

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

Tese de Doutorado

Comportamento mecânico de instrumentos endodônticos de NiTi:
uma abordagem numérica

Autor: Suzanny Cristina Soares Martins

Orientador: Leandro de Arruda Santos

Março/2020

Suzanny Cristina Soares Martins

Comportamento mecânico de instrumentos endodônticos de NiTi:
uma abordagem numérica

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

Área de Concentração: Metalurgia Física

Orientador: Leandro de Arruda Santos

Belo Horizonte
Universidade Federal de Minas Gerais
Escola de Engenharia
2020


M386c	<p>Martins, Suzanny Cristina Soares. Comportamento mecânico de instrumentos endodônticos de NiTi [recurso eletrônico] : uma abordagem numérica / Suzanny Cristina Soares Martins. - 2020. 1 recurso online (xi, 73 f. : il., color.) : pdf. Orientador: Leandro de Arruda Santos.</p> <p>Tese (doutorado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.</p> <p>Inclui bibliografia. Exigências do sistema: Adobe Acrobat Reader.</p> <p>1. Engenharia metalúrgica - Teses. 2. Metalurgia física - Teses. 3. Endodontia - Instrumentos - Teses. 4. Ligas de níquel-titânio - Teses. 5. Metais - Tratamento térmico - Teses. 6. Método dos elementos finitos - Teses. I. Santos, Leandro de Arruda. II. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. III. Título.</p>
	CDU: 669(043)




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

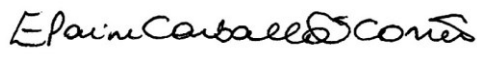


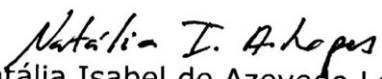
Tese intitulada "**Comportamento Mecânico de Instrumentos Endodônticos de NiTi: Uma Abordagem Numérica**", área de concentração: Metalurgia Física, apresentada pela candidata **Suzanny Cristina Soares Martins**, para obtenção do grau de Doutora em Engenharia Metalúrgica, Materiais e de Minas, aprovada pela comissão examinadora constituída pelos seguintes membros:

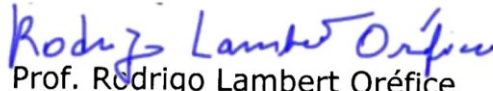

Prof. Leandro de Arruda Santos
Orientador - Dr. (UFMG)


Prof. Vicente Tadeu Lopes Buono
Dr. (UFMG)


Profª Ana Cecília Diniz Viana
Drª (UFMG)


Profª Elaine Carballo Siqueira Corrêa
Drª (CEFET/MG)


Natália Isabel de Azevedo Lopes
Drª (SENAI/MG)


Prof. Rodrigo Lambert Oréfice
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Metalúrgica, Materiais e de Minas/UFMG

Belo Horizonte, 06 de março de 2020

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	vi
LISTA DE TABELAS	viii
LISTA DE NOTAÇÕES	ix
RESUMO	xi
ABSTRACT	xiii
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Relevância da Pesquisa	1
1.2 Objetivos	3
1.3 Estrutura da Tese	4
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1 Ligas NiTi	5
<i>2.1.1 Sistema NiTi</i>	<i>9</i>
<i>2.1.2 Transformação martensítica nas ligas NiTi</i>	<i>12</i>
<i>2.1.3 Efeito memória de forma e superelasticidade</i>	<i>19</i>
<i>2.1.4 Comportamento termomecânico das ligas NiTi</i>	<i>22</i>
<i>2.1.5 Efeito do tratamento termomecânico nas ligas NiTi</i>	<i>25</i>
2.2 Instrumentos Endodônticos	27
2.3 Referências	30
3 INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO E DA GEOMETRIA	34
3.1 Introduction	36
3.2 Materials and Methods	37
3.3 Results	40
3.4 Discussion	45
3.5 Conclusions	48
3.6 References	49
4 EFEITO DA EXCENTRICIDADE GEOMÉTRICA	54
4.1 Introduction	56
4.2 Materials and Methods	57
4.3 Results	61

4.4 Discussion.....	65
4.5 Conclusions.....	67
4.6 References.....	68
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	73

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Evolução histórica das descobertas das ligas com memória de forma ⁵	5
Figura 2.2 – Curvas tensão-deformação da liga NiTi superelástica, do aço inoxidável, do osso e do tendão ¹¹	7
Figura 2.3 – Diagrama de equilíbrio de fases do sistema NiTi ⁷	9
Figura 2.4 – Diagrama TTT de uma liga Ti-52at.%Ni ⁷	10
Figura 2.5 – Modelo simplificado da transformação martensítica ⁷	13
Figura 2.6 – Representação esquemática dos tipos de deformação invariante de rede na TM ¹	14
Figura 2.7 – Representação esquemática dos dois mecanismos de deformação inelástica recuperável ²⁰	15
Figura 2.8 – Representação esquemática da reorientação e demaclação da martensita sob tensão ²¹	15
Figura 2.9 – Representação esquemática das estruturas cristalinas e das microestruturas das principais fases presentes em uma liga NiTi ⁵	17
Figura 2.10 – Diagrama esquemático do EMF e da SE em relação às tensões críticas para indução de martensita e de escorregamento em função da temperatura ⁷	19
Figura 2.11 – Representação esquemática do efeito memória de forma e da superelasticidade ¹⁹	21
Figura 2.12 – Diagrama tensão-deformação-temperatura de uma liga NiTi ²⁵	21
Figura 2.13 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi no estado martensítico ²⁶ ..	23
Figura 2.14 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi no estado martensítico com fase R ²⁶	23
Figura 2.15 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi no estado austenítico ²⁶ ...	24
Figura 2.16 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi acima da temperatura Md ²⁶	25
Figura 2.17 – Geometria de um instrumento endodôntico rotatório modelo <i>ProTaper Universal F1</i> ³⁵	28

Figure 3.1 – Cross-section and geometric model of the (a) X1 and (b) S2 files	38
Figure 3.2 – Loading conditions for (a) the bending and (b) torsion test.....	40
Figure 3.3 – Numerical moment-bending curves	40
Figure 3.4 – The von Mises stress distribution along with the body instruments under bending.....	41
Figure 3.5 – The von Mises stress distribution in the cross-section at 3 mm from the tip under bending	42
Figure 3.6 – Mean stress curves under bending.....	42
Figure 3.7 – Numerical displacement-torque curves	43
Figure 3.8 – The von Mises stress distribution along with the body instruments under torsion	44
Figure 3.9 – The von Mises stress distribution in the cross-section at 3 mm from the tip under torsion	44
Figure 3.10 – Mean stress curves under torsion	45
Figure 4.1 – Cross-section and geometric model of the analyzed files	58
Figure 4.2 – Schematic representation of the diameter measurement at each millimeter and pitch length.....	59
Figure 4.3 – Loading conditions for the (a) bending and (b) torsion test.....	61
Figure 4.4 – Numerical moment-bending curves	62
Figure 4.5 – Numerical displacement-torque curves under torsional loading.....	63
Figure 4.6 – The von Mises stress distribution along the instruments	63
Figure 4.7 – The von Mises stress distribution in the cross-sections at 3 mm from the tip	64
Figure 4.8 – Numerical angle-stress curves.....	65

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Comparação entre algumas propriedades das ligas NiTi aproximadamente equiatômicas e do aço inoxidável austenítico ¹⁴	8
Tabela 2.2 – Comparação entre algumas propriedades das ligas NiTi em seu estado martensítico e austenítico ²	16
Table 3.1 – Parameters used to describe the constitutive model for simulation.....	39
Table 4.1 – Parameters used to describe the constitutive model for simulation.....	60
Table 4.2 – Maximum bending stress for all instruments at 45° displacement	65

LISTA DE NOTAÇÕES

3D	<i>Three-dimensional</i>
A	<i>Austenite</i>
Af	Temperatura de fim da transformação reversa
AR	<i>As received</i>
As	Temperatura de início da transformação reversa
CAD	<i>Computer-assisted design</i>
Csa	<i>Similar concentric file with the same cross-sectional area</i>
Csd	<i>Similar concentric file with the same functional diameter</i>
d _f	<i>Functional diameter</i>
EMF	Efeito memória de forma
FEA	<i>Finite element analysis</i>
ISO	<i>International Organization for Standardization</i>
LMF	Ligas com memória de forma
M	<i>Martensite</i>
Md	Temperatura máxima em que a indução de martensita por tensão é possível
Mf	Temperatura de fim da transformação martensítica
MIT	Martensita induzida por tensão
Ms	Temperatura de início da transformação martensítica
R	<i>R-phase</i>
Rf	Temperatura de fim da transformação de fase R
Rs	Temperatura de início da transformação de fase R

S2	<i>ProTaper Universal S2 file</i>
S2_350	<i>S2 file with the treatment conditions at 350 °C</i>
S2_450	<i>S2 file with the treatment conditions at 450 °C</i>
S2_AR	<i>S2 file with the as received condition</i>
SE	Superelasticidade
SMA	<i>Shape memory alloys</i>
Td	Temperatura de deformação
TM	Transformação martensítica
TR	Transformação reversa
TTT	Tempo-temperatura-transformação
X1	<i>ProTaper Next X1 file</i>
X1_350	<i>X1 file with the treatment conditions at 350 °C</i>
X1_450	<i>X1 file with the treatment conditions at 450 °C</i>
X1_AR	<i>X1 file with the as received condition</i>
X1Csa	<i>X1 concentric file with the same cross-sectional area</i>
X1Csd	<i>X1 concentric file with the same functional diameter</i>
X2	<i>ProTaper Next X2 file</i>
X2Csa	<i>X2 concentric file with the same cross-sectional area</i>
X2Csd	<i>X2 concentric file with the same functional diameter</i>

RESUMO

Instrumentos endodônticos de níquel-titânio (NiTi) se sobressaem em relação aos de aço inoxidável devido às propriedades de memória de forma e superelasticidade, além de superior comportamento mecânico, biocompatibilidade, resistência à corrosão e elevada ductilidade. A grande flexibilidade das limas endodônticas possibilita a correta formatação de canais radiculares. Em limas NiTi, essa flexibilidade está relacionada com o comportamento superelástico da liga, que depende das fases cristalográficas no material, e com a geometria desses instrumentos. Limas NiTi devem ser flexíveis o suficiente para evitar danos ao canal dentário, mas também necessitam de resistência mecânica elevada para promover eficiência de corte no canal. Tais propriedades podem ser aprimoradas por modificações no design, por tratamentos térmicos e pelo processo de fabricação. Dentro desse contexto, o objetivo deste trabalho é avaliar, pelo método de elementos finitos, as alterações no comportamento mecânico de instrumentos endodônticos rotatórios em função de diferentes tratamentos térmicos e de variações geométricas. Para isso, verificou-se os efeitos que a excentricidade da seção transversal provoca em limas NiTi e comparou-se dois instrumentos geometricamente diferentes aplicando três conjuntos de propriedades mecânicas obtidas por tratamentos térmicos. Foram realizados carregamentos de flexão e torção nas limas, por meio de elementos finitos, e verificadas a flexibilidade, a rigidez torcional e a distribuição de tensão. Os resultados mostraram que a excentricidade geométrica não aumenta a flexibilidade dos instrumentos, mas altera o padrão de tensões, diminuindo a tensão máxima atingida. Como consequência, tem-se um aumento da vida em fadiga dos instrumentos, devido aos menores níveis de tensão e, ainda, a geometria excêntrica possibilita formatar um maior diâmetro do canal, utilizando menor área da seção transversal. A comparação entre dois designs evidenciou que a área da seção transversal afeta diretamente a flexibilidade e a rigidez torcional. Enquanto a distribuição de tensão se relaciona com outros fatores geométricos, como números de pitch, forma e excentricidade da seção transversal. Com relação às propriedades obtidas dos tratamentos térmicos distintos, constatou-se que a obtenção de fase R promove maior nível de flexibilidade e menor nível de tensão às limas que o NiTi superelástico.

Palavras-chave: instrumentos endodônticos; método dos elementos finitos; ligas NiTi; comportamento mecânico; tratamento térmico.

ABSTRACT

Nickel-titanium (NiTi) rotary instruments are better than stainless steel instruments due to the superelasticity and the shape memory properties. Also, NiTi has superior mechanical behavior, biocompatibility, corrosion resistance, and high ductility. The great flexibility of endodontic files allows the correct shaping of root canals. Flexibility in NiTi files is related to superelasticity, which depends on crystallographic phases present and geometry of these instruments. NiTi files must be flexible to prevent damage to the dental canal, but they also need high mechanical strength to promote cutting efficiency. Such properties can be enhanced by changes in design, heat treatments, and the manufacturing process. Within this context, the objective of this work is to evaluate, by the finite element method, the changes in the mechanical behavior of rotary endodontic instruments as a result of different heat treatments and geometric variations. For this, it was verified the effects that off-centered cross-section causes in NiTi files and two geometrically different instruments were compared applying three heat treatment conditions. Bending and torsion loads were performed on the files, using finite elements, and flexibility, torsional stiffness, and stress distribution were checked. The results showed that the geometric eccentricity does not increase the flexibility of the instruments, but alters the stress pattern, decreasing the maximum stress reached. There is an increase in fatigue life due to the lower stress, and the eccentric geometry makes it possible to format larger canals using a smaller cross-section area. The comparison between the two designs showed that the cross-sectional area directly affects the flexibility and torsional stiffness. The stress distribution is related to other geometric factors, such as pitch numbers, shape, and eccentricity of the cross-section. About heat treatments, it was found that obtaining the R phase promotes a higher level of flexibility and a lower level of stress to files than the superelastic NiTi.

Keywords: endodontic instruments; finite element method; NiTi alloys; mechanical behavior; heat treatment.

1 INTRODUÇÃO

1.1 Relevância da Pesquisa

No âmbito endodôntico, as ligas NiTi vêm se destacando com relação à sua aplicabilidade, principalmente em instrumentos rotatórios. Esses materiais, em comparação com o aço inoxidável, exibem características mais adequadas e vantajosas para a utilização das limas. Isso se deve, em especial, às propriedades de superelasticidade e efeito memória de forma que as ligas NiTi possuem. O efeito memória de forma se refere à capacidade de recuperação do formato original quando aquecido acima de determinada temperatura crítica, após uma deformação aparentemente permanente, também chamada de deformação pseudoplástica. Quanto à superelasticidade, é considerada um tipo de variação do efeito memória de forma, no qual o material, após ser submetido a grandes níveis de deformação, é capaz de recuperar sua forma com a remoção do carregamento aplicado, de forma isotérmica. Este efeito também é chamado de pseudoelasticidade. Dependendo da temperatura, ambos os fenômenos podem ocorrer em um mesmo material e se relacionam com as transformações de fase reversíveis no estado sólido, que são as transformações martensíticas.

As ligas NiTi ainda apresentam outras vantagens como elevada resistência à corrosão, excelente biocompatibilidade e alta ductilidade. No entanto, apesar das proeminentes propriedades do NiTi, limas confeccionadas com tais ligas podem fraturar de forma inesperada durante sua utilização. Diversos estudos relatam que a ocorrência dessas fraturas está relacionada com a fadiga devido à flexão ou em função da sobrecarga aplicada por esforço de torção durante a formatação de canais, sobretudo em canais de curvatura acentuada. A sobrecarga por torção pode acontecer quando alguma parte do instrumento se prende às paredes do canal dentário, impedindo a rotação da lima imposta pelo motor. Já a fadiga por flexão é decorrente do alto ciclo de tração e compressão quando a lima gira no interior de um canal curvo.

Pesquisadores e fabricantes incorporaram novas técnicas de fabricação nos instrumentos endodônticos NiTi para suprimir a possibilidade de fratura, melhorando suas

propriedades físicas e mecânicas. Entre essas novas técnicas, os tratamentos termomecânicos e as novas formas geométricas são as principais soluções investidas na melhoria do desempenho clínico. Como esses dois parâmetros exercem papel essencial no comportamento das limas, o presente estudo buscou associar os efeitos das alterações de propriedades devido a tratamento térmicos e das variações geométricas às alterações mecânicas em instrumentos endodônticos. Esta análise foi feita pelo método dos elementos finitos, utilizando dados obtidos experimentalmente de outros estudos. Os testes por simulação permitiram averiguar o desempenho de instrumentos endodônticos distinguindo as influências devido à geometria ou tratamento térmico. Além disso, o método dos elementos finitos possibilitou analisar dados que, em muitos casos, são inacessíveis em testes experimentais, tais como a distribuição da tensão ao longo do objeto de análise.

1.2 Objetivos

Este trabalho teve como objetivo geral avaliar, por meio do método dos elementos finitos, a influência de variações geométricas e alterações nas propriedades devido a diferentes tratamentos térmicos sobre o comportamento mecânicos de limas NiTi. Para isso, os seguintes objetivos específicos foram estabelecidos:

- i. Obter modelos geométricos 3D a partir de instrumentos comerciais já existentes;
- ii. Avaliar o comportamento mecânico e a distribuição de tensões de instrumentos endodônticos NiTi, através de condições de torção e flexão;
- iii. Verificar os efeitos isolados da excentricidade da seção transversal no comportamento mecânico de limas;
- iv. Analisar as influências devidas às variações de propriedades, decorrentes de tratamentos térmicos em ligas NiTi, mantendo a geometria da lima constante;
- v. Averiguar as mudanças no comportamento mecânico de instrumentos endodônticos oriundas de modificações geométricas, comparando designs diferentes e mantendo um único material.

1.3 Estrutura da Tese

A presente tese é dividida em cinco capítulos. No primeiro capítulo são apresentadas as justificativas para o desenvolvimento do estudo juntamente com os objetivos. No capítulo dois é realizada uma breve revisão bibliográfica referente às ligas NiTi, suas aplicações e instrumentos endodônticos. Os capítulos três e quatro são constituídos dos trabalhos elaborados durante a realização do doutorado, na forma em que foram submetidos. Ao final, no capítulo cinco são apresentadas as considerações finais, incluindo as principais conclusões, que integram os resultados dos trabalhos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Ligas NiTi

As ligas níquel-titânio (NiTi) fazem parte de um grupo de materiais cuja característica principal é o efeito memória de forma (EMF). Essas ligas são, portanto, designadas ligas com memória de forma (LMF) ¹. O efeito memória de forma se relaciona com a capacidade de o material recuperar grande quantidade de deformação inelástica após aquecimento a determinada temperatura ^{2,3}. Tal fenômeno foi inicialmente descoberto em materiais poliméricos de aplicação odontológica por Arne Ölander em 1932. Posteriormente, Chang e Read verificaram a ocorrência do EMF em ligas metálicas de ouro e cádmio e, a partir de então, uma ampla gama de LMF vem sendo descoberta, conforme mostra a Figura 2.1 ^{4,5}. Não obstante, apesar de haver um grande número de LMF, muitas dessas ligas exibem suas propriedades somente na condição de monocristal, além de apresentarem alto custo para sua obtenção, o que inviabiliza sua utilização em aplicações comerciais ⁵. Dessa forma, dentre as diversas LMF, apenas as ligas a base de cobre, a base de ferro e ligas NiTi são utilizadas na prática de forma viável e comercialmente ¹.

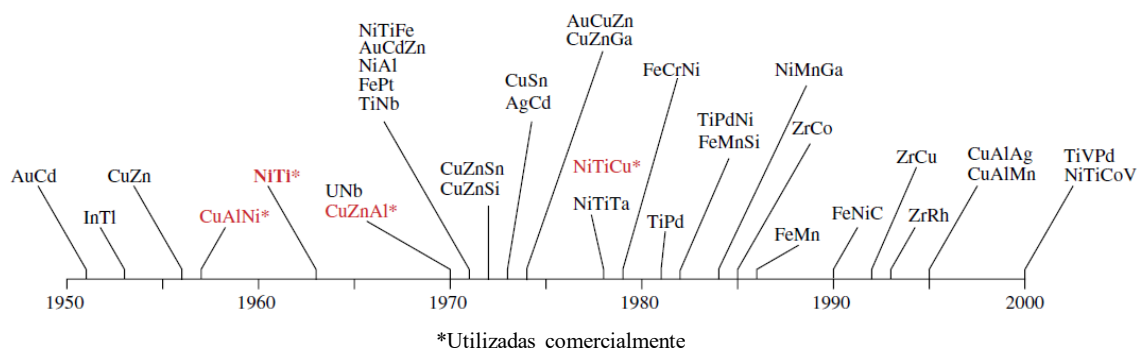


Figura 2.1 – Evolução histórica das descobertas das ligas com memória de forma ⁵

As LMF, além de apresentarem o efeito memória de forma, também exibem outro comportamento característico que é a superelasticidade (SE). A SE, também conhecida como pseudoelasticidade, é a capacidade de o material retomar sua forma inicial, após certo nível de deformação, de maneira espontânea quando o carregamento é retirado ^{3,6}.

A relevância das LMF somente ocorreu a partir de 1962, quando Willian Buehler e Frederick Wang descobriram o EMF em ligas NiTi aproximadamente equiatômicas, no *Naval Ordnance Laboratory* (EUA). Essas ligas com memória de forma de níquel e titânio, nomeadas como Nitinol, em referência ao laboratório de origem, se destacaram por exibirem excelente EMF em sua condição policristalina, alta capacidade de recuperação quando deformadas em níveis apreciáveis e, ainda, gerarem força significativa durante a recuperação da forma ^{4,5}.

Comparando as ligas NiTi com as demais LMF comerciais, a base de cobre e de ferro, estas últimas exibem favoravelmente o baixo custo de obtenção, no entanto, apresentam instabilidade em suas propriedades, inferior desempenho termomecânico e, ainda, possuem certo nível de fragilidade ^{1,4}. Já as ligas NiTi, apesar do seu custo oneroso de fabricação, dispõem de melhores fenômenos de superelasticidade e memória de forma associados a excelente comportamento mecânico, no qual se evidenciam elevada resistência à corrosão, alta biocompatibilidade e boa ductilidade ^{1,5}.

A combinação das propriedades mecânicas e químicas exibidas pelas ligas NiTi faz com que esse material seja preferível para as mais diferentes aplicações e em diversas áreas que englobam desde a medicina até a engenharia aeroespacial ⁴. Essas ligas têm maior uso no campo médico, onde são principalmente utilizadas como *stents* cardiovasculares, no sistema gastrointestinal, no trato renal, próteses, fios ortodônticos e limas endodônticas ². Mas, também, esse metal desempenha importantes funções além da área médica, atuando como *flaps* de aeronaves, amortecedores estruturais, luvas para acoplamento de tubulações, antenas, dentre outros ⁷⁻⁹.

