GAO, Y.; CHEUNG, G. S. P.; SHEN, Y.; ZHOU, X. Mechanical behavior of ProTaper Universal F2 finishing file under various curvature and conditions: a finite element analysis study. *Journal of Endodontics*, v. 37, n. 10, p. 1446-1450, 2011.

GLOSSON, C. R.; HALLER, R. H.; DOVE, S. B.; DEL RIO, C. A comparison of root canal preparations using NiTi hand, NiTi engine driven and K-Flex endodontic instruments. *Journal of Endodontics*, v. 21, n. 3, p. 146-151, 1995.

HAIKEL, Y.; SERFATY, R.; BATEMAN, G.; SENGER, B.; ALLEMANN, C. Dynamic and cyclic fatigue of engine-driven rotary nickel-titanium endodontic instruments. *Journal of Endodontics*, v. 25, n. 6, p. 434-440, 1999.

HE, R.; NI, J. Design improvement and failure reduction of endodontic files through finite element analysis: application to V-Taper file designs. *Journal of Endodontics*, v. 36, n. 9, p. 1552-1557, 2010.

HUEBNER, K. H.; THORNTON, E. A. *The finite element method for engineers*. 1. ed. New York: John Wiley and Sons, 1975. 49 p.

International Organization for Standardization ISO 3630-1. *Dental root-canal instruments Part 1: files, reamers, barbed broaches, rasps, paste carriers, explorers and cotton broaches*. Switzerland: International Organization for Standardization, 1992.

KIM, H. C.; CHEUNG, G. S. P.; LEE, C. L.; KIM, B. M.; PARK, J. K.; KANG, S. I. Comparison of forces generated during root canal shaping and residual stresses of three nickel-titanium rotary file by using a three-dimensional finite-element analysis. *Journal of Endodontics*, v. 34, n. 6, p. 743-747, 2008.

KIM, H. C.; KIM, H. J.; LEE, C. J.; KIM, B. M.; PARK, J. K.; VERSLUIS, A. Mechanical response of nickel-titanium instruments with different cross-sectional designs during shaping of simulated curved canals. *International Endodontic Journal*, v. 42, p. 593-602, 2009.

KIM, T. O.; CHEUNG, G. S. P.; LEE, J. M.; KIM, B. M.; HUR, B.; KIM, H. C. Stress distribution of three NiTi rotary files under bending and torsional conditions using a mathematic analysis. *International Endodontic Journal*, v. 42, p. 14-21, 2009.

KOSKIMAKI, D.; MARCINKOWSKI, M. J.; SASTRI, A. S. Solid state diffusional transformations in the near-equiatomic Ni-Ti alloys. *Transactions of AIME*, v. 245, p. 1883-1890, 1969.

LEE, M. H.; VERSLUIS, A.; KIM, B. M.; LEE, C. J.; HUR, B.; KIM, H. C. Correlation between experimental cyclic fatigue resistance and numerical stress analysis for nickel-titanium rotary files. *Journal of Endodontics*, v. 37, n. 8, p. 1152-1157, 2011.

LI, U. M.; LEE, B. S.; SHIH, C. T.; LAN, W. H.; LIN, C. P. Cyclic fatigue of endodontic nickel-titanium rotary instruments: static and dynamic tests. *Journal of Endodontics*, v. 28 n. 6, p. 448-451, 2002.

LIU, Y.; XIE, Z.; VAN HUMBEECK, J.; DELAY, L. Deformation of shape memory alloys associated with twinned domain re-configurations. *Materials Science and Engineering*, A273-275, p. 679-684, 1999.

MARTINS, R. C.; BAHIA, M. G. A.; BUONO, V. T. L. Surface analysis of ProFile instruments by scanning electron microscopy and X-ray energy-dispersive spectroscopy: a preliminary study. *International Endodontic Journal*, v. 35, n. 10, p. 848-853, 2002.

MASSALSKI, T. B.; OKAMOTO, H.; SUBRAMANIAN, P. R.; KACPRZAK, L. *Binary Alloy Phase Diagrams*. 2. ed. Ohio: ASM International, 1990. 2875 p.

MELO, M. C. C.; BAHIA, M. G. A.; BUONO, V. T. L. Fatigue resistance of engine-driven rotary nickel-titanium endodontic instruments. *Journal of Endodontics*, v. 28, n. 11, p. 765-769, 2002.

MELO, M. C. C.; PEREIRA, E. S. J.; VIANA, A. C. D.; FONSECA, A. M. A.; BUONO, V. T. L.; BAHIA, M. G. A. Dimensional characterization and mechanical behaviour of K3 rotary instruments. *International Endodontic Journal*, v. 41, n. 4, p. 329-338, 2008.

MELTON, K. N. Ni-Ti based shape memory alloys. In: DUERIG, T. W.; MELTON, K. N.; STÖCKEL, D.; WAYMAN, C. M. *Engineering Aspects of Shape Memory Alloys*. Butterworth-Heinemann Ltd, 1990. 499 p.

MIYAZAKI, S. Medical and dental applications of shape memory alloys. In: OTSUKA, K.; WAYMAN, C. M. *Shape Memory Materials*. New York: Cambridge, 1998. 267 p.

MONTALVÃO, D.; ALÇADA, F. S. Numeric comparison of the static mechanical behavior between ProFile GT and ProFile GT series X rotary nickel-titanium files. *Journal of Endodontics*, v. 37, n. 8, p. 1158-1161, 2011.

MUELLER, M. H.; KNOTT, H. W. The crystal structure of Ti_2Cu , Ti_2Ni , Ti_4Ni_2O , and Ti_4Cu_2O . *Transactions of AIME*, v. 227, p. 674, 1963.

NECCHI, S.; PETRINI, L.; TASCHIERI, S.; MIGLIAVACCA, F. A comparative computational analysis of the mechanical behavior of two nickel-titanium Rotary endodontic instruments. *Journal of Endodontics*, v. 36, n. 8, p. 1380-1384, 2010.

NECCHI, S.; TASCHIERI, S.; PETRINI, L.; MIGLIAVACCA, F. Mechanical behaviour of nickel-titanium rotary endodontic instruments in simulated clinical conditions: a computational study. *International Endodontic Journal*, v. 41, p. 939-949, 2008.

NISHIDA, M.; WAYMAN, C. M.; HONMA, T. Precipitation processes in near equi-atômica TiNi shape memory alloys. *Metallurgical Transactions A*, v. 17, p. 1505-1515, 1986.

OHKATA, I.; SUZUKI, Y. The design shape memory alloy actuators and their applications. In: OTSUKA, K.; WAYMAN, C. M. *Shape Memory Materials*. New York: Cambridge, 1998. 240 p.

OTSUKA, K.; REN, X. Physical metallurgy of Ti-Ni-based shape memory alloys. *Progress in Materials Science*, v. 50, n. 5, p. 511-678, 2005.

OTSUKA, K.; WAYMAN, C. M. *Shape memory materials*. 1. ed. United Kingdom: Cambridge University Press, 1998. 49 p.

PETRINI, L.; NECCHI, S.; TASCHIERI, S.; MIGLIAVACCA, F. Numerical study on the influence on material characteristics on Ni-Ti endodontic instrument performance. *Journal of Materials Engineering and Performance*, v. 18(5-6), p. 631-637, 2009.

PETTIETTE, M. T.; OLUTAYO, D. E.; TROPE, M. Evaluation of success rate of endodontic treatment performed by students with stainless-steel K-files and Nickel-Titanium hand files. *Journal of Endodontics*, v. 27, n. 2, p. 124-127, 2001.

PHILIP, T. V.; BECK, P. A. CsCl-type ordered structure in binary alloys of transition elements. *Transactions of AIME*, v. 209, p. 1269, 1957.

PRUETT, J.; CLEMENT, D.; CARNES, D. J. Cyclic fatigue testing of nickel-titanium endodontic instruments. *Journal of Endodontics*, v.2 3, n. 2, p. 77-85, 1997.

PURDY, G. R.; PARR, J. G. Shape memory effect in NiTi alloys. *Transactions of AIME*, v. 221, p. 636, 1961.

REBELO, N.; GONG, X. Y.; HALL, A.; PELTON, A. R.; DUERIG, T. W. Finite element analysis on the cyclic properties of superelastic Nitinol. *ABAQUS Users Conference*, 2004.

SABURI, T. Ti-Ni shape memory alloys. In: OTSUKA, K.; WAYMAN, C. M. *Shape Memory Materials*. New York: Cambridge, 1998. 49 p.

SERENE, T. P.; ADAMS, J. D.; SAXENA, A. *Nickel-Titanium instruments: Applications in Endodontics*. St. Louis, MO, USA:Ishiaku EuroAmerica, Inc., 1995.

SOTOKAWA, T. An analysis of clinical breakage of root canal instruments. *Journal of Endodontics*, v. 14, n. 2, p. 75-82, 1988.

SOUZA, S. A. *Ensaio mecânicos de materiais metálicos*. 5. ed. São Paulo: Edgard Blucher, 2000.

STRÓZ, D. Studies of the R-phase transformation in a Ti-51at.%Ni alloy by transmission electron microscopy. *Scripta Materialia*, v. 47, p. 363-369, 2002.

SUZUKI, Y. Fabrication of shape memory alloys. In: OTSUKA, K.; WAYMAN, C. M. *Shape Memory Materials*. New York: Cambridge, 1998. 133 p.

