

ANÁLISE COMPUTACIONAL DA INFLUÊNCIA DE MUDANÇAS GEOMÉTRICAS NA DIFUSÃO DE CLAREADORES EM DENTES

Thayane Cinara Souza^a, thayane.souza@live.com

Daniel Lamounier^b, daniel-lamounier@hotmail.com

Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Alto da Jacuba / CEP: 39100-000 - Diamantina-MG-Brasil

Marcus Canuto^b, quimcanuto@yahoo.com.br

Agnes Batista Meireles^b, agnesabm@gmail.com

Thiago Parente Lima^a, thiagopl@ict.ufvjm.edu.br

Cíntia Tereza Pimenta de Araújo^b, ctpimenta@gmail.com

Libardo Andres Gonzalez Torres^a, lgonzales@ict.ufvjm.edu.br

a - Instituto de Ciência e Tecnologia;

b - Faculdade de Ciências Biológicas e da Saúde.

Resumo. O processo de clareamento dental é bastante discutido no ambiente odontológico. Ainda não é claro o fenômeno de interação entre o gel clareador e o dente a ser clareado, há estudos que mostram que o peróxido de hidrogênio presente em alguns clareadores pode danificar o tecido pulpar, no entanto não há muitos estudos que quantifiquem a quantidade de peróxido de hidrogênio que pode chegar até a polpa. Nosso estudo buscou desenvolver e implementar a solução de um modelo computacional gerado no software Abaqus que simule a difusão do peróxido de hidrogênio através da estrutura dentária, o objetivo foi analisar a influência das modificações geométricas na difusividade do clareador. Para isso, foi desenvolvido um modelo computacional, em duas dimensões, no qual foram aplicadas diferentes condições de contorno para avaliar possíveis modificações geométricas, ao todo foram testadas 4 condições de contorno diferentes. Os resultados mostraram que as mudanças geométricas podem provocar grandes modificações nas quantidades finais de peróxido de hidrogênio que penetram nos blocos dentários analisados, principalmente quando elas estão relacionadas com o aumento ou diminuição do tamanho dos blocos.

Palavras-chave: Difusão, clareadores, peróxido de hidrogênio, modelagem.

1. INTRODUÇÃO

Muitos tratamentos são novidade no campo da Odontologia estética, é muito comum a procura por um sorriso que se encaixe em padrões de beleza e o clareamento dental é um dos procedimentos mais realizados, oferecendo bons resultados e satisfação aos pacientes.

O clareamento se processa por meio da difusão do Peróxido de Hidrogênio através do esmalte e da dentina. A eficácia do agente clareador está relacionada com a sua capacidade de difusão dos peróxidos através dessas estruturas (Briso et al., 2013), porém muitos casos de sensibilidade relatada pelos pacientes submetidos a terapias de clareamento dental indicam que este procedimento pode danificar o tecido pulpar (Soares et al., 2013). No entanto, estudos avaliando a difusão do peróxido de hidrogênio ainda são escassos.

Há estudos que sugerem uma destruição das proteínas da dentina pelo Peróxido de Hidrogênio devido a um processo de oxidação e também uma mudança em seus componentes minerais (Rotstein et al., 1996), o que demonstra a necessidade de maiores esclarecimentos sobre o tratamento clareador e o peróxido de hidrogênio que chega até a polpa e a partir de que quantidade pode ser nocivo aos tecidos dentários.

A difusão de agentes clareadores em biomateriais pode ser considerada um problema onde um fluido (gel clareador) passa por um meio poroso (esmalte- menos permeável; dentina- mais permeável), sendo possível assim aplicar métodos computacionais para a geração de metodologias que permitam o estudo e a otimização da técnica clareadora.