Mesmo apresentando alto custo em função da sua produção, as ligas NiTi vêm sendo cada vez mais utilizadas especialmente no campo da medicina e odontologia e, de forma notória, substituindo o aço inoxidável principalmente nas aplicações de fios ortodônticos e limas endodônticas ¹⁰. Tal fato se deve às características de biocompatibilidade e biofuncionalidade exibidas pela liga NiTi, além das demais propriedades previamente mencionadas, que satisfazem importantes critérios para seu amplo emprego na medicina. Biofuncionalidade é a capacidade que o material possui de desempenhar a função em que

foi projetado por determinado período, enquanto biocompatibilidade se refere à propriedade do material não reagir de modo desfavorável com o organismo ¹.

Acrescido a essas atrativas características, uma liga NiTi superelástica apresenta ainda propriedades mecânicas que se aproximam bem mais a de alguns tecidos biológicos que o aço inoxidável, como mostrado na Figura 2.2 ^{2,11}. Também, conforme verificado na Tabela 2.1 pela comparação das propriedades do aço inoxidável e das ligas NiTi, estas apresentam maior flexibilidade que o aço inoxidável. Esses são alguns fatores que justificam a substituição do aço inoxidável pelas ligas NiTi, tendo como exemplo instrumentos para formatação de canal em dente (limas endodônticas), os quais tradicionalmente eram confeccionados em aço inoxidável e, por serem bastante rígidos, tendem a alterar o eixo original do canal preparado. Por outro lado, limas NiTi apresentam maior flexibilidade e, conseqüentemente, promovem menores distorções ao canal dentário ¹⁰.

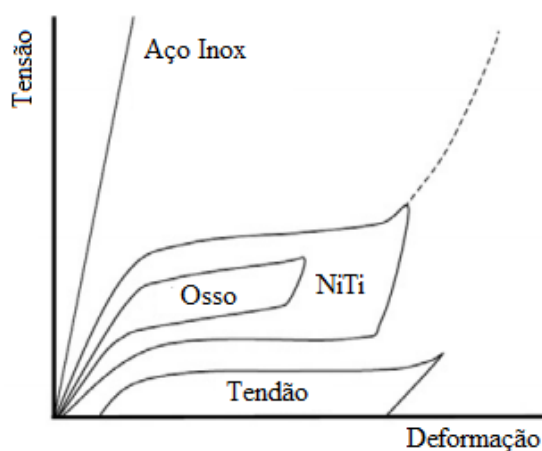


Figura 2.2 – Curvas tensão-deformação da liga NiTi superelástica, do aço inoxidável, do osso e do tendão ¹¹

Como mencionado previamente, o processo de fabricação das ligas NiTi é consideravelmente mais caro quando comparado às outras LMF. De forma genérica, tal processo consiste nas seguintes etapas: fundição; forjamento e laminação a quente; trefilação; conformação; e tratamento de memória de forma ¹. Não obstante, certas particularidades em cada uma dessas etapas eleva o custo de obtenção da liga. Primeiramente, em função da alta reatividade do titânio fundido com o oxigênio, a liga

NiTi deve ser fundida em alto vácuo ou em atmosfera de gás inerte. O método mais comumente utilizado é a fusão por indução a alta frequência, mas também são empregadas a fusão por feixe de elétrons, fusão a arco com proteção por argônio e fusão a arco de plasma. Todavia, a justificativa para a maior empregabilidade da fusão por indução a alta frequência é a homogeneidade da composição ao longo do lingote bem como o controle dessa composição química. Esses fatores são bastante relevantes, uma vez que influenciam direta e significativamente nas propriedades da liga, sendo as LMF altamente sensíveis a pequenas variações na composição material. Adicionalmente, ainda na fusão da liga NiTi, é recomendável a utilização de cadinhos de grafita ou de óxido de cálcio, de forma a evitar contaminações por oxigênio ^{5,12,13}.

Tabela 2.1 – Comparação entre algumas propriedades das ligas NiTi aproximadamente equiatômicas e do aço inoxidável austenítico ¹⁴

Propriedade	NiTi	Aço inoxidável austenítico
Deformação recuperável	8,0%	0,8%
Biocompatibilidade	Excelente	Boa
Resistência à corrosão	Excelente	Excelente
Módulo de elasticidade	21-41 GPa (martensítico) 30-83 GPa (austenítico)	193-215 GPa
Densidade	6,45 g/cm ³	8,03 g/cm ³
Limite de resistência	895-1900 MPa	~760 MPa

Após a completa fusão, que ocorre em torno de 1200 °C para uma liga NiTi equiatômica, o material é então lingotado e resfriado. Em seguida, o lingote é forjado e laminado a quente. Nessas etapas, apesar de se obter maior conformabilidade da liga NiTi em temperaturas elevadas, a temperatura considerada ideal para a realização do trabalho a quente é de aproximadamente 800 °C, para evitar a oxidação da superfície que se torna mais susceptível em temperaturas superiores ¹.

Posteriormente, a liga é submetida à trefilação. Nesse estágio, há grande dificuldade na execução do trabalho a frio devido ao elevado encruamento sofrido pelo material. A conformabilidade a frio das ligas NiTi é fortemente dependente da composição química da liga, sendo sua trabalhabilidade reduzida com o aumento do teor de níquel até atingir 51 at.%, a partir do qual se torna impraticável a realização do trabalho a frio. Dessa forma, em determinadas condições, faz-se recozimento entre os passes de trefilação ^{1,7}.

Ao final da trefilação, a liga é conformada em sua forma final e, por fim, submetida ao tratamento de memória de forma. Neste processo o material é mantido fixo no formato que se deseja “memorizar” e, então, aquecido a determinada temperatura. Tal temperatura deve ser elevada o suficiente para que promova alterações no arranjo microestrutural da liga NiTi, na distribuição das tensões internas, na textura, na composição química e na distribuição das fases presentes, promovendo, assim, o efeito memória de forma ¹⁵.

2.1.1 Sistema NiTi

Com base no diagrama de fases das ligas NiTi, é possível identificar as transformações de fase que ocorrem nessas ligas e, conseqüentemente, obter um melhor entendimento de como sucedem os fenômenos da superelasticidade e o efeito memória de forma. Sendo assim, na Figura 2.3 é apresentado o diagrama de equilíbrio de fases do sistema NiTi, aceito atualmente. Ressalta-se que a região de maior interesse se situa na vizinhança da fase TiNi, onde há relevância técnica, na faixa entre 49 at.% a 52 at.% de níquel ¹⁶.

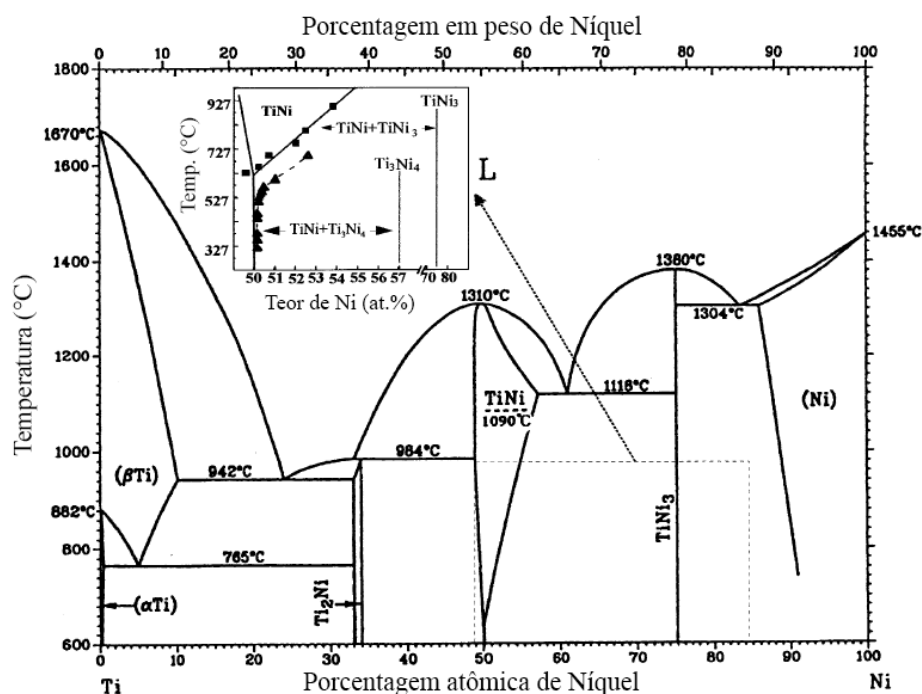


Figura 2.3 – Diagrama de equilíbrio de fases do sistema NiTi ⁷

Observa-se pelo diagrama (Figura 2.3) que a fronteira à esquerda da fase TiNi é praticamente vertical, enquanto que do outro lado rico em Ni, há redução na solubilidade

desse elemento à medida que a temperatura diminui. Abaixo de 600 °C, apesar de não ser possível a verificação pelo diagrama mostrado, tem-se a fase β em uma faixa bastante estreita, com composição química aproximadamente equiatômica, compreendida entre 50,0 e 50,5 at.% de Ni ^{1,7}.

Para ligas NiTi com porcentagem atômica de níquel superior a 50,05%, ocorre decomposição da fase TiNi, formando TiNi₃, quando resfriada lentamente a partir de elevadas temperaturas ou quando envelhecidas em temperaturas abaixo de 700 °C após prévia têmpera ^{1,16}. Um exemplo dessa decomposição é apresentado na Figura 2.4, com as curvas tempo-temperatura-transformação (TTT) para uma liga NiTi, com composição Ti-52Ni, temperada a partir de 1000 °C e, posteriormente, envelhecida em temperaturas diversas ¹.

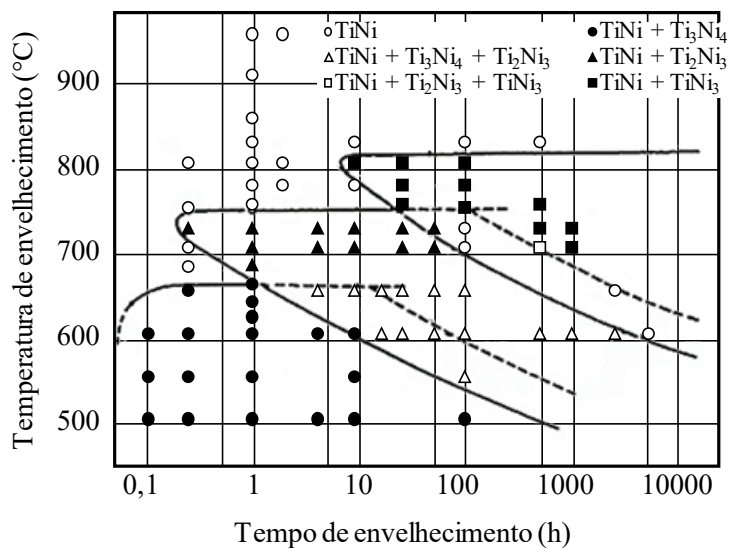


Figura 2.4 – Diagrama TTT de uma liga Ti-52at.%Ni ⁷

De acordo com o diagrama TTT (Figura 2.4), é possível verificar três intervalos distintos de temperatura nos quais ocorre o processo de decomposição, da seguinte forma:

(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



Nota-se que, nas três faixas de temperaturas mencionadas, o produto da decomposição é uma mistura de TiNi e TiNi₃. As demais fases formadas, Ti₃Ni₄ e Ti₂Ni₃, são compostos metaestáveis ¹.

A fase TiNi, também designada como fase β, apresenta estrutura cristalina cúbica do tipo B2 (CsCl) com parâmetro de rede de 0,3015 nm a temperatura ambiente. Tal fase desempenha importante função na transformação martensítica e se associa significativamente com o EMF. Já a fase TiNi₃ exibe estrutura hexagonal do tipo DO₂₄, cujos parâmetros de rede são: a = 0,51010 nm, c = 0,83067 nm e c/a = 1,6284 nm ⁷.

O precipitado intermediário Ti₂Ni₃ pode apresentar duas estruturas cristalinas em função da temperatura, sendo que a alternância entre elas se dá pela transformação martensítica. A fase estável em alta temperatura (100 °C) do composto Ti₂Ni₃ é tetragonal, sendo os parâmetros de rede a = 0,3095 nm e c = 1,3585 nm. Em baixa temperatura (25 °C) sua estrutura passa a ser ortorrômbica e com parâmetros a = 0,4398 nm, b = 0,4370 nm e c = 1,3544 nm ⁷.

Com relação à fase metaestável Ti₃Ni₄, esta possui estrutura cristalina romboédrica com parâmetros de rede a = 0,670 nm e α = 113,8° ⁷. Esses precipitados se formam nos primeiros estágios do envelhecimento em baixas temperaturas como finas plaquetas coerentes com a matriz TiNi (B2). A coerência desses precipitados com a matriz gera distorções na rede que influenciam o EMF da seguinte forma: devido ao impedimento à movimentação de deslocações, ocorre o aumento da tensão crítica de escorregamento e, então, a recuperação do efeito memória de forma é ampliada ^{1,17}.

Todavia, a influência desses precipitados está atrelada ao seu dimensionamento e distribuição. Para maiores tempo e temperatura de envelhecimento, as partículas de Ti₃Ni₄ aumentam de tamanho, tornando-se ser incoerentes ¹⁸.

2.1.2 Transformação martensítica nas ligas NiTi

O efeito memória de forma e a superelasticidade estão diretamente associados a transformações martensíticas (TM) que ocorrem nas LMF. A TM é um tipo de transformação entre fases sólidas, que acontece de maneira adifusional/displaciva, em que um conjunto de átomos se move cooperativamente pelo mecanismo de cisalhamento. Tal transformação não está associada com mudanças na composição química, mas envolve modificações (rearranjos) na estrutura cristalográfica que se alteram por temperatura ou tensão ^{5,19}.

A fase estável em altas temperaturas, que é a fase de origem denominada austenita, geralmente apresenta uma estrutura cristalina de alta simetria baseada em uma rede cúbica. Por outro lado, a fase de baixa temperatura, designada como martensita, exhibe menor grau de simetria, podendo ser tetragonal, romboédrica, ortorrômbica, dentre outras, dependendo da liga ^{2,19}.

Quando uma liga é resfriada abaixo de uma temperatura crítica, a TM se inicia, segundo a Figura 2.5, dando início ao mecanismo de cisalhamento a partir da austenita originando diferente estrutura cristalina. Conforme pode ser observado na Figura 2.5, a nova estrutura formada, a martensita, pode exibir diferentes orientações – regiões A e B – apesar de ser uma mesma estrutura e com configurações energéticas equivalentes. Essas diferentes orientações são classificadas como variantes de martensita. Uma vez que esta fase de baixa temperatura possui inferior simetria, conforme mencionado, é possível a formação de diversas variantes de martensita oriundas de uma mesma austenita ¹.

Não obstante, com a elevação da temperatura, a martensita se tornará instável e sofrerá a transformação reversa retornando à forma da austenita com a mesma orientação inicial. Isso porque, diferentemente do que ocorre em aços, a TM em LMF é uma transformação termoelástica e reversível ¹. Logo, a TM em LMF necessita de uma força motriz bem pequena para que essa transformação ocorra, tendo interfaces móveis entre a austenita e a martensita sendo, portanto, cristalograficamente reversível. Já a TM nos demais materiais requer alta força motriz, além de ter interfaces fixas entre a austenita e a

martensita, fazendo com que a transformação reversa ocorra por nucleação da austenita sendo, portanto, não reversível ¹⁶.

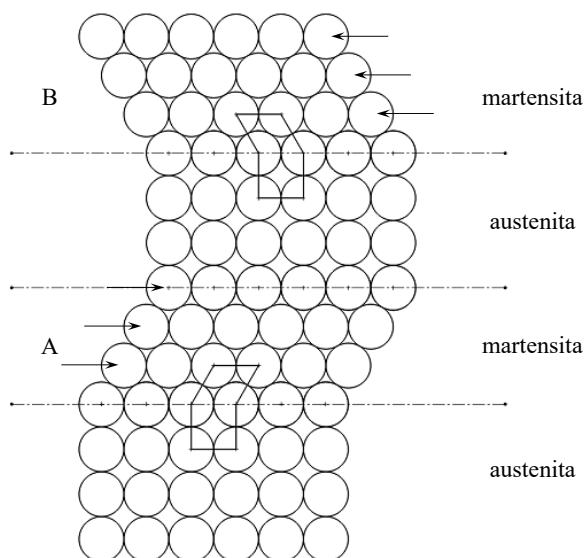


Figura 2.5 – Modelo simplificado da transformação martensítica ⁷

Uma vez que a TM está associada a alterações na forma em virtude da deformação de Bain, zonas com alto nível de deformação são geradas nas proximidades da martensita. Porém, sendo a TM uma transformação de primeira ordem, a qual acontece por nucleação e crescimento, a redução dessa deformação facilita o seu desenvolvimento. Dessa forma, há duas maneiras de se acomodar tal deformação, reduzindo-a, conforme mostrado na Figura 2.6, por escorregamento ou por maclação ^{1,7}.

Ambos os mecanismos de acomodação são denotados como deformações invariantes de rede, pois não promovem modificações na estrutura cristalina da martensita. O que ocorre devido a esses efeitos é a formação de uma subestrutura sendo, no caso da deformação invariante de rede por escorregamento, caracterizada pela presença de deslocamentos no interior das variantes de martensita e também por rompimentos nas ligações químicas. No caso da maclação, a subestrutura é discriminada pelas falhas de empilhamento. Como no método por escorregamento há quebra das ligações atômicas, este é considerado um processo permanente e irreversível. Por outro lado, na maclação essas ligações permanecem intactas acomodando as deformações de modo reversível.

Conseqüentemente, nas LMF a maclação é o principal mecanismo de acomodação das deformações provenientes da TM, pois, para que o EMF ocorra, é imprescindível a reversibilidade de estrutura cristalográfica ¹.

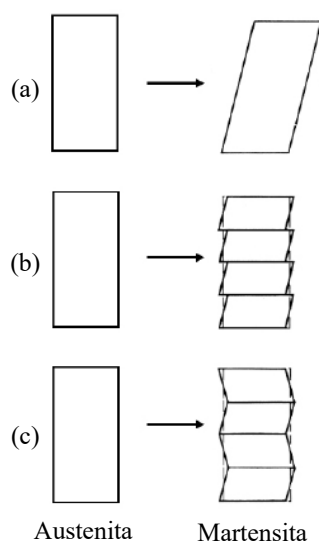


Figura 2.6 – Representação esquemática dos tipos de deformação invariante de rede na TM ¹

(a) Mudança de forma na transformação martensítica; (b) acomodação de deformação por escorregamento; (c) acomodação de deformação por maclação

Ao longo do processo de maclação, diversas variantes de martensita são geradas como imagens espaciais umas das outras, com similar condição energética, mas com diferentes orientações cristalográficas, de forma a se acomodarem. As interseções entre essas variantes, denotadas como contornos de maclas, são caracterizadas por serem locais de energia relativamente baixa, em função da coerência atômica, e por se moverem facilmente sob condições de carregamento ^{1,7}.

Com a aplicação de tensão, inicialmente ocorrerá a reorientação das placas de martensita (Figura 2.7a), havendo o crescimento de suas variantes que estão mais favoravelmente orientadas na direção da aplicação da tensão, em detrimento das demais variantes. Tal fenômeno resultará na perda da auto-acomodação por maclação gerada previamente com a transformação martensítica ²⁰. Caso a tensão aplicada permaneça e/ou se eleve, ocorrerá posteriormente o processo de demaclação, que é o crescimento/movimentação das maclas

internas da martensita favoravelmente orientada com a tensão (Figura 2.7b). A Figura 2.8 demonstra a sequência dos processos de demacção e reorientação da martensita.

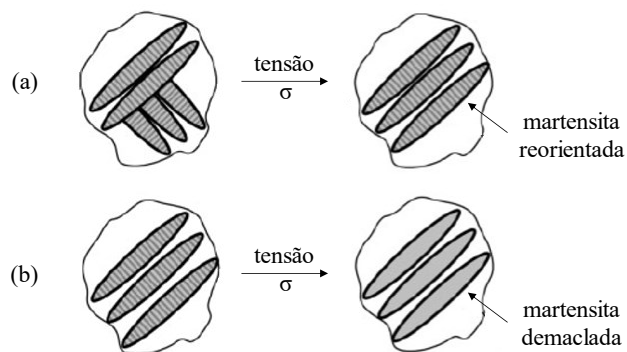


Figura 2.7 – Representação esquemática dos dois mecanismos de deformação inelástica recuperável ²⁰

(a) Reorientação da martensita; (b) demacção da martensita

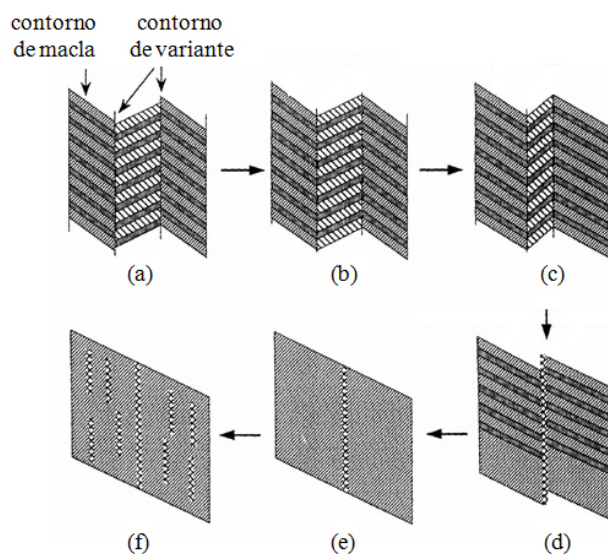


Figura 2.8 – Representação esquemática da reorientação e demacção da martensita sob tensão ²¹

(a) Estado não-deformado; (b) acomodação inelástica das maclas; (c) início da reorientação martensítica; (d) fim da reorientação martensítica e início da demacção; (e) fim da demacção; (f) geração de deslocamentos pela deformação adicional

A transformação da austenita para a martensita ocorre devido às diferenças na entropia de cada uma dessas fases. Como mencionado, a austenita é estável em temperaturas mais elevadas, apresentando, portanto, maior entropia vibracional. Por outro lado, a martensita, que é a fase de baixa temperatura, possui menor nível de entropia. Dessa forma, a TM se

dá com redução da entropia verificada em uma determinada faixa de temperatura ⁷. Durante o resfriamento têm-se as temperaturas de início e fim da TM, que são designadas respectivamente por Ms e Mf, e definem o intervalo na qual essa transformação acontece ⁵. Para a transformação reversa (TR), As e Af são as temperaturas nas quais ocorrem o começo e o final da transformação da martensita em austenita ^{5,19}.