TADAKI, T.; NAKATA, Y.; SHIMIZU, K.; OTSUKA, K. Crystal structure, composition and morphology of a precipitate in an aged Ti-51at%Ni shape memory alloy. *Transaction of the Japan Institute of Metals*, v. 27, n. 10, p. 731-740, 1986.

TESTARELLI, L.; PLOTINO, G.; AL-SUDANI, D.; VINCENZI, V.; GIANSIRACUSA, A.; GRANDE, N.; GAMBARINI, G. Bending properties of a new nickel-titanium alloy with a lower percent by weight of nickel. *Journal of Endodontics*, v. 37, n. 9, p. 1293-1295, 2011.

THOMPSON, S. A. An overview of nickel-titanium alloys used in dentistry. *International Endodontic Journal*, v.3 3, n. 4, p. 297-310, 2000.

TIMOSHENKO, S.P.; GOODIER, J. N. *Theory of elasticity*. 1. ed. New York: McGraw-Hill, 1970.

ULLMANN, C. J.; PETERS, O. A. Effect of cyclic fatigue on static fracture loads in ProTaper nickel-titanium rotary instruments. *Journal of Endodontics*, v. 31, n. 3, p. 183-186, 2005.

UMAT for superelasticity of shape memory alloys. *ABAQUS, Inc.* 2004.

VERSLUIS, A.; KIM, H. C.; LEE, W. C.; KIM, B. M.; LEE, C. J. Flexural stiffness and stresses in nickel-titanium rotary files for various pitch and cross-sectional geometries. *Journal of Endodontics*, v. 38, n. 10, p. 1399-1403, 2012.

VIANA, A. C. D.; MELO, M. C. C.; BAHIA, M. G. A.; BUONO, V. T. L. Relationship between flexibility and physical, chemical, and geometric characteristics of rotary nickel-titanium instruments. *Oral Surgery, Oral Medicine, Oral Pathology, Oral Radiology, and Endodontology*, v. 110, n. 4, p. 527-533, 2010.

WALIA, H.; BRANTLEY, W. A.; GERSTEIN, H. N. A initial investigation of the bending and torsional properties of nitinol root canal files. *Journal of Endodontics*, v. 14, n. 7, p. 346-351, 1988.

WALTON, R. E.; TORABINEJAD, M. *Principles and practice of endodontics*. 3. ed. United States of America: W.B. Saunders Company, 2002.

WASILEWSKI, R. J.; BUTLER, S. R.; HANLON, J. E.; WORDEN, D. Homogeneity range and the martensitic transformation in NiTi. *Metallurgical Transactions*, v. 2, n. 1, p. 229-238, 1971.

WAYMAN, C. M.; DUERIG, T. W. An introduction to martensite and shape memory. In: DUERIG, T. W.; MELTON, K. N.; STÖCKEL, D.; WAYMAN, C. M. *Engineering Aspects of Shape Memory Alloys*. Butterworth-Heinemann Ltd, 1990. 499 p.

XU, X.; ZHENG, Y. Comparative study of torsional and bending properties for six models of nickel-titanium root canal instruments with different cross-sections. *Journal of Endodontics*, v. 32, n. 4, p. 372-375, 2006.

ZHANG, E. W.; CHEUNG, G. S. P.; ZHENG, Y. F. A mathematical model for describing the mechanical behavior of root canal instruments. *International Endodontic Journal*, v. 44, p. 72-76, 2011.

ZHANG, E. W.; CHEUNG, G. S. P.; ZHENG, Y. F. Influence of cross-sectional design and dimension on mechanical behavior of nickel-titanium instruments under torsion and bending: a numerical analysis. *Journal of Endodontics*, v. 36, n. 8, p. 1394-1398, 2010.

ZHOU, H.; SHEN, Y.; ZHENG, W.; LI, L.; ZHENG, Y.; HAAPASALO, M. Mechanical properties of controlled memory and superelastic nickel-titanium wires used in the manufacture of rotary endodontic instruments. *Journal of Endodontics*, v. 38, n. 11, p. 1535-1540, 2012.

ZINELIS, S.; MAGNISSALIS, E. A.; MARGELOS, J.; LAMBRIANIDIS, T. Clinical relevance of standardization of endodontic files dimensions according to the ISO 3630-1 specification. *Journal of Endodontics*, v. 28, n. 5, p. 367-370, 2002.

Publicações do autor relacionadas ao trabalho

International Endodontic Journal

International Endodontic Journal 
The Official Journal of the British Endodontic Society and the European Society of Endodontology

Mechanical behaviour of three nickel-titanium rotary files: a comparison between numerical simulation and experiment

Journal:	<i>International Endodontic Journal</i>
Manuscript ID:	Draft
Manuscript Type:	Original Scientific Article
Keywords:	NITI rotary files, Finite element analysis, Mechanical behaviour, Flexural stiffness, Torsional resistance

SCHOLARONE™
Manuscripts
Peer Review

International Endodontic Journal

Mechanical behavior of three nickel-titanium rotary files: a comparison between numerical simulation and experiment

Leandro de Arruda Santos, DDS, MS,^a Javier Bayod López, DDS, MS, PhD,^b Estevam Barbosa de Las Casas, DDS, MS, PhD,^c Maria Guiomar de Azevedo Bahia, DDS, MS, PhD,^d and Vicente Tadeu Lopes Buono, BS, MS, PhD^a

^aDepartment of Metallurgical and Materials Engineering, School of Engineering, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG, Brazil, ^bGroup of Structural Mechanics and Materials Modeling (GEMM), Aragón Institute of Engineering Research (I3A), Universidad de Zaragoza, Zaragoza, Spain, ^cDepartment of Structural Engineering, School of Engineering, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), ^dDepartment of Restorative Dentistry, Faculty of Dentistry, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG, Brazil.

Abstract

Aim: To assess the flexibility and torsional strength of three nickel-titanium rotary instruments by finite element analysis and compare the numerical results with the experiment. **Methodology:** Mtwo (VDW, Munich, Germany) and RaCe (FKG Dentaire, La-Chaux-de-Fonds, Switzerland) size 25, .06 taper and ProTaper F1 (Dentsply Maillefer, Ballaigues, Switzerland) instruments were selected for this study. Experimental tests to assess the flexibility and torsional strength of the files were performed according to specification ISO 3630-1. Geometric models for finite element analysis were obtained by micro-CT scanning. The numerical analysis was performed with boundary conditions based on the specification ISO 3630-1 to allow for direct comparison between the numerical simulation and the experiment. **Results:** A satisfactory agreement between the simulation and the experiment was found for the three types of instruments studied. ProTaper F1 exhibited the highest flexural stiffness and rotational resistance. Maximum values of von Mises stress were found for the ProTaper F1 (1,185 MPa) file under bending, whereas the values of von Mises stress for the three instruments were quite similar under torsion. **Conclusions:** The favourable agreement found between simulation and experiment for the three types of instruments studied confirmed the potential of the numerical method to assess the mechanical behaviour of endodontic instruments.

Key Words: NiTi rotary files, finite element analysis, mechanical behaviour, flexural stiffness, torsional resistance.

Introduction

Nickel-titanium (NiTi) rotary endodontic instruments present several advantages when compared to stainless steel instruments, such as higher flexibility, less canal aberrations and lower procedural time (Walia *et al.* 1988, Glosson *et al.* 1995). These advantages are explained by the superelasticity of the NiTi alloys, a nonlinear elastic behaviour that allows the material to undergo high deformations without plastic residual strain after stress removal (Otsuka & Wayman 1998, Otsuka & Ren 2005). This behaviour is due to a reversible solid state transformation from the parent phase austenite to a new crystallographic structure called martensite.

Despite their advantages, fracture of NiTi instruments remains a concern in clinical practices. The failure of these instruments may occur by torsional overloading or flexural fatigue during the root canal preparation. Torsional failure occurs when the tip of the instrument is locked in the canal while the shaft continues to rotate, and it was reported as the most common cause of the separation of rotary NiTi instruments (Sattapan *et al.* 2000, Câmara *et al.* 2009). Flexural fatigue failure takes place when the instrument rotates inside a curved canal and is subjected to an excessive number of tensile-compressive strain cycles in the region of maximum canal curvature (Pruett *et al.* 1997, Bahia & Buono 2005, Câmara *et al.* 2009). Thus, torsional strength and flexibility are essential properties for instrument performance. These properties can be affected by several factors, such as size, taper, design, alloy chemical composition and thermomechanical processing (Kuhn & Jordan 2002, Bahia *et al.* 2005, Miyai *et al.* 2006). There is a strong relationship between the maximum torque that an instrument can withstand and its diameter (Peters & Barbakow 2002, Bahia *et al.* 2006). Moreover, the cross-sectional shape of the instruments affects the stress distribution pattern and the torsional and bending behaviour of the instrument (Turpin *et al.* 2000, Berutti *et al.* 2003, Melo *et al.* 2008).