O Método dos Elementos Finitos (MEF) é uma técnica de engenharia que consiste na discretização de uma geometria em pequenos elementos, este método permite obter a aproximação de uma ou mais variáveis de interesse (concentração de uma substância ou temperatura, por exemplo) por meio de modelagem computacional. O MEF segundo Durand et al. (2015) é considerado uma ferramenta importante no estudo de sistemas complexos pela facilidade de obtenção e interpretação dos resultados. É uma ferramenta de pesquisa, que usada adequadamente, pode gerar resultados muito próximos de uma situação real e seus resultados podem ser significativos para análises em pesquisas biológicas.

O MEF pode ser aplicado à modelagem de fenômenos nas áreas biológicas e da saúde, uma dessas aplicações é a vascularização do endotélio que controla seletivamente o transporte de conteúdo de plasma através da parede do vaso sanguíneo capilar. Neste caso, o modelo de Elementos Finitos baseia-se na modelagem de transporte difusivo transvascular (Corovic et al, 2015). Da mesma maneira, inúmeros trabalhos mostram que o MEF é aplicável com bons resultados na realização de pesquisas científicas em Odontologia (Lotti et al, 2006). Entretanto, para a correta execução deste método, é necessária a interação entre profissionais da Engenharia e da Odontologia para que se possa por em prática as ideias e obter resultados corretos e válidos (Lotti et al, 2006). Desse modo, o MEF apresenta-se como uma

alternativa para superar as dificuldades da execução experimental e principalmente possibilitar a verificação de outras situações que não foram abordadas no experimento.

Assim, o objetivo deste estudo é o de realizar um modelo computacional que estude a difusividade do peróxido de hidrogênio, um agente clareador amplamente utilizado nos tratamentos odontológicos, analisando a influência da geometria do modelo testado na concentração final do clareador. Para isso, baseamos nos estudos de Costa (2015) que fez experimentos com blocos dentários bovino, o nosso estudo pretende considerar possíveis divergências construtivas que culminam na modificação geométrica do bloco e avaliar quanto essas modificações podem influenciar na concentração final de peróxido de hidrogênio.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Modelo computacional

O nosso projeto propôs avaliar a penetração do peróxido de hidrogênio existente nos clareadores dentários por meio de modelagem computacional. O processo de transporte do peróxido de hidrogênio foi modelado de acordo com a Eq. (1) no software comercial de elementos finitos Abaqus 6.12-1.

Equação (1):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - kc \quad (1)$$

A geometria gerada foi baseada nos estudos de Costa (2015), que estudou a difusão de clareadores em blocos dentários bovinos de 4X4 mm.

Na nossa simulação elaboramos modelos dos blocos dentários em duas dimensões que tinham 4 mm de comprimento e 3,5 mm de altura, sendo que, 2,2 mm correspondiam a dentina, enquanto 1,3 mm correspondiam ao esmalte, como descrito por Costa (2015) e é demonstrado na Fig. 1.

2.2 Condições de contorno

No modelo construído foram feitas 4 simulações diferentes, com o objetivo de avaliar possíveis diferenças geométricas construtivas nos blocos dentários.

Na primeira simulação (simulação 1), condições de contorno de 21% de peróxido de hidrogênio foram aplicadas no topo (Fig. 1) do esmalte, chegou-se à esta concentração a partir de medições feitas com a mistura de três gotas de peróxido de hidrogênio a 35%, concentração contida no clareador utilizado por Costa (2015), com uma gota de gel espessante, que também é utilizado na preparação do gel clareador por Costa (2015) e não contém nenhuma concentração de peróxido de hidrogênio. No fim da dentina (Fig. 1), foi atribuída concentração de 0 % de peróxido de hidrogênio, pois inicialmente não havia nenhum peróxido de hidrogênio neste local.