A histerese que ocorre entre essas transformações se deve às diferenças nas tensões de cada uma delas, sendo que a TM acontece em maiores tensões que a TR, fazendo com que não haja sobreposição das curvas. Essa histerese é decorrente do atrito interno proveniente da movimentação dos contornos de macla e das variantes, resultando em energia dissipada ao longo do ciclo TM e TR. Ressalta-se que a magnitude da histerese está associada com o tipo e composição química da liga ^{5,7}.

Em ligas NiTi cuja composição química é aproximadamente equiatômica, a estrutura cristalina de sua fase austenítica é CCC do tipo B2. Enquanto que a martensita exibe estrutura do tipo B19', sendo que B19 denota uma estrutura ortorrômbica resultante de uma deformação normal à direção $\langle 110 \rangle$ da austenita, e o apóstrofo indica que houve uma distorção adicional por cisalhamento, resultando em simetria monoclinica ¹⁹. Apesar de possuírem mesma composição química, essas diferenças cristalográficas existentes entre a austenita e a martensita fazem com que essas fases apresentem distintos comportamentos mecânicos. De forma geral, a austenita é mais rígida, possuindo superior tensão de escoamento e bom retorno elástico. Por outro lado, a martensita apresenta maior ductilidade, sendo deformada plasticamente com baixas tensões ^{16,22}. A Tabela 2.2 exemplifica a variação das propriedades mecânicas de uma liga Ni_{50,8}Ti_{49,2} (at.%) em seu estado martensítico e austenítico.

Tabela 2.2 – Comparação entre algumas propriedades das ligas NiTi em seu estado martensítico e austenítico ²

Propriedade	Martensita	Austenita
Densidade (kg/m ³)	6500	6500
Módulo de elasticidade (GPa)	40	75
Coefficiente de expansão térmica (10 ⁻⁶ /°C)	6,6	11
Condutividade térmica (W/m°C)	18	18

Além da austenita e da martensita, adicionalmente, uma fase intermediária, denotada fase R, frequentemente aparece durante o resfriamento, tendo sua própria temperatura de começo (R_s) e fim (R_f), antes da transformação prosseguir para a martensita, em baixas temperaturas ⁵. O surgimento da fase R está associado com variações na composição química, envelhecimento e a tratamentos termomecânicos ²³. Essa fase é uma distorção romboédrica da estrutura B2, conforme pode ser verificado na Figura 2.9 onde são mostradas esquematicamente as estruturas da austenita, da martensita e da fase R, permitindo uma comparação entre elas.

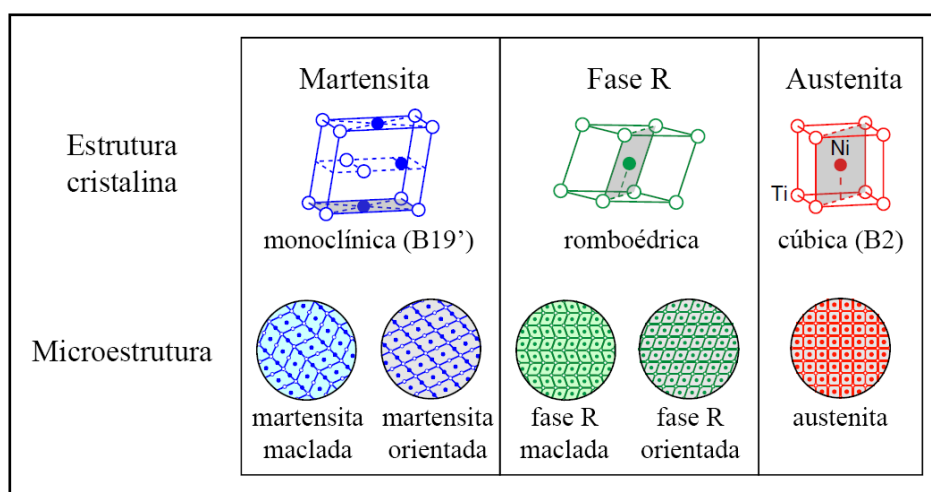


Figura 2.9 – Representação esquemática das estruturas cristalinas e das microestruturas das principais fases presentes em uma liga NiTi ⁵

De modo geral, em ligas NiTi de composição aproximadamente equiatômica e que foram submetidas a recozimento pleno, a transformação martensítica ocorre em uma única etapa, na qual a austenita se transforma diretamente em martensita durante o resfriamento ($B2 \rightarrow B19'$). Todavia, caso essas ligas sejam tratadas térmica e/ou mecanicamente, a TM poderá ocorrer em duas etapas. Primeiramente, a austenita se transforma em fase R ($B2 \rightarrow R$) e, posteriormente a fase R se transforma em martensita ($R \rightarrow B19'$), sendo, portanto, $B2 \rightarrow R \rightarrow B19'$ ^{7,24}. A fase R ocorre notoriamente em ligas NiTi envelhecidas, antecedendo o surgimento da martensita B19', devido a existência de precipitados Ti_3Ni_4 formados durante o tratamento térmico de envelhecimento ²⁴.

Assim como a martensita, a fase R também é resultado da TM, no entanto, a transformação B2 → R exibe inferior deformação de rede devido a sua formação (~1%) e menor histerese (~1-5 °C). Em contraste, a transformação B2 → B19' gera maiores deformações (~10%) e superior histerese (~20-70 °C)²⁴. Essa diferença está relacionada com o fato de que a estrutura cristalina da fase R é cinematicamente compatível com a fase B2, enquanto a estrutura monoclinica da martensita não é compatível com B2⁵.

A TM, além de ocorrer devido ao resfriamento abaixo da temperatura Ms, também pode acontecer em temperaturas acima de Ms ou Af quando uma tensão for aplicada. Nesse caso, a martensita formada é classificada como martensita induzida por tensão (MIT), em que a força motriz para a transformação é mecânica e não térmica. Sendo assim, a MIT somente é estável durante a aplicação da tensão e, quando há o descarregamento, essa martensita torna-se instável, ocorrendo a TR, conseqüentemente^{1,5}.

Quando a LMF se encontra em temperatura superior a Ms, a tensão crítica necessária para a indução da martensita se eleva linearmente com o aumento da temperatura, tornando a austenita cada vez mais estável e necessitando de maiores tensões para que a TM ocorra⁷. Todavia, esse aumento da tensão crítica para promover a transformação martensítica se dá até atingir uma temperatura limite, denomina Md (Figura 2.10). A partir de Md, a tensão crítica de escorregamento da austenita é menor que a tensão necessária para induzir martensita. Sendo assim, acima da temperatura Md, a liga se comportará como material convencional, uma vez que a aplicação de tensão na mesma irá gerar deformação plástica na austenita, e não TM^{1,7}.

Constata-se pela Figura 2.10 que, em princípio, tanto a superelasticidade como o efeito memória de forma podem ocorrer em uma mesma liga, dependendo da temperatura na qual o material é deformado. Ainda, é possível observar que, caso a liga possua tensão crítica de escorregamento muito baixa (como no caso B, da Figura 2.9), não é esperada uma boa ou completa superelasticidade, uma vez que o escorregamento, que é um processo irreversível, acontece abaixo da tensão crítica necessária para a transformação induzida. Nota, assim, que o EMF ocorre abaixo de As, seguido por aquecimento acima

de A_f , enquanto que a SE é verificada acima de A_f , nas condições em que a tensão de escorregamento é alta o suficiente como na situação (A) da Figura 2.9 ^{1,7}.

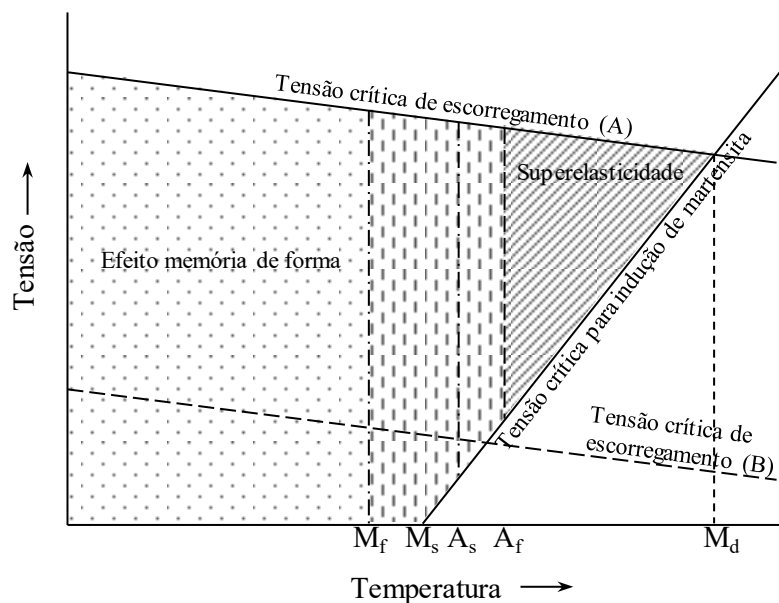


Figura 2.10 – Diagrama esquemático do EMF e da SE em relação às tensões críticas para indução de martensita e de escorregamento em função da temperatura ⁷

2.1.3 Efeito memória de forma e superelasticidade

Ambos os fenômenos de efeito memória de forma e de superelasticidade estão diretamente atrelados à transformação martensítica, em que há transformação de fase induzida por temperatura ou por aplicação de tensão ².

No EMF o material é deformado abaixo de A_s , estando em seu estado martensítico, e retorna a sua forma inicial pela transformação reversa quando submetido a aquecimento em temperaturas acima de A_f , ou seja, austenitizado ¹. Nesse caso, quando a liga sofre algum tipo de deformação em temperaturas nas quais a martensita é estável (abaixo de M_f ou entre M_f e A_s), a martensita que estava maclada em virtude da TM, terá suas variantes modificadas pela movimentação dos contornos de maclas – para acomodação da tensão – e preferencialmente alinhadas com a direção do carregamento aplicado. Essa martensita orientada é denominada martensita demaclada. Com a remoção do carregamento, o material permanecerá deformado e, somente após o aquecimento, sua

estrutura será revertida em austenita e recuperará a deformação retomando a forma original ^{5,19}.

Quanto à superelasticidade, esse comportamento é verificado quando a liga se encontra em temperaturas acima de A_f (e abaixo de M_d), austenítico. Em elevadas temperaturas a fase estável é a austenita, porém, ao aplicar uma tensão suficiente, esta fase se desestabiliza em favor de variantes de martensita, ou seja, a austenita sob condições de carregamento se transforma em martensita induzida. Após a retirada da carga, essa martensita deixa de ser termodinamicamente estável e o material reverte para a fase austenita, recuperando a deformação após o completo descarregamento ^{5,16}. A superelasticidade se refere a uma ampla faixa elástica na qual o material pode sofrer qualquer tipo de deformação em até 8%, aproximadamente, e recuperar por completo essa deformação com a retirada da carga, sem a necessidade do reaquecimento ^{2,5}.

Na Figura 2.11 são mostradas as transformações de fase – reorientação/demaclação da martensita e a recuperação da deformação com a TR – no EMF e SE. Conforme pode ser observado, no EMF a martensita encontra-se maclada, uma vez que é oriunda da acomodação por maclação da TM. Ao ser deformada, haverá o crescimento das variantes de martensita favoravelmente orientadas na direção da aplicação da tensão. Em contrapartida, na SE o material se encontra austenítico e, com a realização de algum carregamento, a austenita se transforma em martensita deformada, não maclada. Por fim, a TR acontece, havendo o retorno da fase austenítica, no EMF com aquecimento e na SE com o descarregamento ²⁵.

A transformação da austenita em martensita, decorrente da temperatura ou da deformação, em ambos os fenômenos mencionados pode ser mais bem visualizada pelo diagrama tensão-deformação-temperatura de uma liga NiTi exibido na Figura 2.12.

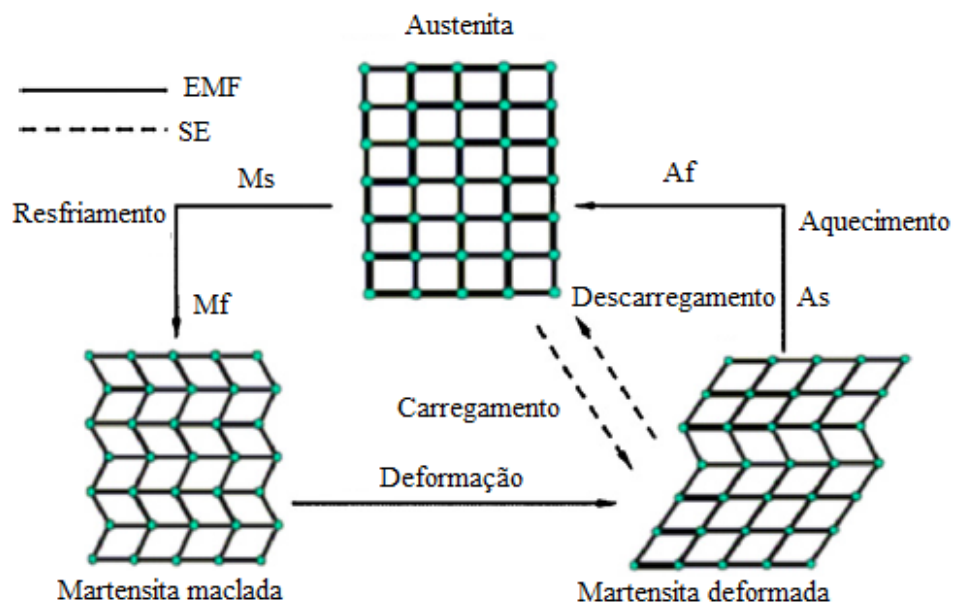


Figura 2.11 – Representação esquemática do efeito memória de forma e da superelasticidade ¹⁹

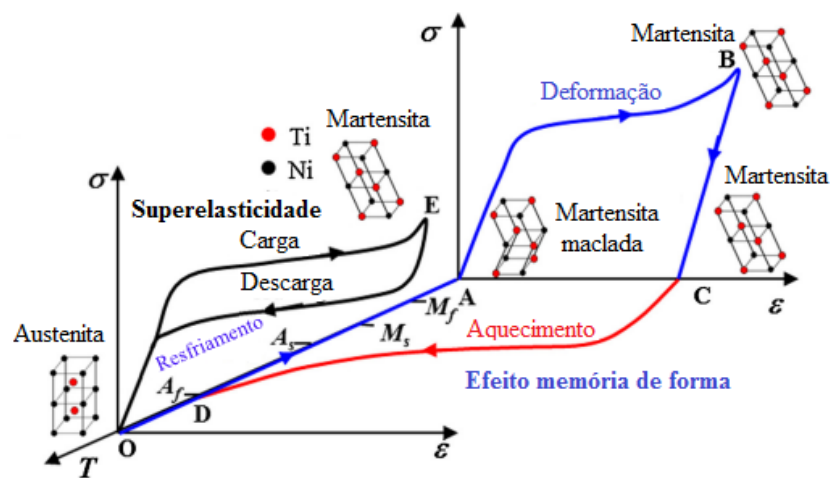


Figura 2.12 – Diagrama tensão-deformação-temperatura de uma liga NiTi ²⁵

- O → A: transformação da austenita em martensita maclada devido ao resfriamento, sem aplicação de tensão;
- A → B: deformação da martensita (aparentemente permanente), por meio da reorientação/demaclação;
- B → C: remoção da carga, com o retorno elástico da martensita demaçada que permanece deformada;

- C → D: transformação da martensita em austenita através do aquecimento acima de A_f e recuperação da deformação pseudoelástica, retornando à forma inicial;
- O → E: aplicação de tensão, gerando transformação martensítica induzida acima de A_f , com grande deformação elástica;
- E → O: descarregamento, havendo TR, retorno da deformação superelástica e recuperação da forma inicial.

2.1.4 Comportamento termomecânico das ligas NiTi

Como relatado, precedentemente, o comportamento mecânico das ligas NiTi está intrinsecamente relacionado com as temperaturas de transformação de cada material, bem como com a temperatura na qual a deformação transcorre^{7,16}. Ou seja, a resposta do material devido à aplicação de uma dada tensão se altera de acordo com a temperatura de deformação (T_d). Dentro desse contexto, basicamente são determinados três regimes de temperaturas:

(1) $T_d < M_f$

A liga NiTi, quando se encontra em temperaturas inferiores a M_f , exibe estrutura martensítica maclada. Com a aplicação da tensão, essa martensita auto-acomodada inicialmente sofrerá deformação elástica ($o \rightarrow a$, Figura 2.13) até atingir o início do patamar $a \rightarrow b$ (Figura 2.13). Nesse patamar, ocorre a demaclação/reorientação das variantes de martensita favoravelmente orientadas na direção de aplicação da tensão até atingir o ponto d. Caso haja remoção do carregamento dentro do trajeto $o \rightarrow d$ (Figura 2.13), como exemplo o ponto c, o material retornará a deformação elástica da martensita, mas permanecerá com uma deformação aparentemente permanente equivalente a $o \rightarrow c'$ (Figura 2.13). Porém, se for aquecida em temperaturas acima de A_f , toda essa deformação da liga será recuperada por meio da transformação reversa, caracterizando o EMF. Acima do ponto, a tensão aplicada gera deformação plástica na martensita, sendo, portanto, não reversível por TR com o aquecimento²⁶.

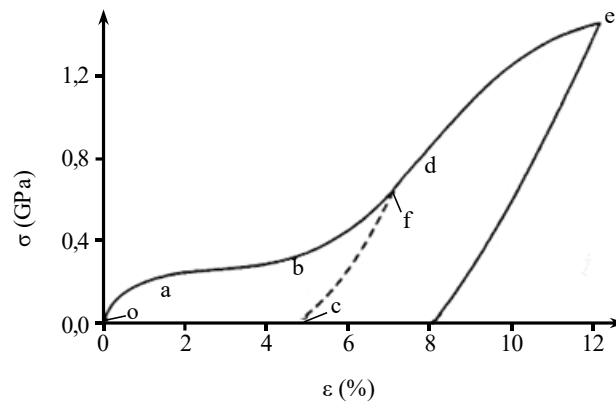


Figura 2.13 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi no estado martensítico ²⁶

O comportamento mecânico da liga NiTi martensítica pode apresentar certas diferenças quando na presença de fase R, conforme mostrado na Figura 2.14. Essa fase é demarcada primeiramente pela tensão nos primeiros estágios – o→a, Figura 2.14. A quantidade de deformação que pode ser acomodada na fase R demarcada é significativamente menor que na martensita demarcada, sendo assim, maiores níveis de deformação promovem a transformação da fase R em martensita demarcada (a→b, Figura 2.14) ²⁶.

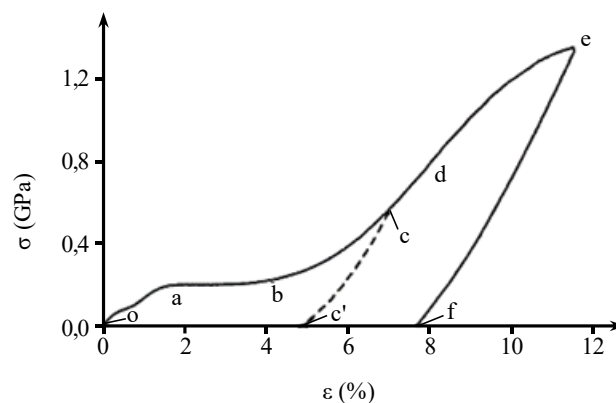


Figura 2.14 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi no estado martensítico com fase R ²⁶

(2) $A_f < T_d < M_d$

Acima de A_f , a liga NiTi encontra-se austenítica e, por estar também abaixo de M_d , permanece com as propriedades das LMF. A Figura 2.15 apresenta o comportamento mecânico nesta condição. Primeiramente, a tensão aplicada

promove a deformação elástica da austenita (o→a, Figura 2.15) até atingir um nível de tensão crítica, ponto a (Figura 2.15). A partir desse nível de tensão, a austenita torna-se instável, transformando-se em martensita induzida por tensão – martensita demaclada – ao longo do patamar a→b da Figura 2.15. Evidencia-se que, durante esse patamar, a deformação se dá em grandes níveis havendo insignificativos aumentos de tensão. Além disso, caso haja remoção da tensão ao longo de a→b (Figura 2.15), haverá o retorno elástico da MIT até o ponto b'. Logo em seguida, essa martensita torna-se instável, ocorrendo a transformação reversa para austenita durante o patamar b'→a', recuperando toda a deformação. Esse fenômeno é então caracterizado como superelasticidade ²⁶.

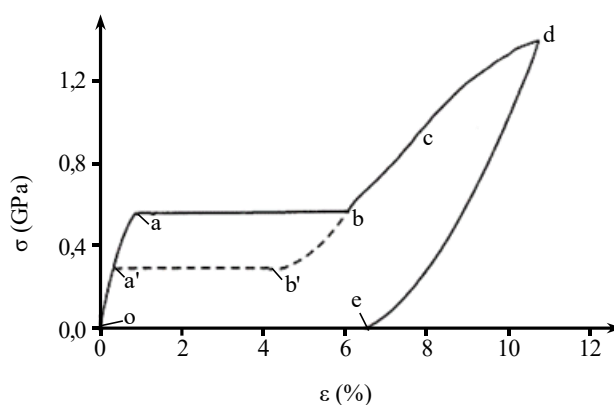


Figura 2.15 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi no estado austenítico ²⁶

Ao final do patamar no ponto b (Figura 2.15), grande parte da austenita se transformou em martensita induzida por tensão, restando apenas uma pequena porção de austenita retida. Sendo assim, o aumento da deformação além do ponto b (Figura 2.15) requer significativo aumento na tensão, uma vez que ocorrerá a distorção elástica da martensita acompanhada pela gradual transformação da austenita retida até o ponto c (Figura 2.15). Para tensões superiores a esse ponto, a martensita passa a cisalhar, deformando-se plasticamente, permanecendo com essa deformação mesmo com a remoção da carga ²⁶. Ressalta-se ainda que, em virtude da maior rigidez da austenita, o material nesta condição exibe maiores tensões de escoamento e, conseqüentemente, o patamar de transformação da austenita em MIT

(Figura 2.15), comparado com o patamar de reorientação/demaclação da liga no estado martensítico (Figura 2.13), intercorre em tensões mais elevadas ^{7,16}.