Finite element analysis (FEA) has been increasingly used to study the mechanical behaviour of endodontic instruments under bending and torsion, as employed in several works (Berutti *et al.* 2003, Xu & Zheng 2006, Necchi *et al.* 2008, Kim *et al.* 2008, Kim HC *et al.* 2009, Kim TO *et al.* 2009, Petrini *et al.* 2009, Necchi *et al.* 2010, Zhang *et al.* 2010, He & Ni 2010, Lee *et al.* 2011, Montalvão & Alçada 2011, Gao *et al.* 2011). The main advantage of FEA is the possibility of assessing aspects of the mechanical behaviour of the instruments (such as stress distribution),

which are difficult to obtain in laboratory tests. Although some studies have been performed on the influence of instrument geometry on their flexibility and torsional strength (Xu & Zheng 2006, Kim *et al.* 2008, Kim HC *et al.* 2009, Kim TO *et al.* 2009, Zhang *et al.* 2010, Versluis *et al.* 2012), to the extent of our knowledge, no direct comparison between numerical and experimental results has been performed. Furthermore, most of the published reports (Xu & Zheng 2006, Kim TO *et al.* 2009, Zhang *et al.* 2010) do not stipulate criteria for the determination of the boundary conditions, such as the specification ISO 3630-1 (International Organization for Standardization 1992) for standard bending and torsion tests.

The aim of this study was to evaluate the flexibility and torsional strength of three commercially available instruments using FEA and compare the numerical results with those assessed by standard mechanical tests to confirm the reliability of the FEA models.

Materials and Methods

Three types of NiTi rotary instruments were selected for this study: size 25, .06 taper Mtwo (VDW, Munich, Germany), size 25, .06 taper RaCe (FKG Dentaire, La-Chaux-de-Fonds, Switzerland), and ProTaper F1 (Dentsply Maillefer, Ballaigues, Switzerland). In the following, the experimental tests and the finite element models are described.

Experimental tests

One group of instruments ($n = 12$ of each type) was tested for bending resistance according to specification ISO 3630-1, using the apparatus described in Viana *et al.* (2013). The instrument was fixed at 3 mm from the tip and then bent 45° with respect to its long axis while the bending force was recorded. Values of bending moment were obtained by multiplying the registered bending force by the distance between the point at which the force was applied and the fixed tip of the instrument.

Another group ($n = 12$ of each type) was tested in torsion until fracture, based on ISO 3630-1 specification, using the torsion machine described in Bahia *et al.* (2006). For this test, the instruments were also fixed at 3 mm from the tip, while the shaft's end was clamped and connected to a reversible geared motor. The instruments were rotated clockwise, and a specifically designed computer program provided a continuous recording of torque and angular deflection.

Computational analyses

The instruments were scanned by micro-CT (eXplore Locus SP, GE Healthcare, Waukesha, WI, USA) and the resultant images were further segmented (Mimics, Materialise HQ, Leuven, Belgium) to form the 3D geometric models, as shown in Fig. 1. The use of the micro-CT scanning is helpful to obtain an accurate model, including any geometrical characteristics of the actual instruments, thus eliminating the need of approximations in the building of the models. The shafts of the instruments were added to the models by using SolidWorks 2010 (three-dimensional computer-aided design software, Concord, MA, USA) to simplify the micro-CT scanning process. The models were meshed in ABAQUS 6.9-1 (SIMULIA, Providence, RI, USA) using ten-node modified quadratic tetrahedral elements. The final models consisted of 48,460 elements for Mtwo, 55,009 elements for RaCe and 51,184 elements for ProTaper F1.

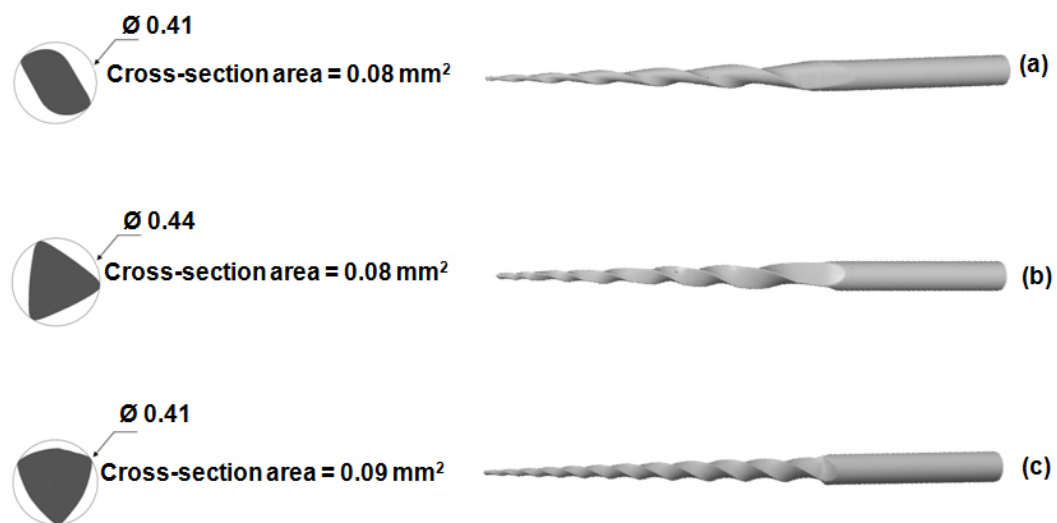
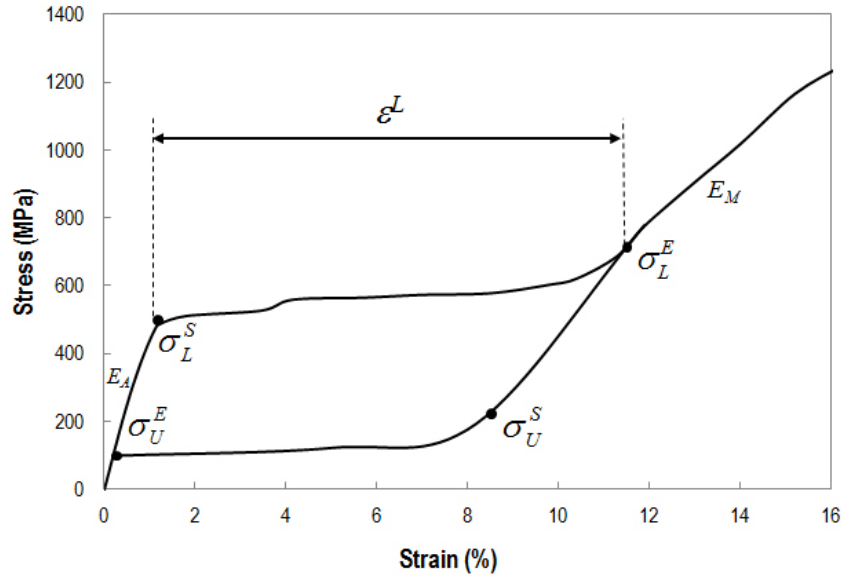


Figure 1: Longitudinal geometries and cross-sections at 3 mm from the tip of three NiTi instruments used in this study. (a) Mtwo 25/.06; (b) RaCe 25/.06; (c) ProTaper F1.

The superelastic behaviour of the NiTi alloys was described by means of a user-defined subroutine implemented in the ABAQUS code by Auricchio & Petrini (2004). The necessary parameters for the use of this subroutine and the definition of the material are shown in Fig. 2. The values of the mechanical parameters used in this work were derived from a stress-strain curve (also shown in Fig. 2) obtained as the average of 3 tensile tests performed on NiTi wires. The same material properties

were adopted for the three instruments to simplify the simulation process. Because the implemented subroutine is not able to describe the plastic behaviour of martensite, the numerical results were considered reliable only when stress values were lower than that for the end of the martensite elastic regime, established at 1,200 MPa (Fig. 2).



Parameter	Description	Value
E_A	Austenite elasticity	42,530 MPa
ν_A	Austenite Poisson's ratio	0.33
E_M	Martensite elasticity	12,828 MPa
ν_M	Martensite Poisson's ratio	0.33
ϵ^L	Transformation strain	10%
$(\delta\sigma/\delta T)_L$	$(\delta\sigma/\delta T)$ loading	6.7
σ_L^S	Start of transformation loading	492 MPa
σ_L^E	End of transformation loading	630 MPa
T_0	Reference temperature	22° C
$(\delta\sigma/\delta T)_U$	$(\delta\sigma/\delta T)$ unloading	6.7
σ_U^S	Start of transformation unloading	192 MPa
σ_U^E	End of transformation unloading	97 MPa
σ_{ME}^E	End of martensitic elastic regime	1,200 MPa

Figure 2: Stress-strain curve of a superelastic NiTi alloy and respective parameters used in the finite element model.

The boundary conditions described in Fig. 3 were imposed to simulate the behaviour

of the instruments under bending and torsion conditions according to specification ISO 3630-1:

- Bending resistance: The instruments were held 3 mm from the tip and the shafts were deflected until 45° of inclination was established.
- Torsion: the instruments were held at 3 mm from the tip and a clockwise torsional moment of 0.3 N.cm was applied. This value was chosen based on the criterion described above for avoiding the plastic regime of martensite to be reached. This limitation of the ABAQUS subroutine in describing the plastic deformation of martensite in superelastic NiTi alloys does not allow the simulation of the torsion test until failure. On the other side, applying a torsional moment instead of a fixed angular deflection makes the test closer to what happens in the clinic (Kim TO *et al.* 2009).

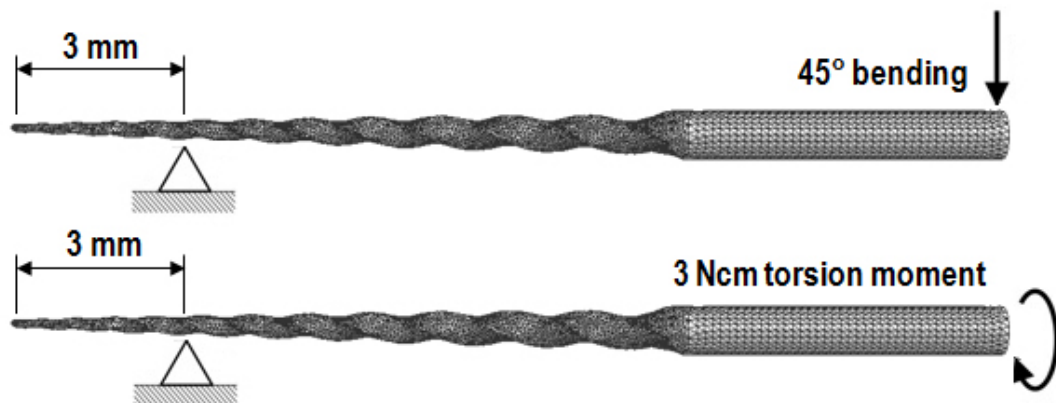


Figure 3: Boundary conditions used in the bending and torsion simulations (ProTaper F1 case).

Results

The von Mises stress distributions along the instruments under bending are shown in Fig. 4. A maximum stress of 1,185 MPa was found in the ProTaper F1 instrument, followed by 1,081 MPa in the RaCe instrument and 810 MPa in the Mtwo instrument. Comparisons between numerical and experimental results are shown in the moment-bending curves of Fig. 5. In general, a satisfactory agreement was obtained between the simulations and experiments. The curves in Fig. 5 also show that, among the instruments analyzed, ProTaper F1 exhibited the highest flexural stiffness, that is, the largest required moment to induce a bend of 45°.

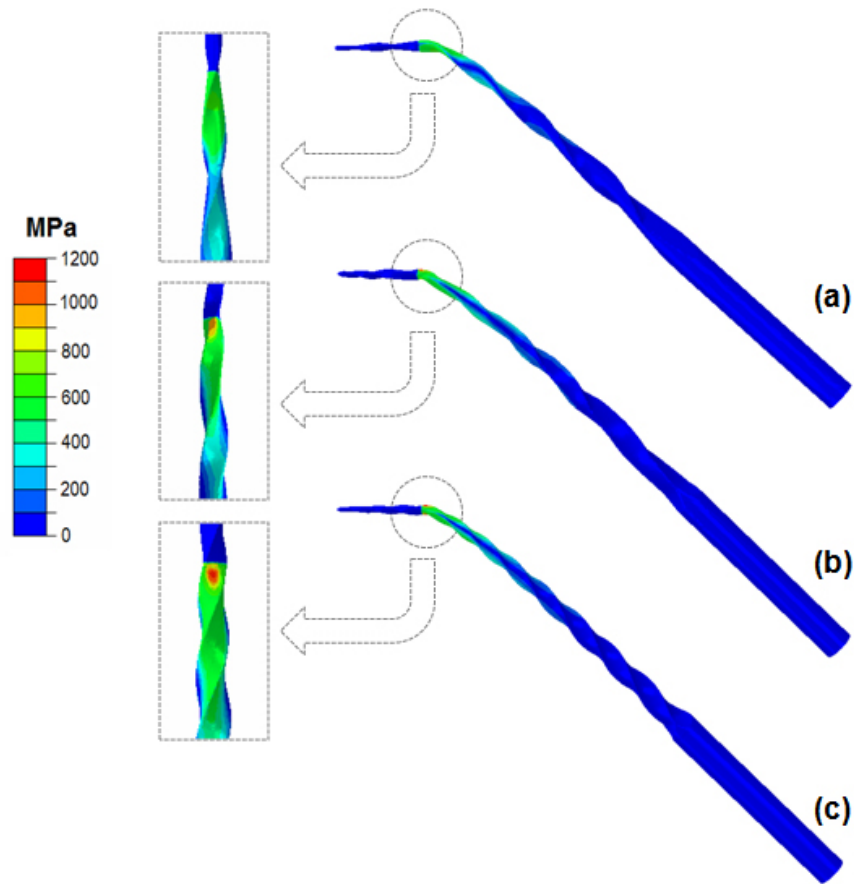


Figure 4: Von Mises stress distribution under bending. (a) Mtwo 25/.06; (b) RaCe 25/.06; (c) ProTaper F1.

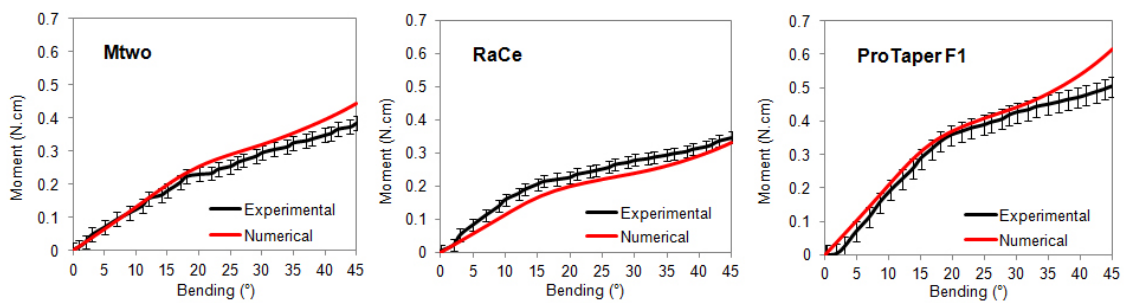


Figure 5: Comparison between calculated and experimental results under bending condition for the three instruments used in this study.

Under torsion, the calculated maximum stress values were quite similar (Fig. 6). The ProTaper F1 instrument showed the lowest value of maximum stress (520 MPa), followed by RaCe (531 MPa) and Mtwo (542 MPa) instruments. Comparisons between numerical and experimental results are shown in the rotation-moment curves of Fig. 7, and again a satisfactory agreement was obtained between simulation and experiments.

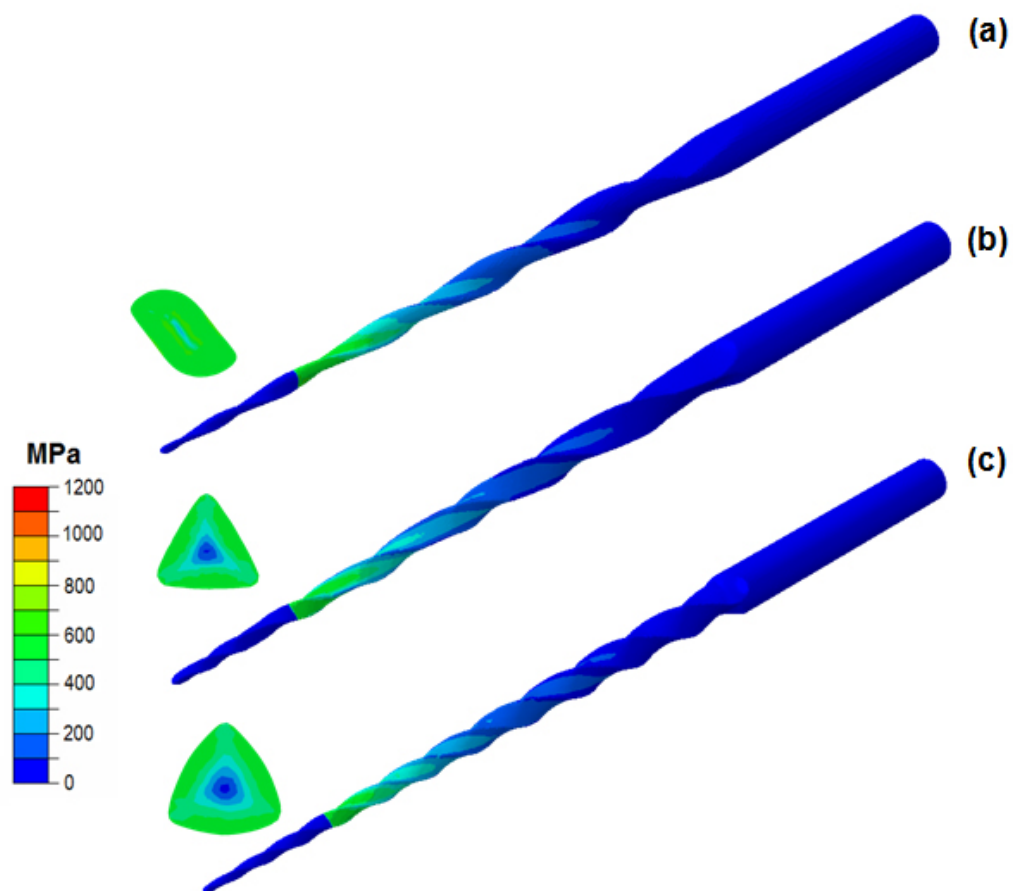


Figure 6: Von Mises stress distribution under torsion. (a) Mtwo 25/.06; (b) RaCe 25/.06; (c) ProTaper F1.