(3) $T_d > M_d$

Quando a liga NiTi encontra-se em temperaturas acima de M_d , a tensão crítica de escorregamento é inferior à tensão crítica para indução de martensita (conforme apresentado anteriormente na Figura 2.10). Deste modo, mesmo o material estando austenitizado nessa temperatura, a aplicação de uma tensão não irá formar martensita induzida. Nesse caso haverá o escoamento da austenita de forma a se assemelhar ao comportamento mecânico elastoplástico de metais convencionais (Figura 2.16). Ou seja, com a aplicação da tensão, a austenita começa a deformar-se elasticamente seguida por deformação plástica. E, com a eliminação da tensão, o material permanecerá deformado ^{1,7}.

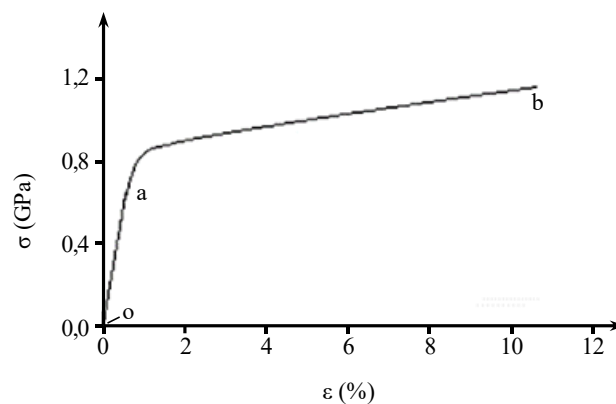


Figura 2.16 – Curva tensão-deformação para uma liga NiTi acima da temperatura M_d ²⁶

2.1.5 Efeito do tratamento termomecânico nas ligas NiTi

As temperaturas de transformação são consideradas como fator proeminente para a determinação das propriedades mecânicas das ligas NiTi. Por conseguinte, tais faixas de temperaturas são influenciadas tanto pela composição química do material como também por tratamentos termomecânicos ^{1,22,23}.

Com relação a variações na composição química, as temperaturas de transformação são sensivelmente alteradas. Como exemplo, quando se tem um aumento em 1% de Ni, de 50,5 para 51,5% atômico, há um decréscimo de 100 °C na temperatura de início da transformação martensítica (Ms). Todavia, a mudança no comportamento mecânico proveniente da variação química não é algo amplamente viável, uma vez que o controle químico das ligas NiTi é consideravelmente complexo e oneroso. Sendo assim, comumente realizam-se mudanças nas propriedades desse material por meio de tratamentos termomecânicos ²⁷. Dessa forma, tratamentos térmicos em associação com trabalhos a frio são empregados nas ligas NiTi visando à variação das características desse material, de forma a alcançar melhores efeito memória de forma e superelasticidade ²³.

As temperaturas para tratamento térmico em ligas NiTi geralmente são divididas em três faixas: (1) solubilização em altas temperaturas 800-900 °C; envelhecimento em média temperatura 400-550 °C; e envelhecimento em baixa temperatura: 200-400 °C ²⁸.

Ligas NiTi cujo teor de níquel excede 50,5 at.% geralmente são tratadas termicamente em temperaturas entre 300 °C e 500 °C, formando precipitados coerentes Ti₃Ni₄ ¹. A formação desses precipitados desenvolve campos de tensão na matriz, que estabilizam a martensita, e reduz o teor de níquel na mesma. Uma vez que a temperatura de transformação martensítica é altamente dependente da concentração de Ni acima de 50 at.%, a redução desse elemento na matriz eleva as temperaturas Ms e Mf e ainda induzem a formação da fase R no resfriamento. Conseqüentemente, o aumento de Ms causa diminuição na tensão de transformação B2 → B19' e otimiza o EMF e a SE ^{23,29}.

No caso de ligas NiTi que contêm entre 50,0 at.% e 50,5 at.%, o tratamento térmico sozinho se faz dispensável por ser insensível nessas ligas, uma vez que não há ocorrência dos precipitados Ti₃Ni₄. No entanto, essas ligas podem ter suas propriedades modificadas por tratamentos termomecânicos, os quais envolvem recozimento abaixo de 500 °C seguido de trabalho a frio. Se a liga equiatômica for submetida apenas a recozimento pleno, suas propriedades de EMF e SE se apresentam de forma parcial, recuperando parte da deformação com a retirada da carga e mantendo uma deformação residual – produto da deformação plástica. Sendo, assim, necessário o aumento da resistência mecânica

desse material para que a deformação por escorregamento seja postergada. Em contrapartida, a realização do trabalho a frio sem o recozimento, elevará a resistência da liga devido ao encruamento, mas também irá suprimir a transformação martensítica termoelástica, restringindo a propriedade de memória de forma a uma pequena recuperação da deformação ^{1,16}. Logo, o trabalho a frio promove o aumento da densidade de deslocamentos, que impedem a movimentação dos contornos de macla, necessitando, portanto, do recozimento para auxiliar na restauração do EMF, rearranjando tais deslocamentos ^{5,16}.

Como se pode perceber, a introdução de subestruturas de deslocamentos ou de precipitado na matriz atua como obstáculos à movimentação de discordâncias, elevando a resistência à deformação plástica e fazendo com que a tensão necessária para a ocorrência do escorregamento se torne maior. Conseqüentemente, eleva-se a temperatura M_d e amplia a faixa de ocorrência dos fenômenos reversíveis no material ¹.

2.2 Instrumentos Endodônticos

Tratamentos endodônticos são intervenções clínicas que visam restaurar algum elemento dentário ³⁰. De forma genérica, tal procedimento consiste na formatação do canal radicular, removendo tecidos inflamados ou necrosados ³¹. Nesses tratamentos endodônticos, um fator importante a ser considerado é a morfologia do canal radicular ³². Isso porque, durante o processo de limpeza desses canais curvos, podem ocorrer modificações em seu formato, como desenvolvimento de degraus ou desvio do canal ³³.

De fato, canais radiculares curvos dificultam os procedimentos clínicos uma vez que o sucesso destes se relaciona com a capacidade de o instrumento seguir a rota original do canal dentário. Assim, a flexibilidade é considerada uma característica primordial em instrumentos endodônticos, permitindo-os se adaptar a canais intensamente curvos ³².

Ligas NiTi têm sido utilizadas em instrumentos endodônticos, também conhecidos como limas, nos últimos 30 anos e gradualmente substituindo as limas de aço inoxidável devido a sua superior flexibilidade e desempenho geral no tratamento de canal radicular. Limas

NiTi exibem a propriedade de superelasticidade e, portanto, são capazes de seguir a curvatura dos canais dentários mais facilmente que os instrumentos de aço inoxidável ³¹. Adicionalmente, as propriedades mecânicas das ligas NiTi favorecem o desenvolvimento de inovadores design de lâminas, 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 ^{31,33}.

Os instrumentos rotatórios de NiTi são fabricados com diversas variações de conicidade (*taper*) de forma a facilitar a formatação do canal ³⁴. Além disso, as limas possuem geometrias variáveis quanto ao diâmetro de sua ponta, passo da rosca (também designado por *pitch*), formato da seção transversal, comprimento da parte ativa e comprimento total. Uma forma genérica desse instrumento é apresentada na Figura 2.17. Ressalta-se que a diversidade de geometrias existentes ocorre tanto por questões comerciais como também pelo tipo de aplicação de cada lima.

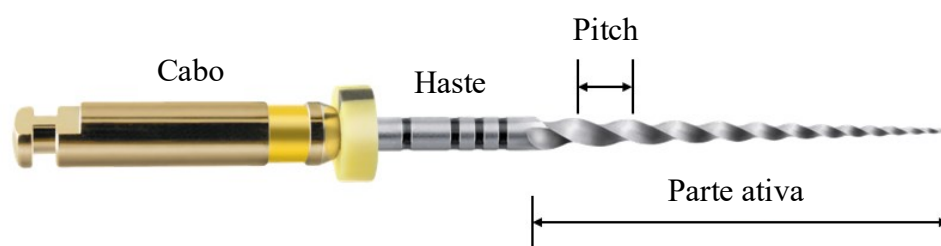


Figura 2.17 – Geometria de um instrumento endodôntico rotatório modelo *ProTaper Universal FI* ³⁵

A aplicação de ligas NiTi em limas elevou a qualidade da formatação de canais radiculares e, conseqüentemente, a taxa de sucesso em tratamentos endodônticos ³⁶. Porém, apesar das vantagens, esses instrumentos ocasionalmente fraturam de forma inesperada no interior do canal ³⁶. Diversos fatores podem contribuir para esse rompimento nas limas endodônticas, contudo as duas causas principais são: torção e fadiga por flexão ^{30-32,36,37}. Ambos os fatores podem contribuir para a fratura, dependendo da curvatura do canal, geometria da lima e método de fabricação da mesma ³⁷.

A fratura por torção ocorre quando a ponta ou qualquer outra parte do instrumento é ancorada/imobilizada no interior do canal enquanto a haste continua a girar, excedendo,

assim, o limite de resistência do metal ^{37,38}. Essa sobrecarga de torção poderia ser contida limitando o torque máximo ou mesmo a força aplicados ao instrumento ³⁰.

A fratura causada pela flexão é decorrente do processo de fadiga no material. Neste caso, o instrumento, ao rotacionar no interior do canal radicular curvo, é submetido a ciclos de carregamento de tensão e compressão. Por conseguinte, tem-se a nucleação de microtrincas superficiais que se propagam para o interior do metal e, então, promovem a ruptura da seção ^{30,31}.

Diferentemente dos instrumentos endodônticos de aço inoxidável, nos quais é possível constatar sinais de degradação prévios à ruptura pela deformação plástica, a fratura em limas de NiTi não é anunciada devido a sua superelasticidade ^{31,34}.

Os níveis de tensão a que a lima é submetida variam de acordo com a geometria do instrumento e também com o nível da curvatura do canal radicular. Canais com raios de curvatura menores exibem variação abrupta de forma e, como resultado desse acentuado desvio, atribuem tensões mais elevadas aos instrumentos endodônticos. Logo, canais menores promovem fratura por fadiga com menos ciclos que os canais radiculares de raio superior ^{33,39}.

2.3 Referências

1. Otsuka, K. & Wayman, C. M. *Shape Memory Materials*. Cambridge University Press (1998).
2. Fu, C. H., Sealy, M. P., Guo, Y. B. & Wei, X. T. Austenite–martensite phase transformation of biomedical Nitinol by ball burnishing. *J. Mater. Process. Technol.* **214**, 3122–3130 (2014).
3. Lin, B., Gall, K., Maier, H. J. & Waldron, R. Structure and thermomechanical behavior of NiTiPt shape memory alloy wires. *Acta Biomater.* **5**, 257–267 (2009).
4. Mohd, J., Leary, M., Subic, A. & Gibson, M. A. A review of shape memory alloy research , applications and opportunities. *Mater. Des.* **56**, 1078–1113 (2014).
5. Shaw, J. A., Churchill, C. B. & Iadicola, M. A. Tips and tricks for characterizing shape memory alloy wire: Part 1-differential scanning calorimetry and basic phenomena. *Exp. Tech.* **32**, 55–62 (2008).
6. Stöckel, D. THE SHAPE MEMORY EFFECT • Phenomenon , Alloys , Applications. (2000).
7. Otsuka, K. & Ren, X. Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys. *Prog. Mater. Sci.* **50**, 511–678 (2005).
8. Urbina, C., De la Flor, S. & Ferrando, F. Effect of thermal cycling on the thermomechanical behaviour of NiTi shape memory alloys. *Mater. Sci. Eng. A* **501**, 197–206 (2009).
9. McNaney, J. ., Imbeni, V., Jung, Y., Papadopoulos, P. & Ritchie, R. . An experimental study of the superelastic effect in a shape-memory Nitinol alloy under biaxial loading. *Mech. Mater.* **35**, 969–986 (2003).
10. Çapar, I. D. & Arslan, H. A review of instrumentation kinematics of engine-driven nickel-titanium instruments. *Int. Endod. J.* **49**, 119–135 (2016).
11. Morgan, N. . Medical shape memory alloy applications—the market and its products. *Mater. Sci. Eng. A* **378**, 16–23 (2004).
12. Lobo, P. S., Almeida, J. & Guerreiro, L. Shape Memory Alloys Behaviour: A Review. *Procedia Eng.* **114**, 776–783 (2015).
13. Frenzel, J., Zhang, Z., Neuking, K., Eggeler, G. High quality vacuum induction melting of small quantities of NiTi shape memory alloys in graphite crucibles. *J.*

- Alloys Compd.* **385**, 214–223 (2004).
14. DesRoches, R., McCormick, J. & Delemont, M. Cyclic Properties of Superelastic Shape Memory Alloy Wires and Bars. *J. Struct. Eng.* **130**, 38–46 (2004).
 15. Pittaccio, S. & Garavaglia, L. Electric resistance monitoring as a method for controlling shape memory alloy characteristics during shape-setting treatments in the furnace. *Mater. Sci. Eng. A* **599**, 92–104 (2014).
 16. Gallardo Fuentes, J. M., Gümpel, P. & Strittmatter, J. Phase change behavior of nitinol shape memory alloys. *Adv. Eng. Mater.* **4**, 437–452 (2002).
 17. JIANG, S., ZHAO, Y., ZHANG, Y., HU, L. & LIANG, Y. Effect of solution treatment and aging on microstructural evolution and mechanical behavior of NiTi shape memory alloy. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **23**, 3658–3667 (2013).
 18. Cong, D. Y., Saha, G. & Barnett, M. R. Thermomechanical properties of Ni-Ti shape memory wires containing nanoscale precipitates induced by stress-assisted ageing. *Acta Biomater.* **10**, 5178–5192 (2014).
 19. Saigal, A. & Fonte, M. Solid, shape recovered ‘bulk’ Nitinol: Part I-Tension-compression asymmetry. *Mater. Sci. Eng. A* **528**, 5536–5550 (2011).
 20. Gall, K. *et al.* Tensile deformation of NiTi wires. *J. Biomed. Mater. Res. Part A* **75A**, 810–823 (2005).
 21. Liu, R., Li, D. Y., Xie, Y. S., Llewellyn, R. & Hawthorne, H. M. Indentation behavior of pseudoelastic TiNi alloy. *Scr. Mater.* **41**, 691–696 (1999).
 22. Ferreira, M. do A., Luersen, M. A. & Borges, P. C. Nickel-titanium alloys: a systematic review. *Dental Press J. Orthod.* **17**, 71–82 (2012).
 23. Karimzadeh, M., Aboutalebi, M. R., Salehi, M. T., Abbasi, S. M. & Morakabati, M. Effects of thermomechanical treatments on the martensitic transformation and critical stress of Ti-50.2 at.% Ni alloy. *J. Alloys Compd.* **637**, 171–177 (2015).
 24. Zhou, Y. *et al.* Origin of 2-stage R-phase transformation in low-temperature aged Ni-rich Ti-Ni alloys. *Acta Mater.* **53**, 5365–5377 (2005).
 25. Guo, Y., Klink, A., Fu, C. & Snyder, J. Machinability and surface integrity of Nitinol shape memory alloy. *CIRP Ann.* **62**, 83–86 (2013).
 26. Shaw, J. A. & Kyriakides, S. THERMOMECHANICAL ASPECTS OF NiTi. *J. Mech. Phys. Solids* **43**, 1243–1281 (1995).
 27. Adharapurapu, R. R., Jiang, F., Bingert, J. F. & Vecchio, K. S. Influence of cold

- work and texture on the high-strain-rate response of Nitinol. *Mater. Sci. Eng. A* **527**, 5255–5267 (2010).
28. Yeung, K. W. K., Cheung, K. M. C., Lu, W. W. & Chung, C. Y. Optimization of thermal treatment parameters to alter austenitic phase transition temperature of NiTi alloy for medical implant. *Mater. Sci. Eng. A* **383**, 213–218 (2004).
 29. Vojtěch, D., Michalcová, A., Čapek, J., Marek, I. & Dragounová, L. Structural and mechanical stability of the nano-crystalline Ni-Ti (50.9 at.% Ni) shape memory alloy during short-term heat treatments. *Intermetallics* **49**, 7–13 (2014).
 30. Aun, D. P., Peixoto, I. F. da C., Houmard, M. & Buono, V. T. L. Enhancement of NiTi superelastic endodontic instruments by TiO₂ coating. *Mater. Sci. Eng. C* **68**, 675–680 (2016).
 31. Montalvão, D., Shengwen, Q. & Freitas, M. A study on the influence of Ni-Ti M-Wire in the flexural fatigue life of endodontic rotary files by using Finite Element Analysis. *Mater. Sci. Eng. C* **40**, 172–179 (2014).
 32. Martins, R. F., Fernandes, A., Lóios, G. & Ginjeira, A. Fatigue resistance of rotary endodontic files subjected to planar and non-planar curvatures induced by in vitro tooth canals. *Int. J. Struct. Integr.* **8**, 656–669 (2017).
 33. de Arruda Santos, L., López, J. B., de Las Casas, E. B., de Azevedo Bahia, M. G. & Buono, V. T. L. Mechanical behavior of three nickel-titanium rotary files: A comparison of numerical simulation with bending and torsion tests. *Mater. Sci. Eng. C* **37**, 258–263 (2014).
 34. Chang, Y.-Z., Liu, M.-C., Pai, C.-A., Lin, C.-L. & Yen, K.-I. Application of non-destructive impedance-based monitoring technique for cyclic fatigue evaluation of endodontic nickel–titanium rotary instruments. *Med. Eng. Phys.* **33**, 604–609 (2011).
 35. Santos, L. D. A., Resende, P. D., Bahia, M. G. D. A. & Buono, V. T. L. Effects of R-Phase on Mechanical Responses of a Nickel-Titanium Endodontic Instrument: Structural Characterization and Finite Element Analysis. *Sci. World J.* **2016**, 1–11 (2016).
 36. Leroy, Agnès M.F., Bahia, M.G.A, Ehrlacher, A., Buono, V. T. . An analytical mechanical model to describe the response of NiTi rotary endodontic files in a curved root canal. *Mater. Sci. Eng. C* **32**, 1594–1600 (2012).

37. Di Giuseppe, I., Di Giuseppe, D., Malagnino, V. A., Silla, E. P. & Somma, F. Conditioning of root canal anatomy on static and dynamics of nickel-titanium rotary instruments. *G. Ital. Endod.* **29**, 58–64 (2015).
38. Shen, Y., Zhou, H., Zheng, Y., Peng, B. & Haapasalo, M. Current Challenges and Concepts of the Thermomechanical Treatment of Nickel-Titanium Instruments. *J. Endod.* **39**, 163–172 (2013).
39. Pruett, J. P., Clement, D. J. & Carnes, D. L. Cyclic fatigue testing of nickel-titanium endodontic instruments. *J. Endod.* **23**, 77–85 (1997).

3 INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO E DA GEOMETRIA

Efeito do tratamento térmico e do design no comportamento mecânico de limas endodônticas: uma análise por elementos finitos

Este trabalho teve como objetivo associar os efeitos dos tratamentos térmicos e das variações geométricas às alterações mecânicas de instrumentos endodônticos. Duas limas comerciais com diferenças geométricas significativas, ProTaper Next X1 e ProTaper Universal S2, foram escolhidas para analisar a alteração no comportamento mecânico devido ao design. Três condições foram usadas para investigar os efeitos do tratamento térmico no comportamento das limas: i) estado como recebido, com estrutura totalmente austenítica (superelástica convencional); ii) tratamento térmico a 350 °C, cuja estrutura é de austenita superelástica recuperada; iii) tratado termicamente a 450 °C, composto completamente por fase R. Este estudo foi realizado pelo método dos elementos finitos, analisando as variáveis individualmente e combinações delas, possibilitando distinguir as influências devido à geometria ou tratamento térmico. Os resultados evidenciaram que uma seção transversal de menor área e excêntrica eleva a flexibilidade em limas e, conseqüentemente, reduz a rigidez torcional. Os níveis de tensão também são afetados por esses parâmetros, sendo que o instrumento excêntrico exibiu menor tensão sob os carregamentos de flexão e torção. Os tratamentos térmicos modificam as propriedades da liga NiTi, e a obtenção da fase R normalmente oferece maior flexibilidade juntamente com menores níveis de tensão. Dessa forma, a fase R tende a ser mais resistente à fadiga do que a austenita.

EFFECTS OF HEAT TREATMENT AND DESIGN ON MECHANICAL RESPONSES OF NITI ENDODONTIC INSTRUMENTS: A FINITE ELEMENT ANALYSIS

Suzanny Cristina Soares Martins¹, Jéssica Dornelas Silva¹, Ana Cecília Diniz Viana²,
Vicente Tadeu Lopes Bueno¹, Leandro Arruda Santos¹

¹Department of Metallurgical and Materials Engineering, School of Engineering, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brazil.

²Department of Restorative Dentistry, Faculty of Dentistry, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brazil.

Abstract

Heat treatments and geometries have a significant influence on the mechanical behavior of endodontic files. Finite element analyses were performed to verify the effects due to each of these parameters in NiTi files. Two designs and three NiTi atomic structures (resultant from different heat treatments) were selected for this study. The geometries of the ProTaper Next X1 and ProTaper Universal S2 files, and the structures of fully austenitic (conventional superelastic), austenite treat, and fully R-phased were used. The mechanical responses were evaluated under flexion and torsion loading conditions described by ISO 3630-1 specification. According to the results, the design of the X1 fipple exhibit higher flexibility in comparison to the S2 model. Under torsional loads, S2 showed higher stiffness. The structures of fully austenitic showed the least flexibility under flexion and the highest torsional stiffness. The stress levels reached for the austenitic condition were uppermost. The treated condition that resulted in a fully R-phase file usually presented a higher level of flexibility with lower stress levels, indicating a longer life in fatigue when compared to the other treatments.

Keywords: NiTi endodontic files, heat treatment, cross-sectional design, finite element analysis, bending and torsional loads.