It is important to notice the difference in the number of points observed among the experimental curves of the torsion tests. It is explained by the recording procedure, in which the rotation speed and the rate of recording points were constant and consequently the number of points per degree of deflection. Thus, the instruments presenting the highest deflection under 0.3 N.cm will present the highest number of points in the experimental curve.

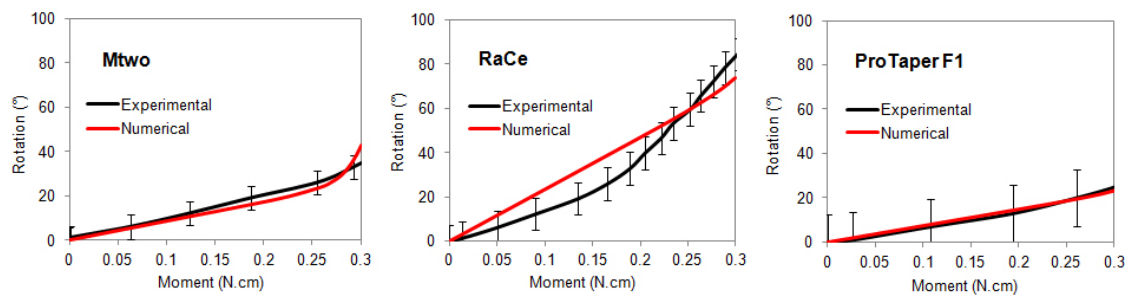


Figure 7: Comparison between calculated and experimental results under torsion condition for the three instruments used in this study.

Discussion

Recently, FEA has become an important tool in the study of the mechanical behaviour of endodontic instruments, especially for those made of NiTi alloys (Berutti *et al.* 2003, Xu & Zheng 2006, Necchi *et al.* 2008, Kim *et al.* 2008, Kim HC *et al.* 2009, Kim TO *et al.* 2009, Petrini *et al.* 2009, Necchi *et al.* 2010, Zhang *et al.* 2010, He & Ni 2010, Lee *et al.* 2011, Montalvão & Alçada 2011, Gao *et al.* 2011). Nevertheless, the application of this method for the study of these instruments still lacks baseline data. Before extracting information and results from a finite element model, it must be tested and proven to correspond to reality. Thus, the main contribution of this work was to demonstrate the reliability of the application of FEA as an alternative in the study of the mechanical behaviour of instruments by directly comparing numerical results and experimental data. The accuracy of the FEA results depends strictly on the developed computational model, and in this work the geometries of the instruments were generated by micro-CT scanning, which means that the minimum number of approximations was used to build the models. However, the same material (constitutive model) was adopted for all instruments, focusing the study on the influence of different geometries on the flexibility and torsional strength.

The FEA results for bending simulations showed that ProTaper F1 is the most flexure-resistant when compared with the other instruments. This flexural stiffness, in general, is related to the elastic modulus of the material and to the second moment of inertia of the part (Timoshenko & Goodier 1970). Because the material properties were the same for the three instruments and the ProTaper F1 instrument presents a slightly larger cross-sectional area (Fig. 1), it was expected that this instrument would be the least flexible. In other words, to reach the same amount of bending deflection during the shaping of curved canals, the clinician will have to impose more force on the instrument when working with ProTaper F1 than with Mtwo or

RaCe. The highest stress concentrations during the bending simulations were also found in ProTaper F1. This is the consequence of the fact that the ProTaper F1 instrument is the most flexure-resistant. However, Mtwo proved to be more flexure-resistant than RaCe, but its overall stresses were lower. Other works (Kim HC *et al.* 2009, Versluis *et al.* 2012) have already reported the same discrepancy between the flexural stiffness and the stress values, showing that no direct correlation can be made between them. Zhang *et al.* (2011) developed an equation that correlates the stress in bent endodontic instruments to several geometric parameters of the cross-section (such as the distance of a certain point to the neutral plane), confirming that the second moment of inertia is not sufficient to define which instrument, made of the same material, will present the highest stress concentrations under a certain value of flexural deflection. Recently, Versluis *et al.* (2012) noted that stress is not an instrument property, and it varies according to the bending orientation in the same way as the moment of inertia. This happens especially for instruments with a rectangular-shaped cross-section, which is the case for Mtwo instruments. Clinically, it means that the Mtwo instrument imposes less stable forces on canal walls (Xu & Zheng 2006, Versluis *et al.* 2012). On the other hand, the higher the stresses developed in the instrument, the smaller is its fatigue resistance. Thus, Mtwo can be expected to be the most fatigue resistant among the instruments analyzed here, a prediction that agrees with the experimental results of Lee *et al.* (2011).

The torsional rigidity is proportional to the polar moment of inertia of the part (Timoshenko & Goodier 1970). This explains the higher torsional rigidity of ProTaper F1 in comparison with the other instruments, indicating that it has less flexibility but a smaller risk of torsional failure inside the canal. Due to their slightly smaller cross-sectional areas, Mtwo and RaCe presented slightly higher stress levels when compared to the ProTaper F1 instrument.

Conclusions

Flexibility and torsional strength of different endodontic instruments were assessed through FEA and experimental standardized tests to compare numerical results with experimental data. A satisfactory agreement was found between them, confirming the great potential of the numerical method in the study of the mechanical behaviour of endodontic instruments and demonstrating the high quality of the model, which can be used in future studies. Based on the results found, ProTaper F1 instruments presented the highest resistance to torsion but also the lowest flexibility.

Acknowledgements

The authors deny any conflicts of interest related to this work. This work was supported by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Capes, Brasília, DF, Brazil.

References

Auricchio F, Petrini L (2004) A three-dimensional model describing stress temperature induced solid phase transformations: solution algorithm and boundary value problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **61**, 807-36.

Bahia MGA, Buono VTL (2005) Decrease in the fatigue resistance of nickel-titanium rotary instruments after clinical use in curved root canals. *Oral Surgery, Oral Medicine, Oral Pathology, Oral Radiology and Endodontology* **100**, 249-55.

Bahia MGA, Martins RC, Gonzalez BM, Buono VTL (2005) Physical and mechanical characterization and the influence of cyclic loading on the behaviour of nickel-titanium wires employed in the manufacture of rotary endodontic instruments. *International Endodontic Journal* **38**, 795-801.

Bahia MGA, Melo MCC, Buono VTL (2006) Influence of simulated clinical use on the torsional behavior of nickel-titanium rotary endodontic instruments. *Oral Surgery, Oral Medicine, Oral Pathology, Oral Radiology and Endodontology* **101**, 675-80.

Berutti E, Chiandussi G, Gaviglio I, Ibba A (2003) Comparative analysis of torsional and bending stresses in two mathematical models of nickel-titanium instruments: ProTaper versus ProFile. *Journal of Endodontics* **29**, 15-9.

Câmara AS, Martins RC, Viana ACD, Leonardo RT, Buono VTL, Bahia MGA (2009) Flexibility and torsional strength of ProTaper and ProTaper Universal rotary instruments assessed by mechanical tests. *Journal of Endodontics* **35**, 113-6.

Gao Y, Cheung GSP, Shen Y, Zhou X (2011) Mechanical behavior of ProTaper Universal F2 finishing file under various curvature conditions: a finite element analysis study. *Journal of Endodontics* **37**, 1446-50.

Glosson CR, Haller RH, Dove SB, del Rio CE (1995) A comparison of root canal preparations using Ni-Ti hand, Ni-Ti engine driven, and K-Flex endodontic instruments. *Journal of Endodontics* **21**, 146-51.

He R, Ni J (2010) Design improvement and failure reduction of endodontic files through finite element analysis: application to V-Taper file designs. *Journal of Endodontics* **36**, 1552-7.

International Organization for Standardization ISO 3630-1 (1992) *Dental root canal instruments-Part 1: files, reamers, barbed broaches, rasps, paste carriers, explorers and cotton broaches*. Switzerland: International Organization for Standardization.

Kim HC, Cheung GSP, Lee CJ, Kim BM, Park JK, Kang SI (2008) Comparison of forces generated during root canal shaping and residual stresses of three nickel-titanium rotary files by using a three-dimensional finite element analysis. *Journal of Endodontics* **34**, 743-7.

Kim HC, Kim HJ, Lee CJ, Kim BM, Park JK, Versluis A (2009) Mechanical response of nickel-titanium instruments with different cross-sectional designs during shaping of simulated curved canals. *International Endodontic Journal* **42**, 593-602.

Kim TO, Cheung GSP, Lee JM, Kim BM, Hur B, Kim HC (2009) Stress distribution of three NiTi rotary files under bending and torsional conditions using a mathematic analysis. *International Endodontic Journal* **42**, 14-21.

Kuhn G, Jordan L (2002) Fatigue and mechanical properties of nickel-titanium endodontic instruments. *Journal of Endodontics* **28**, 716-20.

Lee MH, Versluis A, Kim BM, Lee CJ, Hur B, Kim HC (2011) Correlation between experimental cyclic fatigue resistance and numerical stress analysis for nickel-titanium rotary files. *Journal of Endodontics* **37**, 1152-7.

Melo MCC, Pereira ESJ, Viana ACD, Fonseca AMA, Buono VTL, Bahia MGA (2008) Dimensional characterization and mechanical behaviour of K3 rotary instruments. *International Endodontic Journal* **41**, 329-38.