3.1 Introduction

The use of NiTi alloys in endodontic instruments had an enormous impact on endodontic practice. These alloys exhibit greater flexibility and superior torsional strength when compared with stainless steel ¹. Also, NiTi alloy presents superior biocompatibility and corrosion resistance ^{2,3}. Despite the advantages of NiTi over stainless steels, NiTi endodontic files may exhibit unexpected fractures within the root canal ⁴. During canal preparation, endodontic files are subject to mechanical flexion and torsion loading caused by the canal anatomy itself, which is curved and narrow ⁵. Thus, the fracture of these instruments usually occurs by torsional overload or flexural fatigue. The torsional fracture occurs when the file gets locked into the canal, whilst the shaft continues to rotate. The flexural failure occurs due to the material's fatigue: the instrument rotates within a curved channel and experiences alternating traction/compression loads, resulting in fatigue ^{4,6-8}.

Several types of research have been done to prevent the failure of NiTi files ⁹⁻¹³. The main focus is to improve the mechanical properties under bending and torsion, which is the main loading conditions to which the instruments are subjected during use, and, consequently, to increase its resistance to fatigue ⁴. Variations in NiTi endodontic files have been made by different heat treatment conditions, geometric changes (modifying the cross-sectional shape, pitch length, taper), and manufacturing conditions ¹⁴⁻¹⁶. All these factors affect the clinical performance of rotary instruments.

Design elements of files have been widely investigated and demonstrated that pitch, cross-section shape, and area directly affect the mechanical behavior and degree of stress of these instruments ¹⁷⁻²². However, most of these studies compare files with different geometries but do not take into consideration the fact that the material's constitution and properties are also different. The occurrence of more than one variable makes it difficult to determine if the mechanical responses presented by the instruments are due solely to the geometry or to a combination of this variable with materials properties.

Different heat treatments aim to improve the properties of the NiTi alloy used for endodontic instruments ^{15,16,23,24}. Heat treating conventional superelastic NiTi, which is

in the austenite phase with B2 structure type, may transform its structure into an intermediate R-phase, which is a type of martensite with rhombohedral structure^{16,25}. R-phase heat treatments increase flexibility and resistance to cyclic fatigue in NiTi files¹⁶. The recent effort in this area is to develop files containing R-phase fully or coexisting with austenite (commercially named M-wire)⁴. Many studies experimentally compare treated files, M-wire or R-phase, with conventional superelastic ones^{5,15,26–28}. However, there are geometric variations between the evaluated instruments that may influence the results.

Since treatments and geometries seem to play an essential role in the file's behavior, in the present study, it was investigated the effects of these both variables on the mechanical of a NiTi endodontic instrument using finite element analysis (FEA). FEA offers the advantage of analyzing individual variables and combinations of them, distinguishing the influences due to geometry or heat treatment. Two designs with significant differences in the shape and area of the cross-section and the distribution of mass along its axis (one being eccentric and the other concentric) were chosen, and three NiTi structures obtained by distinct heat treatment conditions were selected for this study. The geometries of the ProTaper Next X1 and ProTaper Universal S2 files, and the structures of fully austenitic (conventional superelastic), recovered austenitic superelastic, and fully R-phased were used.

3.2 Materials and Methods

Two commercial files ProTaper Next X1 and ProTaper Universal S2 were chosen to analyze the variation in mechanical behavior due to geometry. Three conditions were used to investigate the effects of heat treatment on the behavior of the files: state as received, heat-treated at 350 °C and heat-treated at 450 °C.

Three-dimensional models were created using computer-assisted design (CAD) software SolidWorks 2016 to reproduce the current geometries of the ProTaper Next X1 and ProTaper Universal S2 files (Figures 3.1a and 3.1b, respectively). Both instruments have a similar diameter (0.17 mm and 0.20 mm tip diameter, for X1 and S2, respectively) and

the same taper (0.04%). However, they exhibit differences in cross-sectional shape, as can be seen in Figure 3.1. Also, X1 showing an eccentric cross-section geometry and S2 being concentric. The instruments had an active part length of 17 mm and a total length of 25 mm.

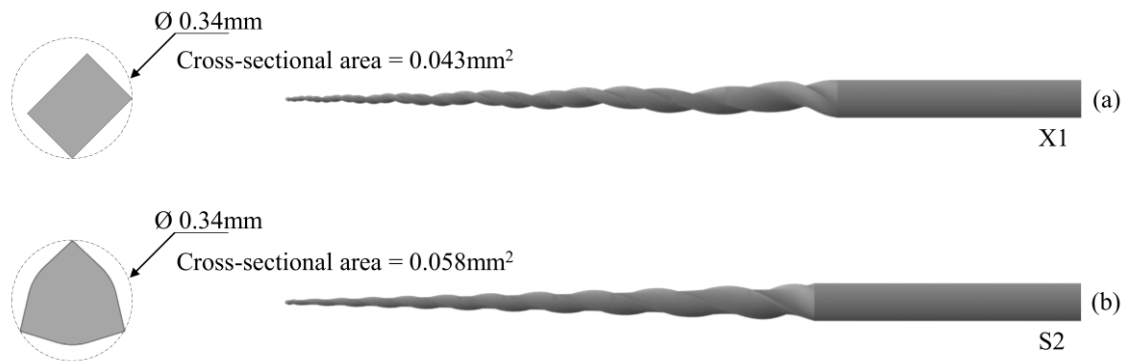


Figure 3.1 – Cross-section and geometric model of the (a) X1 and (b) S2 files

The 3D models have been exported to Abaqus 6.14-2 software and meshed for the finite element analysis (FEA) with 20-noded quadratic elements C3D20R (see Figure 3.2). The final finite element model of the X1 consisted of 2,244 elements with 13,329 nodes. The S2 model was composed of 2,292 elements integrating 13,038 nodes.

The heat treatment conditions applied, as well as the mechanical properties resulting from each condition, were obtained from work performed by Silva et al.²⁹, which heat-treated an initially superelastic NiTi wire. The as-received (AR) condition and heat treatment conditions performed at 350 °C and 450 °C were selected. According to Silva et al.²⁹, the microstructure of AR condition is a superelastic austenitic; the condition at 350 °C displays a recovered austenitic superelastic; and the condition at 450 °C is R-phase structure.

The samples will be named by combining the geometry with the heat treatment according to the examples: X1_350 is the X1 file with the treatment conditions at 350 °C; S2_AR refers to the S2 geometry with the condition parameters as received.

The behavior of a superelastic alloy was simulated with the aid of a user-defined subroutine implemented in the Abaqus code based on the constitutive model proposed by Auricchio and Petrini ³⁰. The required parameters for this subroutine extracted from the work of Silva et al. ²⁹ are described in Table 3.1.

Table 3.1 – Parameters used to describe the constitutive model for simulation

Parameter	Description	AR	S350	S450
E_A	Austenite elasticity	55,737 MPa	42,389 MPa	52,192 MPa
V_A	Austenite Poisson's ration	0.33	0.33	0.33
E_M	Martensite elasticity	19,106 MPa	22,383 MPa	20,877 MPa
V_M	Martensite Poisson's ration	0.33	0.33	0.33
ε^L	Transformation strain	8.6%	7.2%	6.4%
$(\delta\sigma/\delta T)_L$	$(\delta\sigma/\delta T)$ loading	6.7	6.7	6.7
σ_L^S	Start of transformation loading	448 MPa	389 MPa	316 MPa
σ_L^E	End of transformation loading	511 MPa	459 MPa	355 MPa
T_0	Reference temperature	25 °C	25 °C	25 °C
$(\delta\sigma/\delta T)_U$	$(\delta\sigma/\delta T)$ unloading	6.7	6.7	6.7
σ_U^S	Start of transformation unloading	161 MPa	104 MPa	6.95 MPa
σ_U^E	End of transformation unloading	118 MPa	43 MPa	6.95 MPa

Figure 3.2 shows the boundary conditions used in this study to reproduce experimental bending and torsion tests for endodontic instruments based on ISO 3630 specification ³¹:

- 1) For the bending resistance test, the file was held at 3 mm from the tip, preventing any displacement in the x, y, and z axes. The shaft was then deflected until 45° of inclination;
- 2) For the torsion resistance test, the endodontic instrument was also held at 3 mm from the tip, and clockwise torsional moments of 0.10 N.cm for X1 and 0.20 N.cm for S2 were applied at the end of the shaft. The different torsion values were chosen based on the mechanical resistance of each instrument so as not to reach their yield limit.

The mechanical behavior was characterized in terms of flexibility and stress distribution. The stresses in the file models were depicted in terms of von Mises equivalent stress.

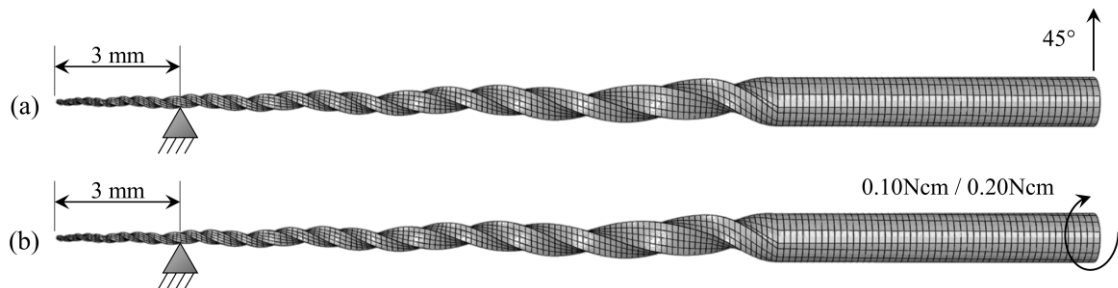


Figure 3.2 – Loading conditions for (a) the bending and (b) torsion test

3.3 Results

Bending tests

Figure 3.3 shows the variation of the simulated bending moment caused by the flexion of the files up to 45°. In this context, flexibility can be defined as the moment needed to bend the instrument without causing permanent deformation. X1 geometry provides greater flexibility than S2. In general, the heat treatment at 450 °C resulted in higher flexibility than the heat treatment at 350 °C. The AR condition is the least flexible.

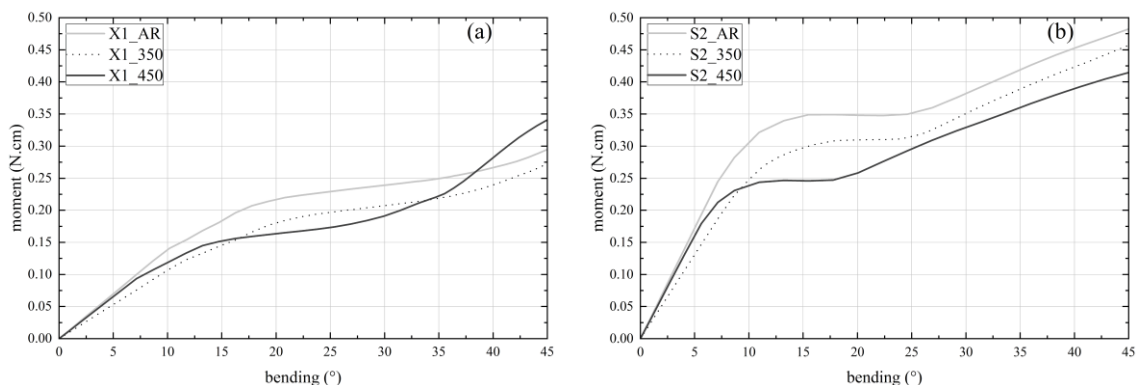


Figure 3.3 – Numerical moment-bending curves: (a) X1 file and their respective conditions and (b) S2 file and their respective conditions

A peculiarity is noted in X1_450 when compared with the other conditions. Initially, X1_450 exhibits greater flexibility, but around 33° of bending its behavior changes, reaching the lowest flexibility at 45°. This behavior occurs due to the shorter length of

the martensitic transformation plateau verified for the condition treated at 450 °C (see Table 3.1). At 45°, the elastic deformation of martensite already occurs for X1_450, in which there is a greater inclination due to the stress rising at a higher rate.

A maximum moment of 0.295 N.mm was calculated for X1_AR. For X1_350 and X1_450 the maximum moments were 0.273 N.mm and 0.341 N.mm, respectively. S2_AR exhibited 0.483 N.mm at 45°, for S2_350 it was 0.457 N.mm and for S2_450, 0.457 N.mm.

The von Mises stress distributions along with the instruments and in the cross-section at 3 mm from the tip under bending are illustrated in Figures 3.4 and 3.5, respectively. The von Mises stress for S2 design is higher than the one calculated for X1: S2 reaches values close to 1,400 MPa, while X1 does not exceed 1,000 MPa. Both heat treatments decreased the stress level, being the treatment at 450 °C the most effective in terms of stress reduction under bending, which means the ideal condition to obtain more flexible instruments. The highest von Mises stresses were obtained in AR condition. The stress is concentrated near the tip held region and located at the periphery of the cross-section, whereas the central area exhibited zero or lower stresses.

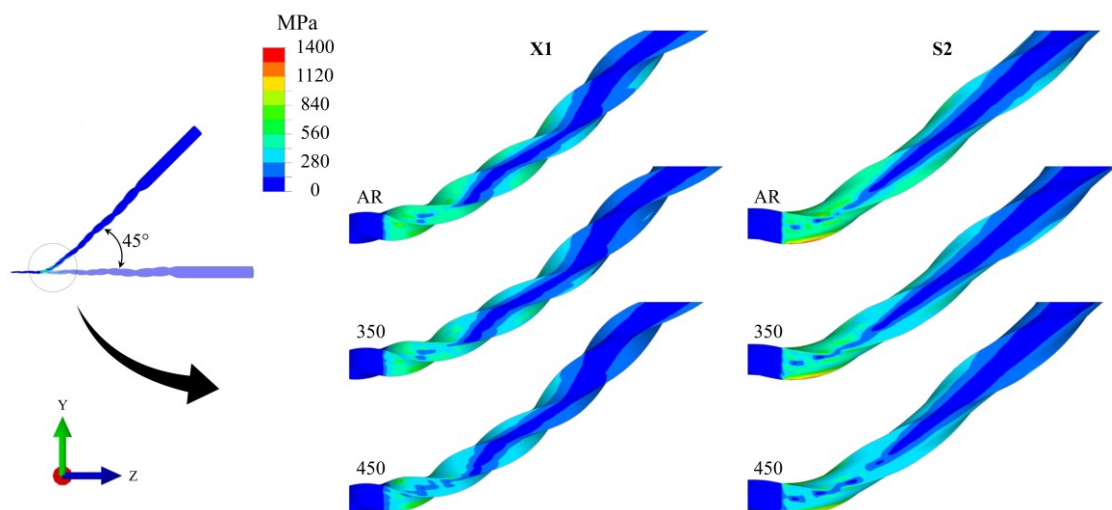


Figure 3.4 – The von Mises stress distribution along with the body instruments under bending

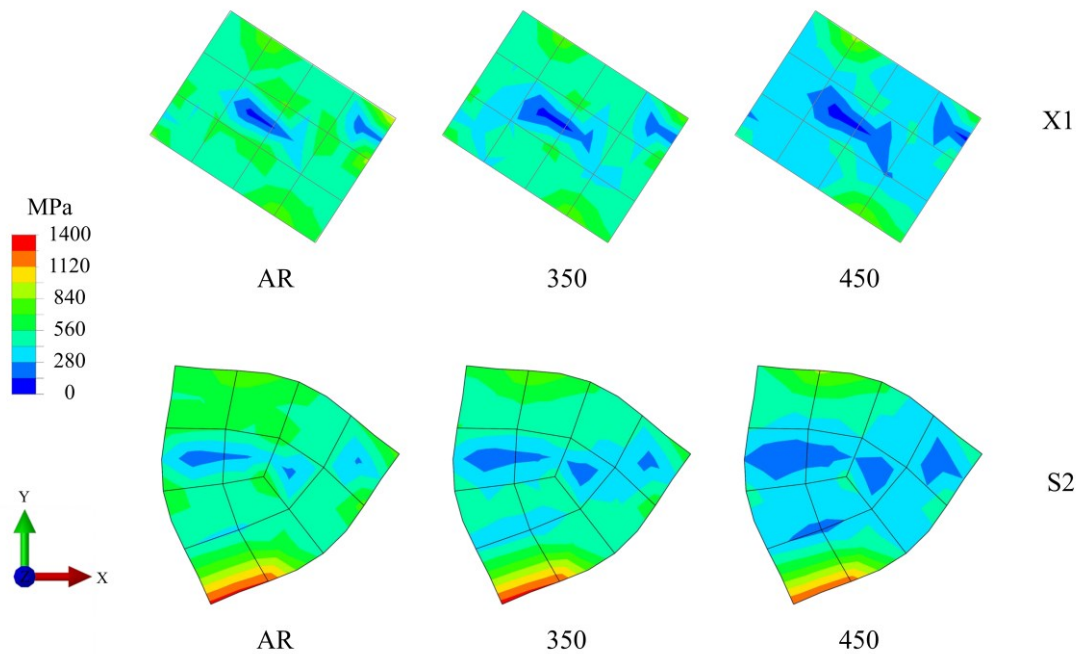


Figure 3.5 – The von Mises stress distribution in the cross-section at 3 mm from the tip under bending

Figure 3.6 shows the mean stress curves in the cross-sections illustrated in Figure 3.5. The stresses achieved for X1 are lower than the ones calculated for S2, considering the same condition. The improvement in bending resistance at 450 °C is observed for both geometries. Again, the heat treatment at 450 °C generated the lowest stress levels, while AR reached the highest stress.

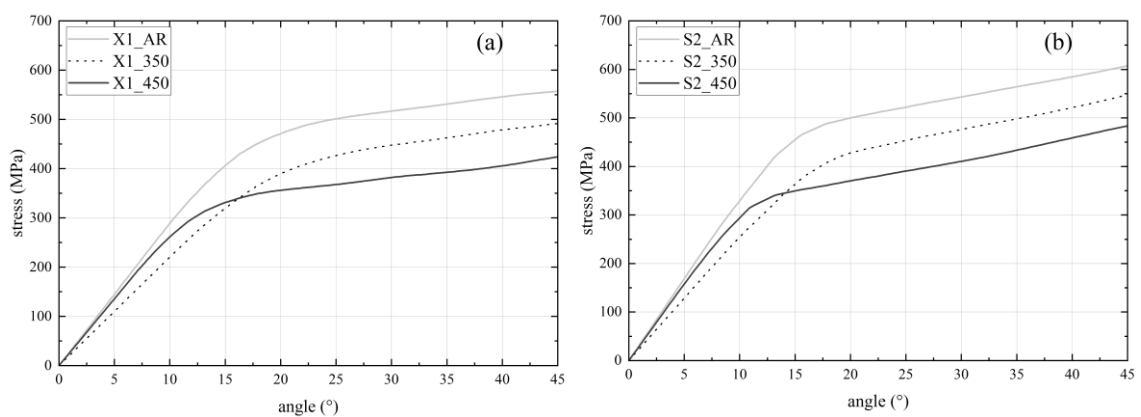


Figure 3.6 – Mean stress curves under bending

Torsion test

Figure 3.7 shows the distortion angles as a function of the applied torque under torsional loading. The curves are interrupted at the maximum torsional moment used of 0.10 N.cm for X1, and 0.20 N.cm for S2. Considering the torsional stiffness as the moment needed to rotate the instrument, it is observed that the S2 files are more rigid than the X1 ones. For both geometries, the heat treatments resulted in similar behavior. The AR condition presented the superior stiffness, whilst the heat treatment at 450 °C reduced the torsional stiffness of the instruments. The total angular displacement for X1_AR, X1_350, and X1_450 was 63.0°, 82.1°, and 109.3°, respectively. The S2_AR presented an angular displacement of 88.1°, S2_350 present 97.4°, and S2_450 deformed up to 117.9°.

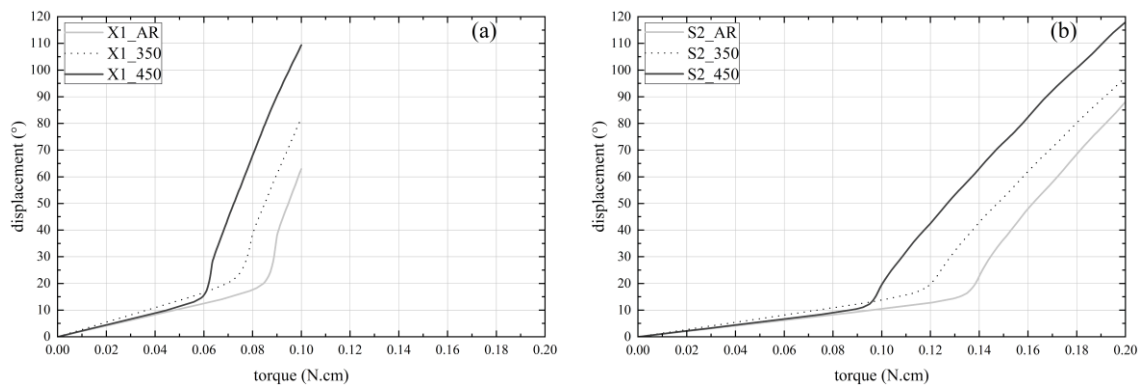


Figure 3.7 – Numerical displacement-torque curves: (a) X1 file and their respective conditions and (b) S2 file and their respective conditions

Figures 3.8 and 3.9 illustrated the von Mises stress distribution in the files after the torsion resistance test along with the body and the cross-section, respectively. To facilitate data analysis, the stresses shown under torsion are presented considering the maximum torsional moment of 0.10 N.cm for both geometries in all conditions.

The stress is concentrated near the constrained part and decreased as it moved away from the tip. The highest stresses were located at the periphery of the cross-section. Unlike what happens under bending, the high stresses are located in central regions, between the cutting edges, and not at the corners. Also, certain symmetry is verified in the stress distribution under twisting.

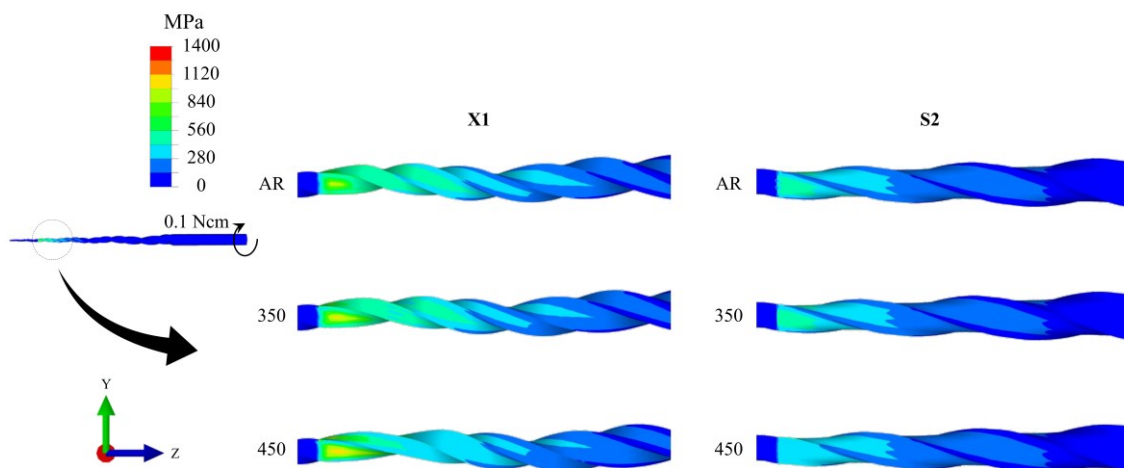


Figure 3.8 – The von Mises stress distribution along with the body instruments under torsion

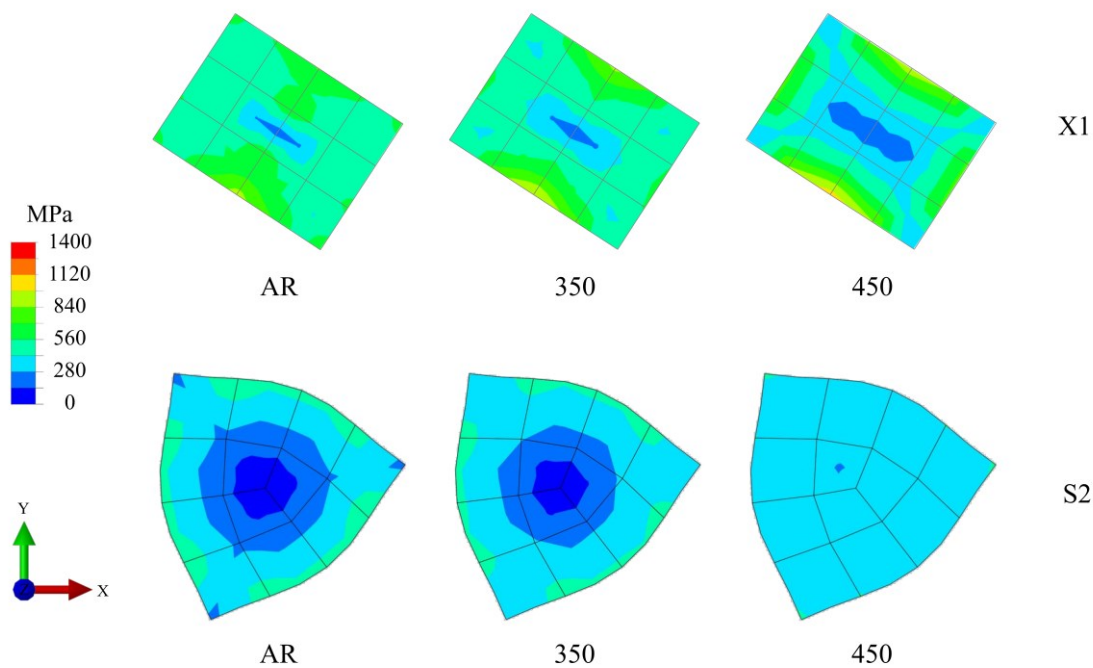


Figure 3.9 – The von Mises stress distribution in the cross-section at 3 mm from the tip under torsion

In X1 geometry, the heat treatments increased the stress on the surfaces of the files and, at the same time, diminished the stress in the central area. The opposite happens for S2, with stress reduction in peripheral regions, while the central part presented a slight decrease in stress.

The average stress curve under torsion up to 0.10 N.cm for both geometries in all conditions is exhibited in Figure 3.10. It is noted that the stress levels achieved in S2 are considerably lower than in X1. When applying the same torque to both instruments, S2 deforms less, resulting in lower stresses. Concerning heat treatment, results were similar to the ones under the bending condition, where heat treatment at 450 °C promoted the most moderate stresses considering the same angle.

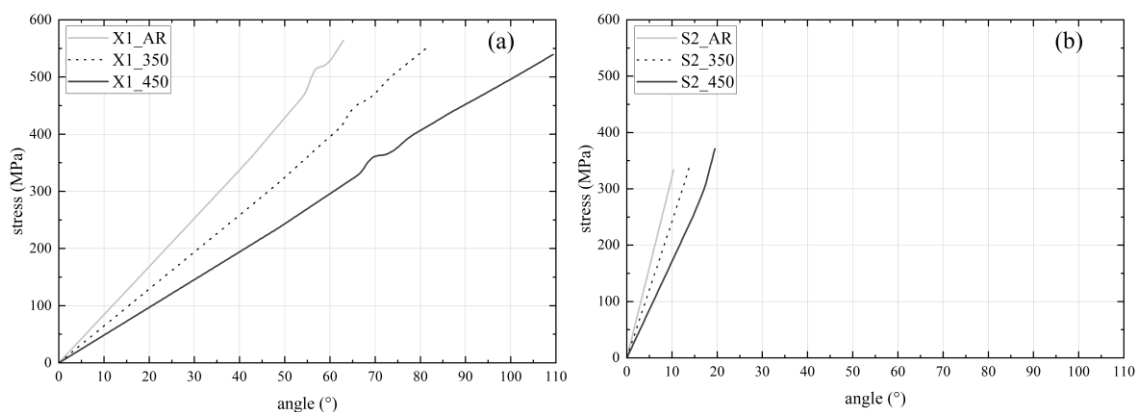


Figure 3.10 – Mean stress curves under torsion

3.4 Discussion

NiTi alloys were applied to endodontic instruments to facilitate the process of shaping root canals. However, unexpected fractures may occur in these files. Manufacturers seek to eliminate this problem by exploring several areas, including geometric changes, heat treatments, and manufacturing processes^{32,33}.

Several changes in design have been made to the shape of the cross-section, in its eccentricity, taper and pitch^{34,35}. Heat treatments have also been widely applied to improve the fatigue resistance of endodontic instruments. The thermal process carried out in conventional NiTi alloys alter the atomic structures present in this material and, consequently, modify its mechanical properties^{33,36}. NiTi alloys can have three phases in their microstructure: austenite, martensite, and R-phase. The austenite phase is resistant and rigid, while martensite and R-phase are flexible and quite ductile. The compositions of the three phases have an enormous influence on the mechanical characteristics of NiTi, and the presence of these phases is directly related to the heat treatment^{25,33}. Depending

on the heat treatment performed, the martensitic transformation can happen in a single stage (austenite (A) to martensite (M)) or two stages (A to R to M). Generally, the single-stage occurs in Ni-rich NiTi alloys, and the dual-stage transformation happens after a previous treatment that results in fine and dispersed Ni₃Ti₄ precipitates in the austenitic matrix³⁶.

With so many possible variations to be made on endodontic files, manufacturers already explored a myriad of production routes to achieve better clinical behavior. However, at research levels, it is not precisely known what the influence is due to each variation in an isolated way since commercial files differ from both geometry and material frequently. Thus, the present work sought to link each response of the files to their mechanical/metallurgical alteration. For this, using the finite element method, two different file geometries were compared, applying three conditions of heat treatment of NiTi alloys. The behavior of these files was analyzed by bending and torsion test.

Numerical results of the mechanical behavior showed that the X1 geometry promotes greater flexibility under flexion and less torsional stiffness to the instrument when compared to S2. This fact is intrinsically related to the cross-section of each file. Higher torsional stiffness in S2 was already expected since the area of its cross-section is 35% larger than that of X1 (Figure 3.1). Several studies reported that larger cross-sectional areas have a higher torsional stiffness^{34,35,37}. The resistance to torsion is required for a better cutting efficiency^{15,38}.

For design X1, the torsional stiffness is lower, but its flexibility under bending is higher than S2. In general, higher flexibility means lower torsional stiffness⁴. This behavior can be confirmed by Figures 3.3 and 3.7. High flexibility is sought because this allows rotary instruments to follow the curvature of the root canal more efficiently, maintain the shape of canals^{1,7,15}. The flexibility in X1 can be related both to its smaller cross-sectional area and to the instrument's eccentricity. First, the flexibility was inversely proportional to the area moment of inertia. Also, the eccentric geometry of the cross-section modifies the mass distribution along the axis of the instrument. Due to this off-centered geometry,

some studies that compared concentric and eccentric files found that off-centered files had greater flexibility^{22,27,39-41}.

As shown in Figures 3.4-3.6 and Figures 3.8-3.10, the geometric differences between X1 and S2 change the stress level in the files. X1 experienced lower stress under bending than the S2. These results suggest that X1 instruments might experience a longer fatigue life since when subjected to lower levels of stress, it would postpone its rupture by bending.

Under torsion, it was S2 who exhibited the lowest stress levels. This fact is associated with the higher torsional stiffness presented by S2, which makes this instrument more resistant to torsion loading and, consequently, reaches much lower levels of stress, as seen in Figure 3.10.

Regarding thermal treatments, it was observed that the condition AR, which exhibits austenite in its structure, provides the least flexibility and, consequently, the highest torsional stiffness. Previous studies have already reported this fact^{4,5,24}. With the heat treatment at 350 °C, the phase present in the material is still austenite, but with recovered and rearranged dislocations. This condition of heat treatment promoted an increase in flexibility when compared to AR. This behavior is related to the reduction of the start of transformation loading (Table 3.1), in which the material enters the region of the plateau with lower stress. As a consequence of the increase in flexibility, there is a decrease in torsional stiffness.

The heat treatment carried out at 450 °C promoted an even more significant structural change than at 350 °C. In this case, the austenitic matrix is replaced by the R-phase. This phase is more flexible than austenite, as some studies have reported^{4,9,24,42,43}. Usually, the R-phase also promotes a considerable increase in flexibility of instruments due to its lowest elastic modulus and plateau stress values^{4,9,24}. However, it is noteworthy that a particular behavior was observed under flexion for the X1_450 file (Figure 3.3). It was found that, initially, the condition treated at 450 °C resulted in lower flexibility. However, by the end of the bending test, the behavior changes, with a difference in the slope of the

curve, and X1_450 reached a moment value greater than X1_AR and X1_350 at 45°. This behavior is associated with the presence of the R-phase and the geometry of the instrument. As the R-phase is an intermediate between austenite and martensite, it is easier to transform R-phase into martensite. This facility is due to the lower level of transformation, both in terms of stress and percentage of strain. Thus, it appears that the X1_450 file is more flexible in smaller angular deflections. However, for greater deflections, it reaches the end of the martensitic transformation plateau, entering the field of elastic deformation of martensite. As a result, the stress increases with a higher deflection rate, reaching a higher moment value. Since this comportment is not observed for S2, it can be seen that the geometry of X1 changes the moment of transformation of the R-phase into martensite.

The lowest stress value was related to R-phase models. R-phase has a much smaller stiffness than the other phases, thus allowing for stress relaxation during the deformation of endodontic instruments. The stresses reached by a file are related to its useful life. The fatigue life varies inversely with the amplitude of the stress to which the files are subjected in the shape canal procedure⁴⁴. R-phase instrument exhibited low-stress values under bending, indicating that this condition tends to be more fatigue resistant. Even under torsion, R-phase models show low stresses, which would indicate a satisfactory performance against failure due to torsional overloading⁴. This analysis of the R-phase exhibiting a longer fatigue life is similar to the results obtained by Silva et al.²⁹. Silva et al.²⁹ verified by experimental tests that the fatigue life of the condition treated at 450 °C is higher than at 350 °C, which in turn is superior to AR. Therefore, the results obtained by simulation agree with the experimental data.

3.5 Conclusions

In this paper, the effects of treatments and geometries on endodontic files were studied. The following conclusions could be drawn:

- The design influences the mechanical behavior of endodontic files. Increased flexibility is achieved with a smaller cross-sectional area. The torsional stiffness is improved by increasing the cross-sectional area.

- Geometry changes the pattern of stress distribution, influencing the fatigue resistance of files. The eccentric file generated less stress than the concentric one.
- Heat treatments alter the phases present in the NiTi alloy by modifying its mechanical properties. R-phase usually offers greater flexibility and tends to be more resistant to fatigue than austenite.

Acknowledgements

This work was financed by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (Capes) – Finance Code 001, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – Brasil (CNPq), and Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais – Brasil (Fapemig). SCSM acknowledges Professor Estevam B. Las Casas for the valuable support during the numerical analysis.

3.6 References

1. Legrand, V. *et al.* Mechanical Behavior of a NiTi Endodontic File During Insertion in an Anatomic Root Canal Using Numerical Simulations. *J. Mater. Eng. Perform.* **24**, 4941–4947 (2015).
2. Gavini, G. *et al.* Nickel-titanium instruments in endodontics: A concise review of the state of the art. *Braz. Oral Res.* **32**, 44–65 (2018).
3. Carmine, M., Fabrizio, N., Emanuele, S. & Franco, F. Analysis of fatigue damage in shape memory alloys by nanoindentation. *Mater. Sci. Eng. A* **684**, 335–343 (2017).
4. Santos, L. D. A., Resende, P. D., Bahia, M. G. D. A. & Buono, V. T. L. Effects of R-Phase on Mechanical Responses of a Nickel-Titanium Endodontic Instrument: Structural Characterization and Finite Element Analysis. *Sci. World J.* **2016**, 1–11 (2016).
5. Galal, M., Ismail, A. G., Omar, N., Zaazou, M. & Nassar, M. A. Influence of Thermomechanical Treatment on the Mechanical Behavior of Protaper Gold versus Protaper Universal (A Finite Element Study). *Open Access Maced. J. Med. Sci.* **7**, 2157–2161 (2019).
6. de Arruda Santos, L., López, J. B., de Las Casas, E. B., de Azevedo Bahia, M. G.

- & Buono, V. T. L. Mechanical behavior of three nickel-titanium rotary files: A comparison of numerical simulation with bending and torsion tests. *Mater. Sci. Eng. C* **37**, 258–263 (2014).
7. Montalvão, D., Shengwen, Q. & Freitas, M. A study on the influence of Ni-Ti M-Wire in the flexural fatigue life of endodontic rotary files by using Finite Element Analysis. *Mater. Sci. Eng. C* **40**, 172–179 (2014).
 8. Shim, K. *et al.* Mechanical and Metallurgical Properties of Various Nickel-Titanium Rotary Instruments. *Biomed Res. Int.* **2017**, 1–13 (2017).
 9. Braz Fernandes, F. M., Alves, A. R., Machado, A. & Oliveira, J. P. Effect of heat treatments on Ni-Ti endodontic files. *Cienc. e Tecnol. dos Mater.* **29**, e15–e18 (2017).
 10. Lo Savio, F., Pedullà, E., Rapisarda, E. & La Rosa, G. Influence of heat-treatment on torsional resistance to fracture of nickel-titanium endodontic instruments. *Procedia Struct. Integr.* **2**, 1311–1318 (2016).
 11. Gambarini, G. *et al.* Fatigue Resistance of Engine-driven Rotary Nickel-Titanium Instruments Produced by New Manufacturing Methods. *J. Endod.* **34**, 1003–1005 (2008).
 12. Larsen, C. M., Watanabe, I., Glickman, G. N. & He, J. Cyclic Fatigue Analysis of a New Generation of Nickel Titanium Rotary Instruments. *J. Endod.* **35**, 401–403 (2009).
 13. Versluis, A., Kim, H. & Lee, W. Flexural Stiffness and Stresses in Nickel-Titanium Rotary Files for Various Pitch and Cross-sectional Geometries. *J. Endod.* **38**, 1399–1403 (2012).
 14. Melo, M. C. C. *et al.* Dimensional characterization and mechanical behaviour of K3 rotary instruments. *Int. Endod. J.* **41**, 329–338 (2008).
 15. Prados-Privado, M., Rojo, R., Ivorra, C. & Prados-Frutos, J. C. Finite element analysis comparing WaveOne, WaveOne Gold, Reciproc and Reciproc Blue responses with bending and torsion tests. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **90**, 165–172 (2019).
 16. Gu, Y. *et al.* Various heat-treated nickel–titanium rotary instruments evaluated in S-shaped simulated resin canals. *J. Dent. Sci.* **12**, 14–20 (2017).
 17. Basheer Ahamed, S. B., Vanajassun, P. P., Rajkumar, K. & Mahalaxmi, S.

- Comparative Evaluation of Stress Distribution in Experimentally Designed Nickel-titanium Rotary Files with Varying Cross Sections: A Finite Element Analysis. *J. Endod.* **44**, 654–658 (2018).
18. 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. *J. Endod.* **29**, 15–19 (2003).
 19. La Rosa, G., Lo Savio, F., Pedullà, E. & Rapisarda, E. Developing of a new device for static and dynamic tests of Ni-Ti instruments for root canal treatment. *Procedia Struct. Integr.* **2**, 1303–1310 (2016).
 20. Turpin, Y. L., Chagneau, F. & Vulcain, J. M. Impact of two theoretical cross-sections on torsional and bending stresses of nickel-titanium root canal instrument models. *J. Endod.* **26**, 414–417 (2000).
 21. Ha, J., Kim, S. K. & Cohenca, N. Effect of R-phase Heat Treatment on Torsional Resistance and Cyclic Fatigue Fracture. *J. Endod.* **39**, 389–393 (2013).
 22. Ha, J. H. *et al.* The geometric effect of an off-centered cross-section on nickel–titanium rotary instruments: A finite element analysis study. *J. Dent. Sci.* **12**, 173–178 (2017).
 23. Özyürek, T., Uslu, G., Yılmaz, K. & Gündoğar, M. Effect of Glide Path Creating on Cyclic Fatigue Resistance of Reciproc and Reciproc Blue Nickel-titanium Files: A Laboratory Study. *J. Endod.* **44**, 1033–1037 (2018).
 24. Zupanc, J., Vahdat-Pajouh, N. & Schäfer, E. New thermomechanically treated NiTi alloys – a review. *Int. Endod. J.* **51**, 1088–1103 (2018).
 25. Otsuka, K. & Wayman, C. M. *Shape Memory Materials*. Cambridge University Press (1998).
 26. Alcalde, M. P. *et al.* Correction to: Cyclic fatigue and torsional strength of three different thermally treated reciprocating nickel-titanium instruments. *Clin. Oral Investig.* **22**, 1865–1871 (2018).
 27. Goo, H.-J., Kwak, S. W., Ha, J.-H., Pedullà, E. & Kim, H.-C. Mechanical Properties of Various Heat-treated Nickel-titanium Rotary Instruments. *J. Endod.* **43**, 1872–1877 (2017).
 28. Keskin, C., Inan, U., Demiral, M. & Keleş, A. Cyclic Fatigue Resistance of Reciproc Blue, Reciproc, and WaveOne Gold Reciprocating Instruments. *J.*

- Endod.* **43**, 1360–1363 (2017).
29. Silva, J. D. *et al.* Effects of aging treatments on the fatigue resistance of superelastic NiTi wires. *Mater. Sci. Eng. A* **756**, 54–60 (2019).
 30. 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.* **61**, 807–836 (2004).
 31. INTERNATIONAL STANDARD Dentistry — Endodontic, (2013).
 32. Çapar, I. D. & Arslan, H. A review of instrumentation kinematics of engine-driven nickel-titanium instruments. *Int. Endod. J.* **49**, 119–135 (2016).
 33. Hieawy, A., Haapasalo, M., Zhou, H., Wang, Z. J. & Shen, Y. Phase Transformation Behavior and Resistance to Bending and Cyclic Fatigue of ProTaper Gold and ProTaper Universal Instruments. *J. Endod.* **41**, 1134–1138 (2015).
 34. Kim, H. C. *et al.* Cyclic fatigue and torsional resistance of two new nickel-titanium instruments used in reciprocation motion: Reciproc Versus WaveOne. *J. Endod.* **38**, 541–544 (2012).
 35. Baek, S. H. *et al.* Comparison of torsional stiffness of nickel-titanium rotary files with different geometric characteristics. *J. Endod.* **37**, 1283–1286 (2011).
 36. Otsuka, K. & Ren, X. Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys. *Prog. Mater. Sci.* **50**, 511–678 (2005).
 37. 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. *J. Endod.* **36**, 1394–1398 (2010).
 38. El-Anwar, M. I., Yousief, S. A., Kataia, E. M. & El-Wahab, T. M. A. Finite Element Study on Continuous Rotating versus Reciprocating Nickel-Titanium Instruments. *Braz. Dent. J.* **27**, 436–441 (2016).
 39. Capar, I. D., Ertas, H., Ok, E., Arslan, H. & Ertas, E. T. Comparative study of different novel nickel-titanium rotary systems for root canal preparation in severely curved root canals. *J. Endod.* **40**, 852–856 (2014).
 40. Elnaghy, A. M. Cyclic fatigue resistance of ProTaper Next nickel-titanium rotary files. *Int. Endod. J.* **47**, 1034–1039 (2014).
 41. Pérez-Higueras, J. J., Arias, A., de la Macorra, J. C. & Peters, O. A. Differences in

- cyclic fatigue resistance between ProTaper Next and ProTaper Universal instruments at different levels. *J. Endod.* **40**, 1477–1481 (2014).
42. Urbina, C., De la Flor, S. & Ferrando, F. Effect of thermal cycling on the thermomechanical behaviour of NiTi shape memory alloys. *Mater. Sci. Eng. A* **501**, 197–206 (2009).
 43. Galal, M. Metallurgical effect on the mechanical behavior of rotary endodontic files using finite element analysis. *Bull. Natl. Res. Cent.* **43**, 125 (2019).
 44. Vieira, E. P., França, E. C., Martins, R. C., Bueno, V. T. L. & Bahia, M. G. A. Influence of multiple clinical use on fatigue resistance of ProTaper rotary nickel-titanium instruments. *Int. Endod. J.* **41**, 163–172 (2007).