Miyai K, Ebihara A, Hayashi Y, Doi H, Suda H, Yoneyama T (2006) Influence of phase transformation on the torsional and bending properties of nickel-titanium rotary endodontic instruments. *International Endodontic Journal* **39**, 119-26.

Montalvão D, Alçada FS (2011) Numeric comparison of the static mechanical behavior between ProFile GT and ProFile GT series X rotary nickel-titanium files. *Journal of Endodontics* **37**, 1158-61.

Necchi S, Petrini L, Taschieri S, Migliavacca F (2010) A comparative computational analysis of the mechanical behavior of two nickel-titanium rotary endodontic instruments. *Journal of Endodontics* **36**, 1380-4.

Necchi S, Taschieri S, Petrini L, Migliavacca F (2008) Mechanical behaviour of nickel-titanium rotary endodontic instruments in simulated clinical conditions: a computational study. *International Endodontic Journal* **41**, 939-49.

Otsuka K, Ren X (2005) Physical metallurgy of Ti-Ni-based shape memory alloys. *Progress in Materials Science* **50**, 511-678.

Otsuka K, Wayman CM (1998) Shape Memory Alloys, 1st edn. Cambridge, UK: Cambridge University Press. Peters OA, Barbakow F (2002) Dynamic torque and apical forces of ProFile .04 rotary instruments during preparation of curved canals. *International Endodontic Journal* **35**, 379-89.

Petrini L, Necchi S, Taschieri S, Migliavacca F (2009) Numerical study on the influence of material characteristics on Ni-Ti endodontic instrument performance. *Journal of Materials Engineering and Performance* **18**, 631-37.

Pruett JP, Clement DJ, Carnes DL Jr (1997) Cyclic fatigue testing of nickel-titanium endodontic instruments. *Journal of Endodontics* **23**, 77-85.

Sattapan B, Palamara JEA, Messer HH (2000) Torque during canal instrumentation using rotary nickel-titanium files. *Journal of Endodontics* **26**, 156-60.

Timoshenko SP, Goodier JN (1970) *Theory of Elasticity*, New York: McGraw-Hill.

Turpin YL, Chagneau F, Vulcain JM (2000) Impact of two theoretical cross-sections

on torsional and bending stresses of nickel-titanium root canal instruments models. *Journal of Endodontics* **26**, 414-7.

Versluis A, Kim HC, Lee WC, Kim BM, Lee CJ (2012) Flexural stiffness and stress in nickel-titanium rotary files for various pitch and cross-sectional geometries. *Journal of Endodontics* **38**, 1399-403.

Viana ACD, Pereira ESJ, Bahia MGA, Buono VTL (2013) The influence of simulated clinical use on the flexibility of rotary ProTaper Universal, K3 and EndoSequence nickel-titanium instruments. *International Endodontic Journal*, Early View.

Walia H, Brantley WA, Gerstein H (1988) An initial investigation of the bending and torsional properties of nitinol root canal files. *Journal of Endodontics* **14**, 346-51.

Xu X, Zheng Y (2006) Comparative study of torsional and bending properties for six models of nickel-titanium root canal instruments with different cross-sections. *Journal of Endodontics* **32**, 372-5.

Zhang EW, Cheung GSP, Zheng YF (2011) A mathematical model for describing the mechanical behavior of root canal instruments. *International Endodontic Journal* **44**, 72-6.

Zhang EW, Cheung GSP, Zheng YF (2010) Influence of cross-sectional design and dimension on mechanical behavior of nickel-titanium instruments under torsion and bending: a numerical analysis. *Journal of Endodontics* **36**, 1394-8.

Elsevier Editorial System(tm) for Journal of Endodontics
Manuscript Draft

Manuscript Number:

Title: Comparison of the mechanical behavior between controlled memory and superelastic nickel-titanium files via finite element analysis

Article Type: Basic Research - Technology

Keywords: NiTi rotary files; Controlled Memory NiTi files; superelastic NiTi files; finite element analysis; mechanical behavior

Corresponding Author: Dr. Vicente Tadeu Lopes Buono, Ph.D.

Corresponding Author's Institution: Universidade Federal de Minas Gerais

First Author: Leandro A Santos, BE, MS

Order of Authors: Leandro A Santos, BE, MS; Maria Guiomar A Bahia, DDS, MS, PhD; Estevam B Las Casas, BE, MS, PhD; Vicente Tadeu Lopes Buono, Ph.D.

Manuscript Region of Origin: Latin & South America

Abstract: Introduction: The aim of this study was to evaluate the flexibility and torsional strength of a controlled memory (CM) NiTi file and compare its mechanical responses to those of a superelastic NiTi file with the same geometry, using finite element simulation. Methods: A commercially available instrument with a tip size of 30 and a 0.06 taper was selected for this study. The geometric model for finite element analysis was generated by micro-CT scanning, and the data for the constitutive model of controlled memory NiTi were obtained from the literature. The numerical analysis was performed in ABAQUS, with boundary conditions that were based on the ISO 3630-1 specification. Results: The CM NiTi file exhibited the least bending moment and maximum stress value (523 MPa) under 45° bending simulation. However, the least torsional strength was calculated for this same instrument. Conclusions: The higher flexibility and potential fatigue resistance of the CM NiTi files were confirmed, indicating that this new technology represents an improvement in the mechanical behavior of the rotary NiTi files.

Comparison of the mechanical behavior between controlled memory and superelastic nickel-titanium files via finite element analysis

Leandro de Arruda Santos, DDS, MS,^a Estevam Barbosa de Las Casas, DDS, MS, PhD,^b Maria Guiomar de Azevedo Bahia, DDS, MS, PhD,^c and Vicente Tadeu Lopes Buono, BS, MS, PhD^a

^aDepartment of Metallurgical and Materials Engineering, School of Engineering, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG, Brazil, ^b Department of Structural Engineering, School of Engineering, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG, Brazil ^cDepartment of Restorative Dentistry, Faculty of Dentistry, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG, Brazil.

Abstract

Introduction: The aim of this study was to evaluate the flexibility and torsional strength of a controlled memory (CM) NiTi file and compare its mechanical responses to those of a superelastic NiTi file with the same geometry, using finite element simulation. **Methods:** A commercially available instrument with a tip size of 30 and a 0.06 taper was selected for this study. The geometric model for finite element analysis was generated by micro-CT scanning, and the data for the constitutive model of controlled memory NiTi were obtained from the literature. The numerical analysis was performed in ABAQUS, with boundary conditions that were based on the ISO 3630-1 specification. **Results:** The CM NiTi file exhibited the least bending moment and maximum stress value (523 MPa) under 45° bending simulation. However, the least torsional strength was calculated for this same instrument. **Conclusions:** The higher flexibility and potential fatigue resistance of the CM NiTi files were confirmed, indicating that this new technology represents an improvement in the mechanical behavior of the rotary NiTi files.

Key Words: NiTi rotary files, Controlled Memory NiTi files, superelastic NiTi files, finite element analysis, mechanical behavior.

Introduction

The use of nickel-titanium (NiTi) alloys to manufacture root canal instruments is

one of the major innovations in endodontics. Due to the superelasticity (SE) of these alloys, NiTi files present several advantages compared with stainless steel files, such as higher flexibility, fewer canal aberrations and a shorter procedural duration (1, 2). Most rotary NiTi endodontic files are fabricated from near-equiatomic NiTi alloys, which contain approximately 55 wt% nickel (3). Small variations in the ratio of the two elements cause considerable changes in the transformation temperatures of the NiTi alloy (4). Of particular interest are the changes in the austenite finishing temperature (A_f), at which 100% of martensite is transformed to austenite upon heating. For superelastic NiTi files, A_f must be lower than the working temperature because large spontaneous shape recovery by SE only occurs above this temperature (4, 5). The transformation temperatures not only depend on the alloy composition but also may change because of the thermomechanical history of the material. Hou et al. (6) demonstrated that different manufacturing processes produced endodontic instruments with different A_f s and, consequently, different bending properties.

Despite their advantages, the fracture of rotary NiTi instruments in the root canal is still an important issue in endodontics. These instruments fracture for two main reasons: torsional overloading or flexural fatigue (7-10). To improve the fracture resistance of NiTi endodontic instruments, manufacturers have introduced new alloys with superior mechanical properties and have developed new manufacturing processes. Controlled memory (CM) NiTi wires (DS Dental, Johnson City, TN) represent one of these novelties in the manufacture of endodontic instruments. According to the manufacturers, CM NiTi wires are produced by a new technology to control the material's memory, resulting in a file with improved resistance to both flexural fatigue and torsional failure (11).

In a recent study, Zhou et al. (12) investigated the structure and mechanical properties of CM NiTi wires, demonstrating that the raw CM NiTi wires contained a slightly lower nickel content and a higher A_f compared with superelastic NiTi. They also concluded that the critical plateau stress and ultimate tensile strength of the CM wires were lower than those of superelastic wires, but with a maximum strain more than 3 times higher. Testarelli et al. (13) compared the bending properties of the HyFlex instruments (Coltene-Whaledent, Allstetten, Switzerland), which were marketed as CM NiTi files, with other commercially available NiTi rotary instruments. The results revealed that the Hyflex instruments were the most flexible, but the comparisons were made among instruments with different geometries, not considering the influence of the instrument's design on the results. This factor represents

one important limitation of the experimental tests because there is no geometrically similar file (manufactured with a traditional grinding process) that may be compared with the Hyflex CM files.

Finite element analysis (FEA) is an alternative for assessing the mechanical behavior of files, which is difficult to determine through experimental tests, as evidenced by previous studies (14-26). FEA allows evaluation of the influence of various materials on the mechanical properties of the same geometric model. Thus, differences resulting from the geometry of the instruments are eliminated, and a quantitative analysis can be performed. The aim of the present work was to contribute to the effort of applying FEA for developing new solutions for endodontic therapy, by using FEA for comparison between the mechanical responses of CM and superelastic NiTi files with the same geometry, under bending and torsional conditions.

Materials and Methods

The geometry of the HyFlex instrument with a tip size of 30 and a 0.06 taper was selected for this study. The instrument was scanned by micro-CT (eXplore Locus SP, GE Healthcare, Waukesha, WI, USA) to obtain a 3D geometric model. The file model was meshed in ABAQUS 6.9-1 (SIMULIA, Providence, RI, USA) using ten-node modified quadratic tetrahedral elements, resulting in a model consisting of 57,865 elements.

The necessary parameters to describe the constitutive model of the CM NiTi alloy were extracted from the stress-strain relationships that were determined by Zhou et al. (12) for the 48CM wire tested at room temperature. The parameters used to describe the model of the superelastic NiTi were derived from stress-strain tests (Figure 1A) performed on wires provided by Tulsa (Dentsply Tulsa Dental Specialties, Tulsa, OK, USA). A computational subroutine (27) implemented in ABAQUS was used to reproduce the complex thermomechanical behavior of the two NiTi alloys. Because this subroutine cannot describe the plastic behavior of martensite, the numerical results were considered reliable only when the stress values were below this regimen.

AISI 316L stainless steel was employed as the control material. The mechanical parameters were also extracted from a stress-strain curve (Fig. 1A) obtained in the laboratory. To describe this behavior, an elastoplastic model provided by the

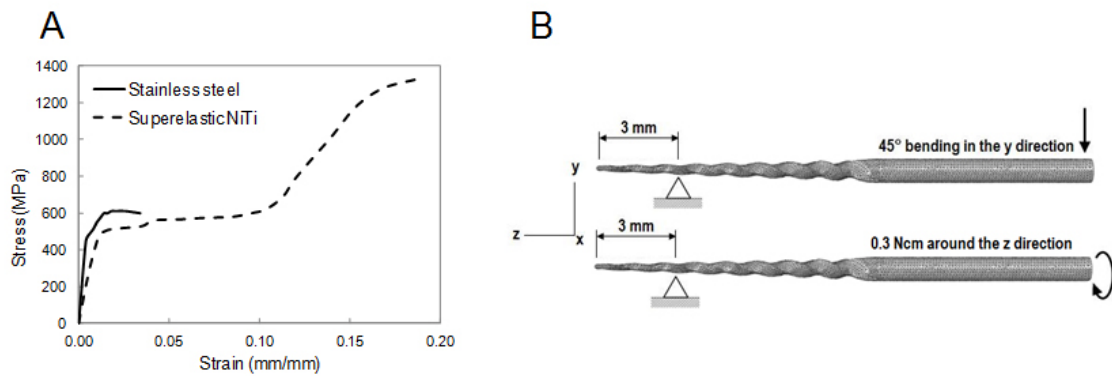


Figure 1. (A) Stress-strain curves for a superelastic NiTi wire and a AISI 316 stainless steel specimen. (B) Boundary conditions for the bending and torsion simulations.

computational code library was adopted.

The boundary conditions were imposed to simulate the behavior of the files under bending and torsional conditions, in compliance with the ISO 3630-1 specification (28). To test the bending resistance, the bending moment was calculated while the file was clamped 3 mm from the tip and the shaft was deflected until 45° of inclination. To evaluate the torsional resistance, the file was held at 3 mm from the tip, and a clockwise torsional moment of 0.3 N.cm was applied while the total rotation was calculated. The boundary conditions used in the both bending and torsional simulations are presented in Figure 1B.

Results

Illustrative results of the von Mises stress distribution along the files are depicted in Figure 2. Under bending, the maximum calculated stress was found in the superelastic NiTi instrument (1,122 MPa), followed by the stainless steel instrument (628 MPa) and, finally, the CM NiTi instrument (523 MPa). Under torsion, the maximum calculated stress was determined in the CM NiTi file (993 MPa), followed by the superelastic NiTi file (512 MPa) and the stainless steel file (470 MPa). The moment and displacement relationships are presented in Figure 3.

Discussion

Conventional rotary NiTi endodontic instruments that are used in clinical practice exhibit SE, which is a property associated with the presence of austenite in near-

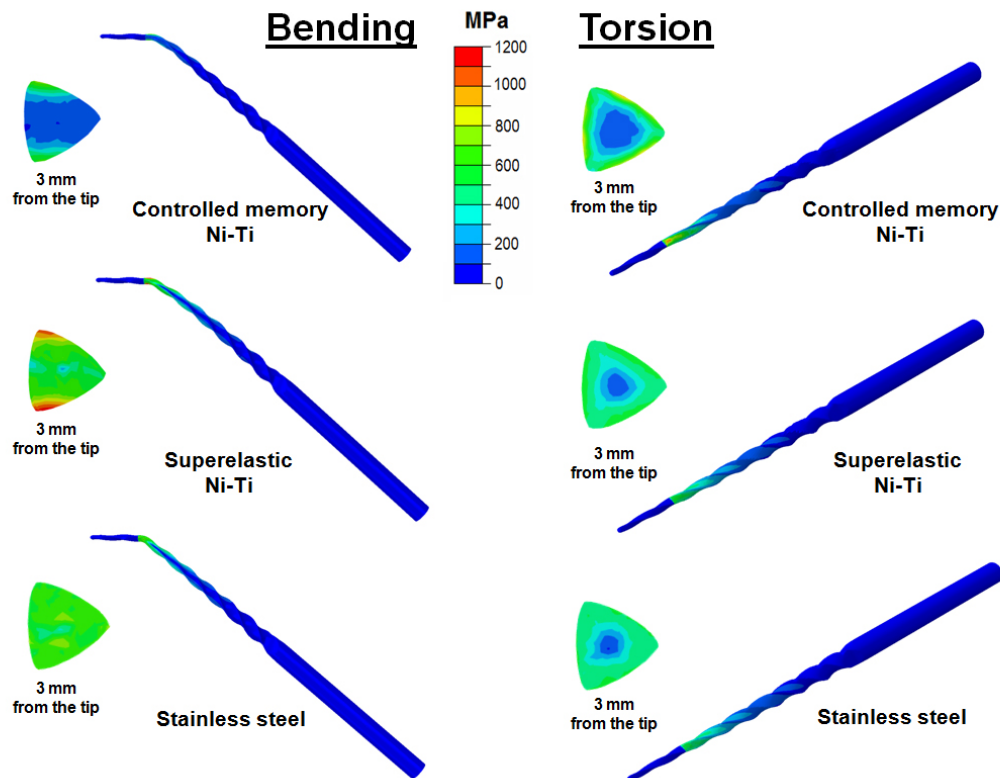


Figure 2. Stress distribution, under bending and torsion, along the CM NiTi, superelastic NiTi and stainless steel files and their cross-sections at 3 mm from the tip.

equiatomic NiTi alloys. When the file is subject to a load, austenite is transformed to stress-induced martensite (SIM). This phase is unstable at temperatures above A_f and thus returns to austenite by a reverse transformation when the load is removed and the strain is recovered. Therefore, the working temperature for conventional superelastic NiTi files must be above A_f . However, these characteristics are altered in CM NiTi wires, which constitute a new technological product exhibiting files that are more flexible and fatigue resistant. CM NiTi files do not present the rebound effect after unloading, and their original shape is restored only after autoclaving. The behavior of these files may be explained by the presence of stable martensite, meaning that the working temperature is below A_f . Stable martensite is known for exhibiting a shape-memory effect (SME), which is the capacity to recover the original shape by reverse transformation after heating the deformed martensite to temperatures above A_f (4, 5). This fact explains the necessity of autoclaving after using the CM NiTi files and reinforces the importance of the transformation temperatures in the mechanical behavior of the NiTi files. These temperatures are strictly related to the nickel content of the alloy and/or its thermomechanical history, which

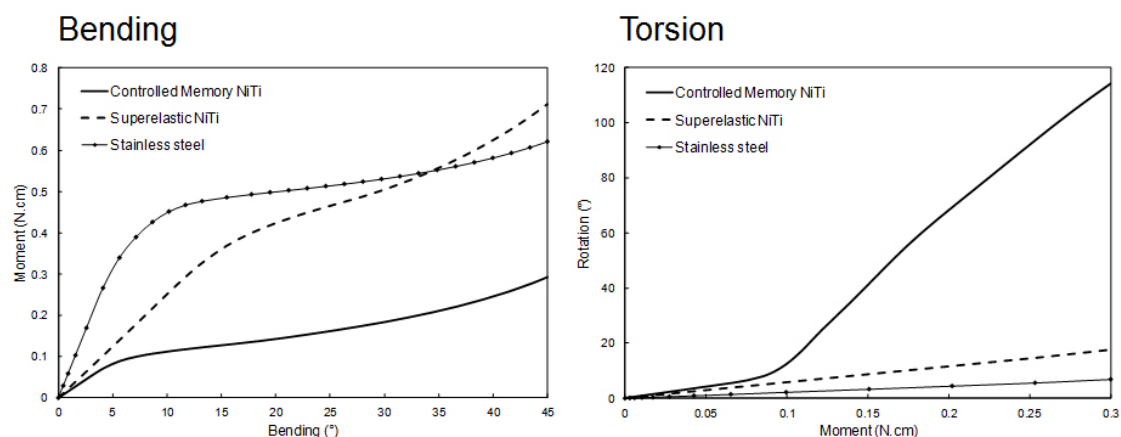


Figure 3. Deflection-moment curves for the CM NiTi, superelastic NiTi and stainless steel files under bending and torsion.

is unknown for the CM NiTi wires.