4 EFEITO DA EXCENTRICIDADE GEOMÉTRICA

Aspectos da excentricidade geométrica e suas influências na performance de limas endodônticas NiTi avaliada pelo método dos elementos finitos

Neste estudo buscou-se avaliar a influência que a excentricidade geométrica da seção transversal exerce sobre o comportamento mecânico de limas endodônticas. A excentricidade foi analisada de maneira isolada, mantendo os outros parâmetros constantes, como material, taper, pitch, forma e geometria da seção transversal. Essa análise foi realizada pelo método dos elementos finitos, utilizando duas condições de limas excêntricas com formas geométricas utilizadas comercialmente, ProTaper Next X1 e X2. De acordo com os resultados, os instrumentos excêntricos exibem inferior flexibilidade que os concêntricos. No entanto, a excentricidade altera a distribuição de tensão, diminuindo a tensão máxima sob flexão. Sob cargas de torção, não foram observadas diferenças significativas. Sendo assim, a seção transversal excêntrica não aumenta a flexibilidade em limas, mas possibilita formatar uma maior área do canal usando uma seção transversal de menor área, combinando níveis mais baixos de tensão e maior eficiência.

**OFF-CENTERED GEOMETRY AND ITS INFLUENCE ON NITI
ENDODONTIC FILES PERFORMANCE EVALUATED BY FINITE ELEMENT
ANALYSIS**

Suzanny Cristina Soares Martins¹, Paula Ribeiro Garcia², Ana Cecília Diniz Viana²,
Vicente Tadeu Lopes Buono¹, Leandro Arruda Santos¹

¹Department of Metallurgical and Materials Engineering, School of Engineering, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brazil.

²Department of Restorative Dentistry, Faculty of Dentistry, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brazil.

Abstract

The influence of cross-sectional eccentricity on the flexibility, torsional stiffness, and stress distribution in NiTi endodontic files was studied by finite element modeling. Three-dimensional (3D) models were built in order to reproduce commercial ProTaper Next X1 and X2 off-centered geometry instruments. Additionally, other 3D models with geometries similar to X1 and X2, but with concentric cross-sections, were created to isolate the eccentricity variable. The material properties and boundary conditions used in this study were the same for all instruments. The mechanical responses of each concentric/eccentric pair were evaluated under flexion and torsion loading conditions described by ISO 3630-1 specification. According to the results, off-centered files exhibit lower flexibility in comparison with their concentric counterparts. However, the eccentricity promoted a change in the stress distribution pattern so that the off-centered instruments showed lower maximum stress values under bending. Under torsional loads, no significant differences were observed. It is concluded that the mechanical and clinical advantages of an offset cross-section are not related to the increase of flexibility but rather to the optimization of the final diameter of the formatted root canal using instruments with lower mass. Also, there is a reduction in stress levels, increasing fatigue life, and improving the performance of the endodontic files.

Keywords: NiTi endodontic files, shape memory alloys, finite element analysis, off-centered geometries, bending and torsional loads.

4.1 Introduction

Nickel-titanium alloys are used in several areas, such as medicine and dentistry. NiTi endodontic instruments present superior flexibility when compared with their stainless steel counterparts due to the superelasticity. This property is one of the characteristics of shape memory alloys (SMA) that allows the material to recover high levels of deformation after removal of the load. This behavior of SMA is due to solid-solid martensite transformation that occurs between two different crystallographic structures, austenite and martensite. The stress-induced reversible transformation of austenite to martensite occurs within a specific temperature range.^{1,2} The superelasticity allows NiTi rotary instruments to follow the curvature of the root canal more efficiently, reducing the possibility of aberrations^{3,4}. Despite their advantages, the failure of NiTi files during the endodontic practice is still a concern. During use, the instrument endures considerable stress and strain levels, which can result in plastic deformation and failure. Generally, the failure is caused by torsional overloading or flexural fatigue. The torsional fracture occurs when the file gets locked into the canal while the shaft continues to rotate. On the other hand, the flexural failure occurs due to the material's fatigue: the instrument rotates inside a curved canal and experiences alternating traction/compression loads, resulting in fatigue³⁻⁶. Although both modes of failure may coincide in a clinical setting, the flexural fatigue usually prevails in curved root canals, whereas the torsional failure may occur even in a straight canal⁷.

Researchers and manufacturers have been incorporated new manufacturing techniques into NiTi endodontic instruments to suppress the possibility of fracture by improving their physical and mechanical properties⁸⁻¹⁰. Among these new techniques, thermomechanical treatments and new geometric forms are the leading solutions invested in improving the clinical performance. It was exhaustively demonstrated that geometric features (e.g., cross-sectional design, pitch, and taper) directly affect the mechanical behavior and the degree of stress of these instruments^{5,11-15}. Most of the efforts made to obtain an optimized geometry have focused on the flexibility and torsional stiffness of the files^{10,12,14,16-21}.

Files with off-centered cross-section geometries have been developed, such as the Revo-S and ProTaper Next system, as a new improvement in terms of mechanical performance^{5,22,23}. The manufacturers claim that instruments with an off-centered cross-section design exhibit a “snake-like” shape that promotes a movement style responsible for reducing stresses during its rotation^{5,24,25}. Also, this snake-like design gives the file a reduced pattern of contact between the instrument and the walls of the root canal, increasing the space necessary for the removal of debris^{5,11,24,25}. Nevertheless, the isolated effects of this off-centered cross-section on the mechanical behavior of the files still lack investigation. Previous works on off-centered cross-sectional instruments have been published^{5,22,26–31}, but they did not isolate the eccentricity as the only variable. Thus, the role played by a myriad of geometrical features or various material properties found in different files could not be precisely separated from the final observations. Finite element simulation can help in this interesting task since it allows us to define the attribute we need to vary. Furthermore, this method calculates the stress distribution in the files, which is very difficult to measure experimentally. Since the stress levels are related to the fatigue life of the instruments, it is possible to infer this property of files applying different parameters (like geometry) and assessing the behavior of the instrument before prototyping^{4,32–36}.

Thus, the present study aims to evaluate the isolated effects of the off-centered cross-section on the mechanical behavior and in the stress distribution of NiTi endodontic instruments, through torsion and bending conditions by finite element analysis.

4.2 Materials and Methods

Three-dimensional (3D) models were created using the computer-assisted design (CAD) software SolidWorks 2016 to reproduce the actual geometries of the ProTaper Next **X1** and **X2** files (Figures 4.1a and 4.1b, respectively), which present off-centered cross-sections (Figure 4.1c). These 3D models were constructed according to geometric measurements of the real instruments. Three instruments of each type were photographed with a high-resolution digital camera, and three images from each sample were analyzed by ImageJ software. Diameter measurements were taken by plotting tangents to the

external surfaces of the instrument and then measuring the distance between these tangents at each millimeter from the tip of the instrument. The pitch measurement was performed by measuring the length between each “valley” of the file geometry, as shown in Figure 4.2.

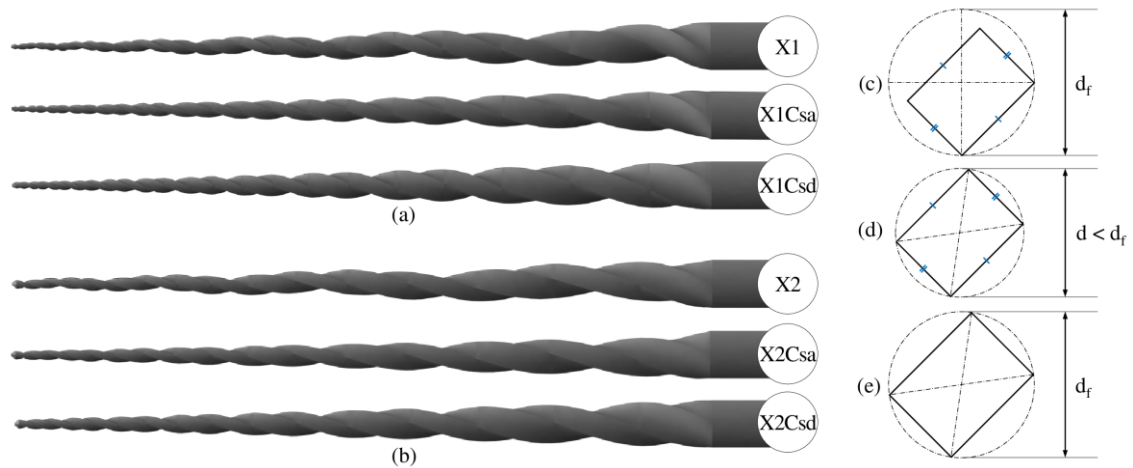


Figure 4.1 – Cross-section and geometric model of the analyzed files: (a) X1 file and its concentric geometry counterparts X1Csa and X1Csd, (b) X2 file and its concentric geometry counterparts X2Csa and X2Csd, (c) cross-section representation of an off-centered geometric model, and its counterparts with (d) the same area (Csa), and (e) the same functional diameter (Csd)

On the other hand, similar geometries were virtually created with concentric cross-sections to investigate the isolated effects of eccentricity on the behavior of the files. One of the types, named **X1Csa** (X1 concentric with the same cross-sectional area) and **X2Csa** (X2 concentric with the same cross-sectional area) (Figures 4.1a and 4.1b), similar to X1 and X2, respectively, had the same cross-sectional area and shape of the actual files, distinguished only by the mass distribution along the axis of the instrument, which was concentric (Figure 4.1d). Additionally, another type of concentric geometries were created with the same functional diameter (d_f), being called **X1Csd** (X1 concentric with the same functional diameter) and **X2Csd** (X2 concentric with the same diameter) (Figures 4.1a and 4.1b), differing in both the mass distribution along the file and cross-sectional area (Figure 4.1e). For all eccentric and concentric models, the same pitch, taper size, tip length, and tip diameter were maintained as in the actual models for X1 and X2. The instruments had an active part length of 17 mm, a total length of 25 mm, and a tip

diameter of 0.17 and 0.25 mm for X1 and X2, respectively, as well as for their concentric counterparts.

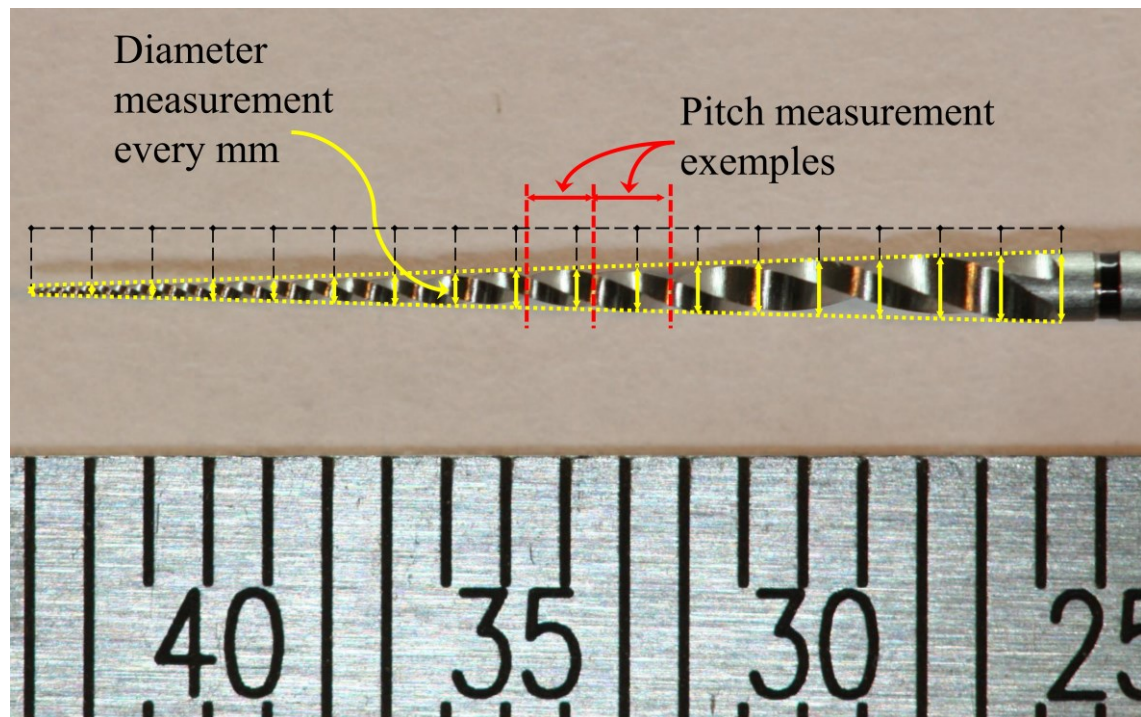


Figure 4.2 – Schematic representation of the diameter measurement at each millimeter and pitch length

The 3D models were exported to Abaqus 6.14-2 software and meshed for the finite element analysis (FEA) with 20-noded quadratic elements C3D20R (see Figure 4.3). The final finite element model of the X1 consisted of 2,244 elements with 13,329 nodes. The X1Csa model was composed of 4,878 elements integrating 27,445 nodes, and the X1Csd model contained 3,024 elements with 17,076 nodes. The X2 consisted of 2,184 elements with 12,974 nodes. Finally, the X2Csa design consisted of 2,848 elements with 16,086 nodes, and the X2Csd model was composed of 2,944 elements integrating 16,626 nodes.

The properties of a M-Wire NiTi alloy was used. M-wire is the trade name of a NiTi alloy that contains R-phase with austenite. The austenite phase with B2 structure type is the majority phase. It coexists with a small portion of an intermediate R-phase, which is a type of martensite with rhombohedral structure^{1,32,37}. The behavior of a M-Wire alloy was simulated with the aid of a user-defined subroutine implemented in the Abaqus code

based on the constitutive model proposed Auricchio and Petrini ³⁸. The required parameters for this subroutine were extracted from the work of Santos et al. ³² and are described in Table 4.1. The same properties were used for all models.

Table 4.1 – Parameters used to describe the constitutive model for simulation

Parameter	Description	Value
E_A	Austenite elasticity	38,680 MPa
V_A	Austenite Poisson's ration	0.33
E_M	Martensite elasticity	18,970 MPa
V_M	Martensite Poisson's ration	0.33
ε^L	Transformation strain	4.2%
$(\delta\sigma/\delta T)_L$	$(\delta\sigma/\delta T)$ loading	6.7
σ_L^S	Start of transformation loading	488 MPa
σ_L^E	End of transformation loading	528 MPa
T_0	Reference temperature	25 °C
$(\delta\sigma/\delta T)_U$	$(\delta\sigma/\delta T)$ unloading	6.7
σ_U^S	Start of transformation unloading	249 MPa
σ_U^E	End of transformation unloading	167 MPa

Figure 4.3 shows the boundary conditions used in this study to reproduce experimental bending and torsion tests for endodontic instruments based on ISO 3630 specification ³⁹ and Santos et al. ³²:

- 1) For the bending resistance test, the file was held at 3 mm from the tip, preventing any displacement in the x , y , and z axes. The shaft was then deflected until 45° of inclination;
- 2) For the torsion resistance test, the endodontic instrument was also held at 3 mm from the tip, and clockwise torsional moments of 0.14 N.cm (for X1, X1Csa, and X1sd) and 0.24 N.cm (for X2, X2Csa, and X2Csd) were applied at the end of the shaft. The different torsion values were chosen based on the mechanical resistance of each instrument so as not to exceed its yield limit.

The mechanical behavior was characterized in terms of flexibility and stress distribution. Flexibility relates to the mechanical efficiency and precision of an instrument, whereas stress generation during the loadings is related to its mechanical resistance and useful life¹⁰. Additionally, the stresses in the file models were depicted in terms of von Mises equivalent stress.

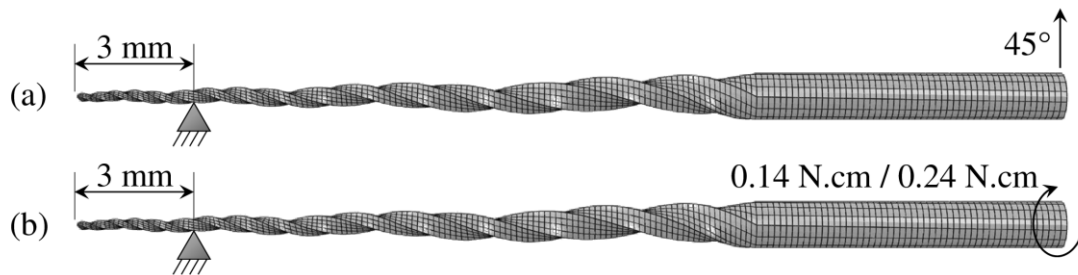


Figure 4.3 – Loading conditions for the (a) bending and (b) torsion test

The numerical methodology applied in this study has already been validated with experimental results in the work performed by Arruda et al.³³.

4.3 Results

Figure 4.4 shows the variation of the bending moment caused by the flexion of the instruments up to 45°. In this context, flexibility can be defined as the moment needed to bend the instrument without causing permanent deformation. It was found that among the eccentric and concentric pairs of the same area (Csa), that is, with only the eccentricity as a variable, the concentric instruments were more flexible than the eccentric ones. A maximum moment of 0.316 N.cm was calculated for X1 and 0.287 N.cm for X1Csa, while X2 and X2Csa presented maximum moments of 0.389 N.cm and 0.341 N.cm, respectively. On the other hand, comparing the off-centered geometries with their similar concentric with the same functional diameter (Csd), a reduction in flexibility was observed. For these concentric geometries, it was obtained a 0.457 N.cm maximum moment for X1Csd and 0.413 N.cm for X2C at 45° of bending. It is expected that an instrument presenting the same cross-sectional geometry, but a larger diameter will be less flexible. However, these comparisons suggest that the innovation of off-centered

instruments is not based on improved flexibility, as in most of the cases. The new eccentric design allows the instrument to perform the same work as a larger cross-sectional area and fewer contact points with the canal.

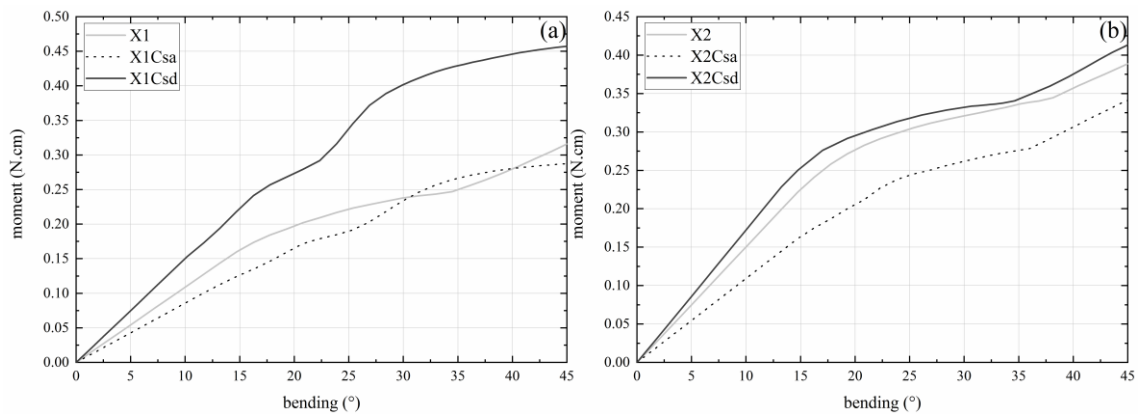


Figure 4.4 – Numerical moment-bending curves: (a) X1 file and its concentric geometry counterparts, and (b) X2 file and its concentric geometry counterparts

Figure 4.5 shows the distortion angles as a function of the applied torque under torsional loading. The curves are interrupted at the maximum applied torsional moment of 0.14 N.cm for X1 and their concentric geometries, and 0.24 N.cm for X2 and its concentric pairs. For each off-centered and concentric pair with the same area (Csa) the models exhibited similar torsional behavior and maximum distortion angle values. The total angular displacement for X1 and X1Csa was 93.3° and 91.9° , respectively. The X2 instrument presented an angular displacement of 103.7° , while X2Csa deformed up to 103.2° .

It was verified that the torsional resistance is not influenced by the off-centered geometry since there is no significant variation between the concentric and eccentric pairs. However, comparing the off-centered geometries with their concentric with the same functional diameter (Csd), and considering the torsional stiffness as the moment needed to rotate the instrument, it was easily concluded that the Csd instruments presented higher torsional stiffness, which is directly associated with their larger cross-sectional area. The total angular displacements were 27.4° for X1Csd and 38.2° for X2Csd.

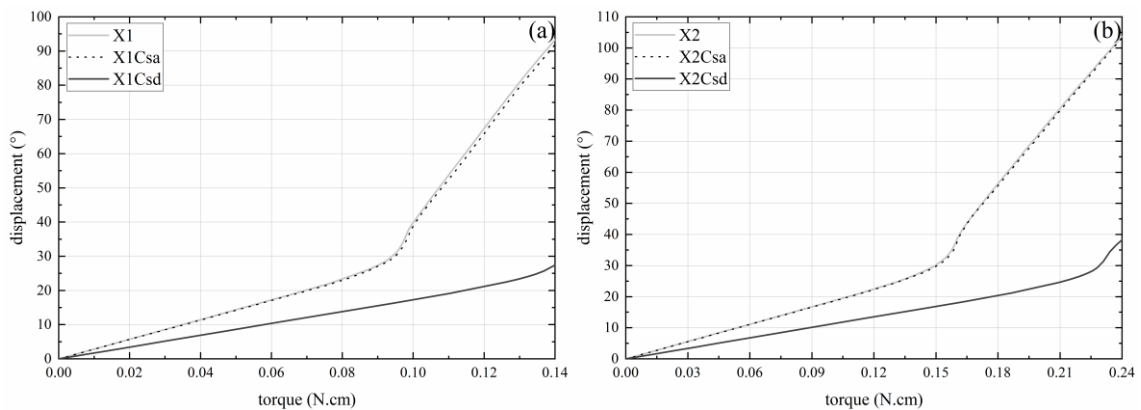


Figure 4.5 – Numerical displacement-torque curves under torsional loading: (a) X1 file and its concentric geometry counterparts, and (b) X2 file and its concentric geometry counterparts

The von Mises stress distributions along with the instruments during bending up to 45° are illustrated in Figure 4.6. The stress is concentrated near the tip held region and decreases as it moves away from the constrained part. Figure 4.7 shows the von Mises stress distributions in the cross-sections at 3 mm from the tip. For all instruments, the higher stresses under flexion were located at the periphery of the cross-section, whereas the central region exhibited zero or lower stresses in general. The concentric geometries with the same functional diameter (Csd) as the off-centered exhibited the highest stress levels, while the eccentric instruments presented the lowest von Mises stresses among all evaluated conditions.