In the present study, FEA was used to compare the mechanical responses of CM NiTi files and conventional superelastic NiTi files, eliminating the possible influences of a given file's design, as the same geometrical model was used for both types of files. The results demonstrated the superior flexibility of the CM NiTi file over the superelastic NiTi file, thus confirming the results published elsewhere (13). The low stress values that were found in the CM NiTi file during the bending simulation also indicate a superior flexural fatigue resistance when the fatigue life is directly related to the stress levels attained during cyclic loading. Figueiredo et al. (29) reported that NiTi wires with a stable martensitic structure have a fatigue life 100 times higher than that of superelastic wires. This behavior is particularly explained by the crack propagation mechanism in martensite, which presents a large number of highly branched cracks that propagate very slowly. In superelastic NiTi, only a few fatigue cracks nucleate, and the propagation is faster.

It is established (4, 5) that martensite in near-equiatomic NiTi alloys has a lower critical plateau and ultimate tensile strength compared with austenite, as has been confirmed by Zhou et al. (12) using stress-strain curves for CM NiTi wires. Moreover, the transformation temperatures increase as the nickel content decreases. Thus, with the decrease of the nickel content in the NiTi alloy, the A_f increases, as well as does the tendency to obtain stable martensite at the working temperature. Furthermore, Zinelis et al. (3) demonstrated that Hyflex CM files have a lower percentage of nickel (52.1 %wt) than do conventional NiTi files. The exact thermomechanical treatment of CM wires remains unknown and lacks investigation. Nevertheless, it is

clear that this new technology represents an improvement in the flexural behavior and fatigue resistance.

Regarding the torsional strength, the CM NiTi file presented the highest deformations and stress levels compared with the superelastic NiTi and stainless steel files. This behavior is expected for files that have higher flexibilities, and it is important to note that CM NiTi exhibits a strain capacity more than 3 times that of superelastic NiTi. Thus, the CM NiTi file might perform satisfactorily under torsion.

In summary, the flexibility and torsional strength of a CM NiTi file were assessed using FEA to compare the mechanical responses with those of a conventional superelastic NiTi file. The CM NiTi file exhibited the lowest bending moment and stress level under a 45° bending simulation. Thus, the higher flexibility and potential fatigue resistance of the CM NiTi files were confirmed.

Acknowledgements

The authors thank Universidad de Zaragoza for the micro-CT scanning. This work was partially supported by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Capes, Brasília, DF, Brazil. The authors deny any conflicts of interest related to this study.

References

1. Walia H, Brantley WA, Gerstein H. An initial investigation of the bending and torsional properties of nitinol root canal files. *J Endod* 1988;14:346-51.
2. Glosson CR, Haller RH, Dove SB, del Rio CE. A comparison of root canal preparations using Ni-Ti hand, Ni-Ti engine driven, and K-Flex endodontic instruments. *J Endod* 1995;21:146-51.
3. Zinelis S, Eliades T, Eliades G. A metallurgical characterization of tem endodontic Ni-Ti instruments: assessing clinical relevance of shape memory and superelastic properties of Ni-Ti endodontic instruments. *Int Endod J* 2010;43:125-34.
4. Otsuka K, Wayman CM. Mechanism of shape memory effect and superelasticity. In: Otsuka K, Wayman CM, eds. *Shape Memory Materials*. 1st ed. Cambridge,

UK: Cambridge University Press; 1998.

5. Otsuka K, Ren X. Physical metallurgy of Ti-Ni-based shape memory alloys. *Prog Mater Sci* 2005;50:511-678.
6. Câmara AS, Martins RC, Viana ACD, Leonardo RT, Buono VTL, Bahia MGA. Flexibility and torsional strength of ProTaper and ProTaper Universal rotary instruments assessed by mechanical tests. *J Endod* 2009;35:113-6.
7. Sattapan B, Palamara JEA, Messer HH. Torque during canal instrumentation using rotary nickel-titanium files. *J Endod* 2000;26:156-60.
8. Pruett JP, Clement DJ, Carnes DL Jr. Cyclic fatigue testing of nickel-titanium endodontic instruments. *J Endod* 1997;23:77-85.
9. Bahia MGA, Buono VTL. Decrease in the fatigue resistance of nickel-titanium rotary instruments after clinical use in curved root canals. *Oral Surg Oral Med Oral Pathol Oral Radiol Endod* 2005;100:249-55.
10. Hou XM, Yahata Y, Hayashi Y, Ebihara A, Hanawa T, Suda H. Phase transformation behaviour and bending property of twisted nickel-titanium endodontic instruments. *Int Endod J* 2011;44:253-8.
11. CM Wire press release. Johnson City, TN: DS Dental; 2010.
12. Zhou H, Shen Y, Zheng W, Li L, Zheng Y, Haapasalo M. Mechanical properties of controlled memory and superelastic nickel-titanium wires used in the manufacture of rotary endodontic instruments. *J Endod* 2012;38:1535-40.
13. Testarelli L, Plotino G, Al-Sudani D, Vincenzi V, Giansiracusa A, Grande NM, Gambarini G. Bending properties of a new nickel-titanium alloy with a lower percent by weight of nickel. *J Endod* 2011;37:1293-5.
14. Berutti E, Chiandussi G, Gaviglio I, Ibba A. Comparative analysis of torsional and bending stresses in two mathematical models of nickel-titanium instruments: ProTaper versus ProFile. *J Endod* 2003;29:15-9.

15. Necchi S, Taschieri S, Petrini L, Migliavacca F. Mechanical behaviour of nickel-titanium rotary endodontic instruments in simulated clinical conditions: a computational study. *Int Endod J* 2008;41:939-49.
16. Kim HC, Kim HJ, Lee CJ, Kim BM, Park JK, Versluis A. Mechanical response of nickel-titanium instruments with different cross-sectional designs during shaping of simulated curved canals. *Int Endod J* 2009;42:593-602.
17. Kim TO, Cheung GSP, Lee JM, Kim BM, Hur B, Kim HC. Stress distribution of three NiTi rotary files under bending and torsional conditions using a mathematic analysis. *Int Endod J* 2009;42:14-21.
18. Petrini L, Necchi S, Taschieri S, Migliavacca F. Numerical study on the influence of material characteristics on Ni-Ti endodontic instrument performance. *J Mater Eng Perform* 2009;18:631-37.
19. Xu X, Zheng Y. Comparative study of torsional and bending properties for six models of nickel-titanium root canal instruments with different cross-sections. *J Endod* 2006;32:372-5.
20. Kim HC, Cheung GSP, Lee CJ, Kim BM, Park JK, Kang SI. Comparison of forces generated during root canal shaping and residual stresses of three nickel-titanium rotary files by using a three-dimensional finite element analysis. *J Endod* 2008;34:743-7.
21. Necchi S, Petrini L, Taschieri S, Migliavacca F. A comparative computational analysis of the mechanical behavior of two nickel-titanium rotary endodontic instruments. *J Endod* 2010;36:1380-4.
22. Zhang EW, Cheung GSP, Zheng YF. Influence of cross-sectional design and dimension on mechanical behavior of nickel-titanium instruments under torsion and bending: a numerical analysis. *J Endod* 2010;36:1394-8.
23. He R, Ni J. Design improvement and failure reduction of endodontic files through finite element analysis: application to V-Taper file designs. *J Endod* 2010;36:1552-1557.

-
24. Lee MH, Versluis A, Kim BM, Lee CJ, Hur B, Kim HC. Correlation between experimental cyclic fatigue resistance and numerical stress analysis for nickel-titanium rotary files. *J Endod* 2011;37:1152-7.
25. Montalvão D, Alçada FS. Numeric comparison of the static mechanical behavior between ProFile GT and ProFile GT series X rotary nickel-titanium files. *J Endod* 2011;37:1158-61.
26. Gao Y, Cheung GSP, Shen Y, Zhou X. Mechanical behavior of ProTaper Universal F2 finishing file under various curvature conditions: a finite element analysis study. *J Endod* 2011;37:1446-50.
27. Auricchio F, Petrini L. A three-dimensional model describing stress-temperature induced solid phase transformations: solution algorithm and boundary value problems. *Int J Numer Methods Eng* 2004;61:807-36.
28. International Organization for Standardization ISO 3630-1. Dental root canal instruments-Part 1: files, reamers, barbed broaches, rasps, paste carriers, explorers and cotton broaches. Switzerland: International Organization for Standardization, 1992.
29. Figueiredo AM, Modenesi P, Buono V. Low-cycle fatigue life of superelastic NiTi wires. *Int J Fatigue* 2009;31:751-8.