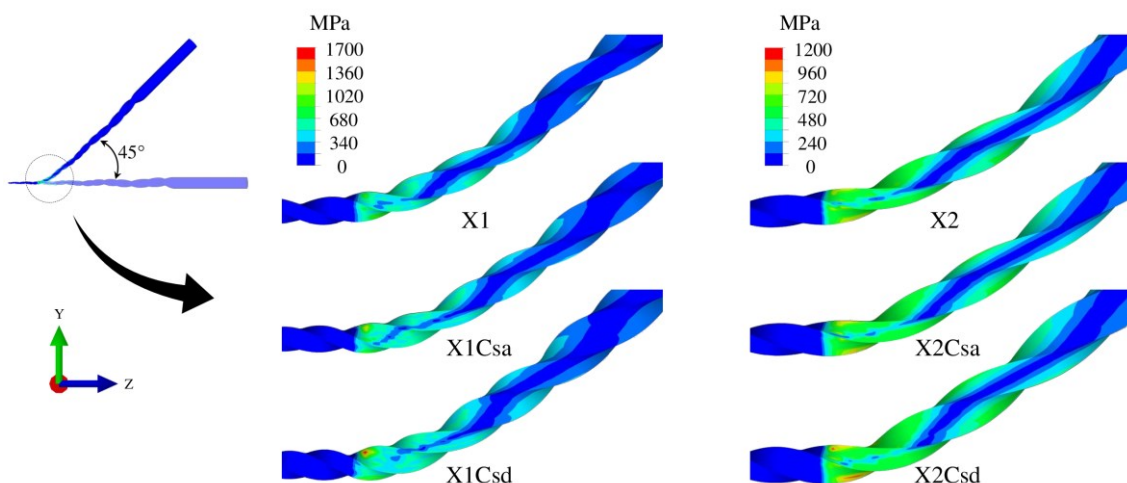


Figure 4.6 – The von Mises stress distribution along the instruments

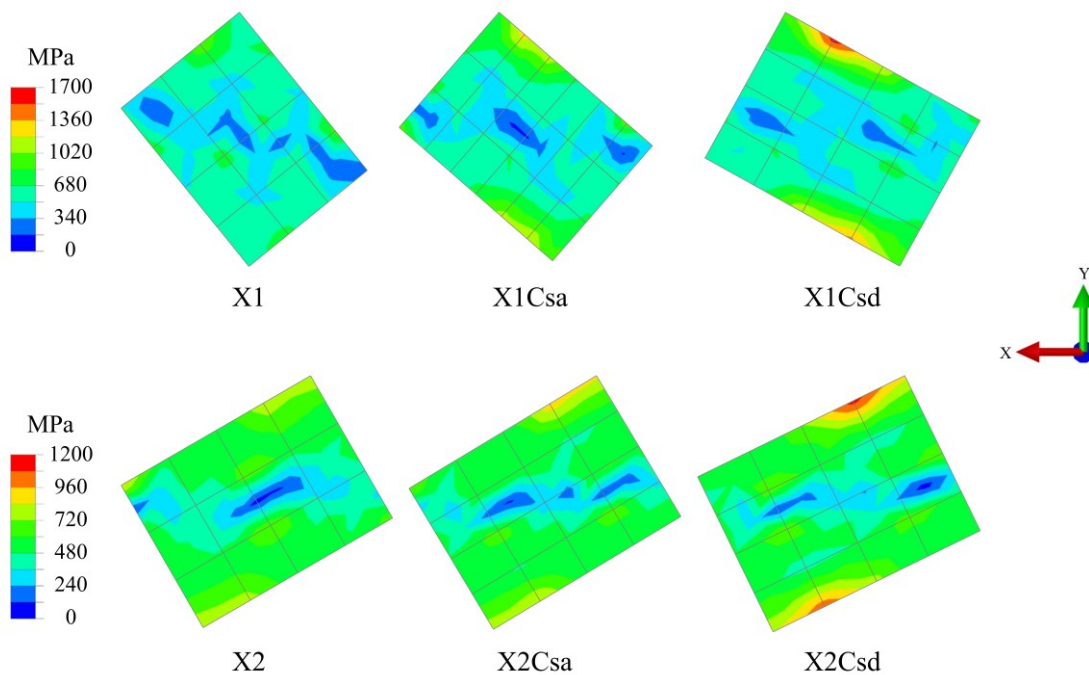


Figure 4.7 – The von Mises stress distribution in the cross-sections at 3 mm from the tip. Note that the neutral lines are set in the x direction, which means that the flexural displacement was applied in the y direction

The variation of stress at the same point as a function of bending for all models is displayed in Figure 4.8. Essentially, the curves can be divided into three main stages: (1) elastic deformation of austenite (a B2 type atomic structure present in the superelastic NiTi alloy); (2) stress-induced martensite plateau (austenite is transformed into B19' martensite through stress); and finally (3) the elastic deformation of the stress-induced B19' structure. Auricchio and Petrini³⁸ model is a 3D macroscopic thermo-mechanical model that describes the main characteristics of shape memory alloys and does not work beyond the elastic regime of martensite. Consequently, conditions that could cause plastic deformation were avoided in this study. The maximum stress values under bending calculated for all instruments are shown in Table 4.2. These results suggest that both concentric geometries, Csa and Csd, provide higher von Mises stress than the off-centered models. The stress for the X1Csa instrument was 24% higher than the value obtained for X1, while the X1Csd presented an even higher stress level (56% higher than X1) due to its larger cross-sectional area. The X2Csa file (Figure 4.8b) presented a maximum stress value of 4% higher than its off-centered pair X2, while X2Csd showed an increase of 26%. Thus, besides the fact that off-centered instruments are not the most flexible ones,

they present the lowest stress levels under bending among their concentric counterparts. It is especially important when one analyses their potential behavior under cyclic loads.

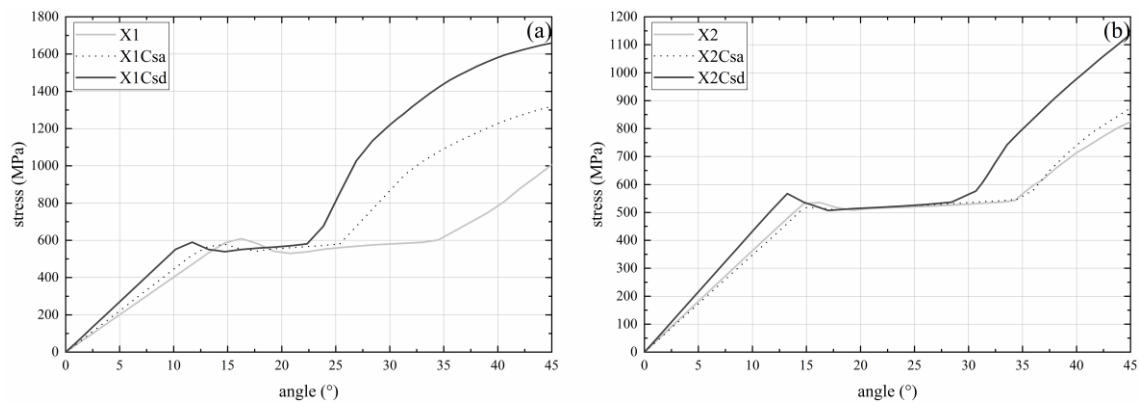


Figure 4.8 – Numerical angle-stress curves: (a) X1 file and its concentric geometry counterparts, and (b) X2 file and its concentric geometry counterparts

Table 4.2 – Maximum bending stress for all instruments at 45° displacement. Δ (%) represents the difference between the pairs

	X1	X1Csa	Δ (%)	X2	X2Csa	Δ (%)
Maximum stress (MPa)	1064	1320	24	902	942	4
	X1	X1Csd	Δ (%)	X2	X2Csd	Δ (%)
Maximum stress (MPa)	1064	1659	56	902	1139	26

4.4 Discussion

Numerical results of the mechanical behavior under bending showed that the concentric instruments with the same area (Csa) have greater flexibility than their eccentric counterparts. It is seen in Figure 4.4 that the X1Csa and X2Csa geometries generally have a higher displacement than the X1 and X2, respectively, considering the same moment value. That is, the eccentric instruments exhibit a higher moment under bending, indicating that the off-centered cross-section makes the instrument less flexible. The reduction in flexibility with eccentricity was also observed in the research carried out by Ha et al. ⁵, in which the effects of cross-section eccentricity on the flexibility of four NiTi rotary instruments were investigated, maintaining the cross-sectional area, but varying

the shape of the cross-section and the degree of eccentricity. The authors verified that flexibility during bending decreased with the increase of the eccentricity degree.

According to Kim et al. ⁴⁰, the flexibility of a file depends on a combination of factors, such as geometry, mechanical properties, boundary conditions, place of application of stress, where the instrument is held, where deformation is measured, among other factors. He et al. ¹⁹ and El-Anwar et al. ³⁶ emphasized that the flexibility of endodontic instruments is strongly related to their geometric design. In the present study, the decrease of the flexibility in eccentric instruments may be associated with the off-centered cross-section, since it is the only variable under analysis. However, it should be taken into account that, although the eccentric files have less flexibility (compared to the concentric of the same cross-sectional area), they allow to shape a larger area of a dental canal than the concentric file with the same cross-section area (see Figure 4.1c and 4.1d). A concentric file would need a larger cross-sectional area to perform the same work, which is the case the geometries with the same functional diameter (Csd). Csd theoretical files have a larger cross-sectional area resulting in a significant reduction in flexibility of these instruments, as shown in Figure 4.4. Thus, the geometric eccentricity, in this case, may not increase the flexibility, but it allows to shape a larger area of the canal when compared to concentric files of the same cross-sectional area.

Under the torsion condition, Figure 4.5 showed that the angular displacement of the concentric and of the eccentric pairs with the same area are quite similar, indicating that the eccentricity of the cross-section does not influence the behavior under torsion of the endodontic instruments. It is well known that the torsional stiffness depends on the geometry of the cross-section, being this stiffness inversely proportional to the moment of inertia of the area ^{10,12,40,41}. However, in the present study, the area and shape of the cross-section were maintained for each concentric and eccentric pair, X1 and X1Csa, and X2 and X2Csa, resulting in the same moment of inertia for both, showing that the eccentricity does not influence torsional resistance.

As shown in Figure 4.6-4.8 and Table 4.2, the off-centered cross-section changes the stress distribution and the maximum stress level in the files. Significant differences in

terms of stresses were found between eccentric and concentric geometries. All concentric cross-section experienced higher stress under the bending test than the eccentric conditions. The variation of stress levels may be related to the cross-sectional configuration, which is a determinant factor for the stress distribution in the instrument and, consequently, the behavior of the files under bending ^{12,40}. The von Mises stress distribution pattern can be affected by both the material properties and the cross-section geometry ³⁴. In the present study, the material properties are constant, and the two eccentric models, X1 and X2, have a mass distribution along their entire length different from their concentric pairs, X1Csa and X2Csa, respectively. In this case, the geometric configuration changes the stress distribution along with the file in such a way that the eccentric geometry presents smaller stress levels.

The fact that the off-centered instruments presented less flexibility, but lower stress levels might be contradictory. However, the stress distribution in these instruments could not be predicted by their stiffness response alone ^{33,40}. Similar results of lower flexibility with lower stress levels were also observed by other researchers ^{5,40,42}. This behavior may be related to a very favorable condition, where eccentricity induces local stress relaxation and a sudden decrease in force reactive deformation ⁴². These results also suggest that eccentric instruments might experience a longer life in fatigue, though the conditions used in this study are semi-static ones. Nevertheless, fatigue life is related to the degree of stress experienced by the file, which leads to the need for further and more in-depth investigation on this subject.

4.5 Conclusions

In this paper, the influences of eccentric geometry on endodontic files were studied. The following conclusions could be drawn:

- Eccentricity does not promote increased flexibility in files. The off-centered instruments showed less flexibility when compared with concentric instruments having the same cross-sectional area and shape.
- However, eccentricity provides a favorable stress distribution in such a way that the files are subjected to lower stress levels.

- Thus, the great advantage of eccentric endodontic instruments is not based on increased flexibility, but on the possibility of shaping a larger area inside the root canal by using a smaller cross-sectional area, combining lower stress levels and efficiency.
- The torsional resistance is not influenced by the off-centered geometry.

Acknowledgements

This work was financed by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (Capes) – Finance Code 001, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – Brasil (CNPq), and Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais – Brasil (Fapemig). SCSM acknowledges Professor Estevam B. Las Casas for the valuable support during the numerical analysis.

4.6 References

1. Otsuka, K. & Wayman, C. M. *Shape Memory Materials*. Cambridge University Press (1998).
2. Otsuka, K. & Ren, X. Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys. *Prog. Mater. Sci.* **50**, 511–678 (2005).
3. Montalvão, D., Shengwen, Q. & Freitas, M. A study on the influence of Ni-Ti M-Wire in the flexural fatigue life of endodontic rotary files by using Finite Element Analysis. *Mater. Sci. Eng. C* **40**, 172–179 (2014).
4. Legrand, V. *et al.* Mechanical Behavior of a NiTi Endodontic File During Insertion in an Anatomic Root Canal Using Numerical Simulations. *J. Mater. Eng. Perform.* **24**, 4941–4947 (2015).
5. Ha, J. H. *et al.* The geometric effect of an off-centered cross-section on nickel–titanium rotary instruments: A finite element analysis study. *J. Dent. Sci.* **12**, 173–178 (2017).
6. Chevalier, V., Pino, L., Arbab Chirani, R., Calloch, S. & Arbab Chirani, S. Experimental Validation of Numerical Simulations of a New-Generation NiTi Endodontic File Under Bending. *J. Mater. Eng. Perform.* **27**, 5856–5864 (2018).
7. Baek, S. H. *et al.* Comparison of torsional stiffness of nickel-titanium rotary files

- with different geometric characteristics. *J. Endod.* **37**, 1283–1286 (2011).
8. Gambarini, G. *et al.* Fatigue Resistance of Engine-driven Rotary Nickel-Titanium Instruments Produced by New Manufacturing Methods. *J. Endod.* **34**, 1003–1005 (2008).
 9. Larsen, C. M., Watanabe, I., Glickman, G. N. & He, J. Cyclic Fatigue Analysis of a New Generation of Nickel Titanium Rotary Instruments. *J. Endod.* **35**, 401–403 (2009).
 10. Versluis, A., Kim, H. & Lee, W. Flexural Stiffness and Stresses in Nickel-Titanium Rotary Files for Various Pitch and Cross-sectional Geometries. *J. Endod.* **38**, 1399–1403 (2012).
 11. Basheer Ahamed, S. B., Vanajassun, P. P., Rajkumar, K. & Mahalaxmi, S. Comparative Evaluation of Stress Distribution in Experimentally Designed Nickel-titanium Rotary Files with Varying Cross Sections: A Finite Element Analysis. *J. Endod.* **44**, 654–658 (2018).
 12. Turpin, Y. L., Chagneau, F. & Vulcain, J. M. Impact of two theoretical cross-sections on torsional and bending stresses of nickel-titanium root canal instrument models. *J. Endod.* **26**, 414–417 (2000).
 13. Ha, J., Kim, S. K. & Cohenca, N. Effect of R-phase Heat Treatment on Torsional Resistance and Cyclic Fatigue Fracture. *J. Endod.* **39**, 389–393 (2013).
 14. 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. *J. Endod.* **29**, 15–19 (2003).
 15. La Rosa, G., Lo Savio, F., Pedullà, E. & Rapisarda, E. Developing of a new device for static and dynamic tests of Ni-Ti instruments for root canal treatment. *Procedia Struct. Integr.* **2**, 1303–1310 (2016).
 16. Xu, X., Eng, M., Zheng, Y. & Eng, D. Comparative study of torsional and bending properties for six models of nickel-titanium root canal instruments with different cross-sections. *J. Endod.* **32**, 372–375 (2006).
 17. Schäfer, E., Dzepina, A. & Danesh, G. Bending properties of rotary nickel-titanium instruments. *Oral Surg. Oral Med. Oral Pathol. Oral Radiol. Endod.* **96**, 757–763 (2003).
 18. Amini, A., He, Y. & Sun, Q. Loading rate dependency of maximum

- nanoindentation depth in nano-grained NiTi shape memory alloy. *Mater. Lett.* **65**, 464–466 (2011).
19. He, R. & Ni, J. Design improvement and failure reduction of endodontic files through finite element analysis: Application to V-Taper file designs. *J. Endod.* **36**, 1552–1557 (2010).
 20. 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. *J. Endod.* **36**, 1394–1398 (2010).
 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.* **36**, 1380–1384 (2010).
 22. Elnaghy, A. M. & Elsaka, S. E. Assessment of the mechanical properties of ProTaper next nickel-titanium rotary files. *J. Endod.* **40**, 1830–1834 (2014).
 23. Kim, H. C. *et al.* Stress generation during self-adjusting file movement: Minimally invasive instrumentation. *J. Endod.* **39**, 1572–1575 (2013).
 24. Pasqualini, D. *et al.* Micro-computed tomography evaluation of ProTaper next and BioRace shaping outcomes in maxillary first molar curved canals. *J. Endod.* **41**, 1706–1710 (2015).
 25. Arias, A., Singh, R. & Peters, O. A. Torque and force induced by ProTaper universal and ProTaper next during shaping of large and small root canals in extracted teeth. *J. Endod.* **40**, 973–976 (2014).
 26. Elnaghy, A. M. Cyclic fatigue resistance of ProTaper Next nickel-titanium rotary files. *Int. Endod. J.* **47**, 1034–1039 (2014).
 27. Pérez-Higueras, J. J., Arias, A., de la Macorra, J. C. & Peters, O. A. Differences in cyclic fatigue resistance between ProTaper Next and ProTaper Universal instruments at different levels. *J. Endod.* **40**, 1477–1481 (2014).
 28. Shim, K. *et al.* Mechanical and Metallurgical Properties of Various Nickel-Titanium Rotary Instruments. *Biomed Res. Int.* **2017**, 1–13 (2017).
 29. Goo, H.-J., Kwak, S. W., Ha, J.-H., Pedullà, E. & Kim, H.-C. Mechanical Properties of Various Heat-treated Nickel-titanium Rotary Instruments. *J. Endod.* **43**, 1872–1877 (2017).
 30. Capar, I. D., Ertas, H., Ok, E., Arslan, H. & Ertas, E. T. Comparative study of

- different novel nickel-titanium rotary systems for root canal preparation in severely curved root canals. *J. Endod.* **40**, 852–856 (2014).
31. Nguyen, H. H., Fong, H., Paranjpe, A., Flake, N. M. & Johnson, J. D. Evaluation of the Resistance to Cyclic Fatigue between Rotary Instruments. *J. Endod.* **40**, 1190–1193 (2014).
 32. Santos, L. D. A., Resende, P. D., Bahia, M. G. D. A. & Buono, V. T. L. Effects of R-Phase on Mechanical Responses of a Nickel-Titanium Endodontic Instrument: Structural Characterization and Finite Element Analysis. *Sci. World J.* **2016**, 1–11 (2016).
 33. de Arruda Santos, L., López, J. B., de Las Casas, E. B., de Azevedo Bahia, M. G. & Buono, V. T. L. Mechanical behavior of three nickel-titanium rotary files: A comparison of numerical simulation with bending and torsion tests. *Mater. Sci. Eng. C* **37**, 258–263 (2014).
 34. Prados-Privado, M., Rojo, R., Ivorra, C. & Prados-Frutos, J. C. Finite element analysis comparing WaveOne, WaveOne Gold, Reciproc and Reciproc Blue responses with bending and torsion tests. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **90**, 165–172 (2019).
 35. Keskin, C., Inan, U., Demiral, M. & Keleş, A. Cyclic Fatigue Resistance of Reciproc Blue, Reciproc, and WaveOne Gold Reciprocating Instruments. *J. Endod.* **43**, 1360–1363 (2017).
 36. El-Anwar, M. I., Yousief, S. A., Kataia, E. M. & El-Wahab, T. M. A. Finite Element Study on Continuous Rotating versus Reciprocating Nickel-Titanium Instruments. *Braz. Dent. J.* **27**, 436–441 (2016).
 37. Gu, Y. *et al.* Various heat-treated nickel–titanium rotary instruments evaluated in S-shaped simulated resin canals. *J. Dent. Sci.* **12**, 14–20 (2017).
 38. 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.* **61**, 807–836 (2004).
 39. INTERNATIONAL STANDARD Dentistry — Endodontic, (2013).
 40. Kim, H. C. *et al.* Mechanical response of nickel-titanium instruments with different cross-sectional designs during shaping of simulated curved canals. *Int. Endod. J.* **42**, 593–602 (2009).

41. Kim, H. C. *et al.* Potential relationship between design of nickel-titanium rotary instruments and vertical root fracture. *J. Endod.* **36**, 1195–1199 (2010).
42. Montalvão, D. & Alçada, F. S. Numeric comparison of the static mechanical behavior between ProFile GT and ProFile GT series X rotary nickel-titanium files. *J. Endod.* **37**, 1158–1161 (2011).

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foram verificadas as alterações no comportamento mecânico de limas devido a variações de geometria e tratamentos térmicos, pelo método dos elementos finitos. De acordo com os resultados obtidos, as seguintes conclusões podem ser destacadas:

- As variações geométricas nos instrumentos endodônticos alteram sua performance de tal forma que a maior flexibilidade é alcançada com menores áreas de seção transversal, enquanto a rigidez torcional é aprimorada com o aumento dessa área.
- O design das limas modifica a distribuição de tensão pelo instrumento e, conseqüentemente, altera sua resistência à fadiga. Sendo que instrumentos excêntricos promovem menores níveis de tensão, aumentando a vida em fadiga.
- Os tratamentos térmicos alteram as fases presentes na liga NiTi, modificando suas propriedades mecânicas. A fase R oferece maior flexibilidade e tende a ser mais resistente à fadiga do que a austenita.
- A excentricidade geométrica da seção transversal não eleva a flexibilidade dos instrumentos. Limas excêntricas apresentam menor flexibilidade quando comparadas a limas concêntricas de mesma área e formato da seção transversal.
- A geometria excêntrica em instrumentos endodônticos promove uma distribuição de tensão favorável, de tal maneira que os níveis de tensão atingidos são mais baixos.
- O principal benefício que a excentricidade geométrica fornece aos instrumentos endodônticos não se baseia na flexibilidade. Limas excêntricas possibilitam formatar uma área maior dentro do canal radicular usando um instrumento de menor área transversal, além de combinar com níveis de tensão mais baixos, sugerindo maior vida em fadiga.
- A resistência à torção das limas não é significativamente influenciada pela geometria descentralizada da seção transversal. Essa mudança geométrica altera somente o comportamento sob flexão dos instrumentos.