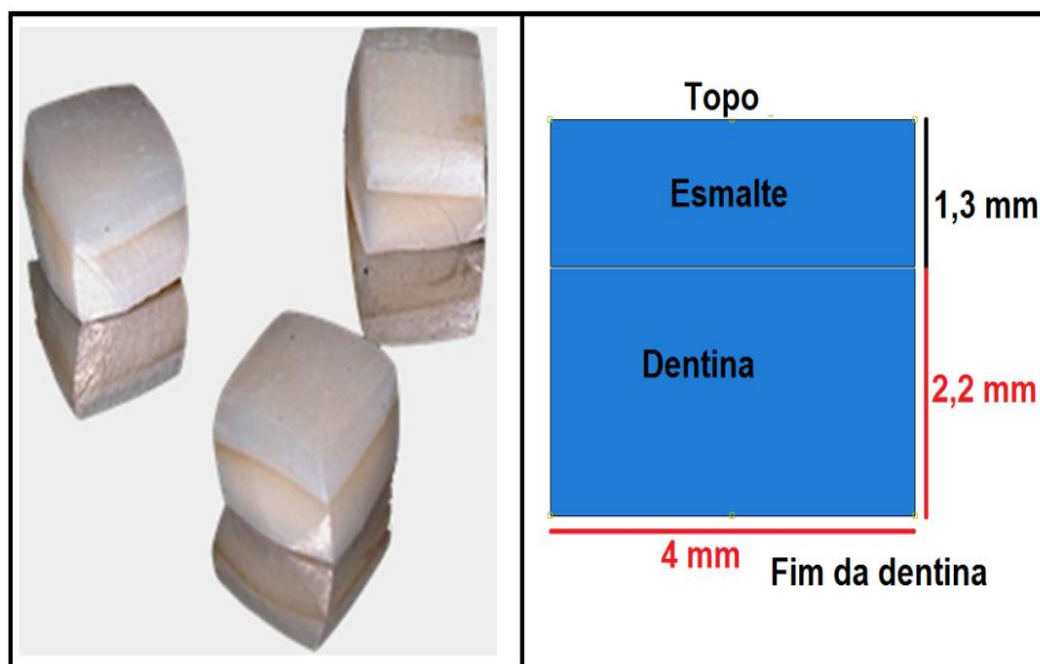


Figura 1: blocos dentários preparados por Costa (2015) à esquerda e modelo do bloco esmalte/dentina construído em abaqus com dimensões plotadas à direita.

Na segunda simulação (simulação 2), as mesmas condições de contorno da simulação 1 mais uma condição de contorno de concentração de clareador adicional igual a 0 % foi aplicada na lateral dos blocos, em uma região que vai da ponta da dentina subindo até 0,88 mm, conforme mostra a Fig. 2. Isso foi feito, para simular regiões do dente que não foram totalmente isoladas e pode haver fluxo de clareador por elas.

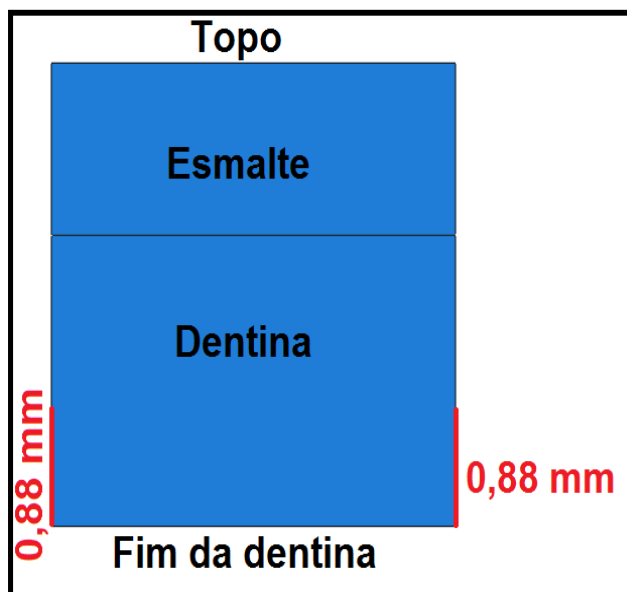


Figura 2: modelo do bloco esmalte/dentina com dimensões de 0,88 mm acima do fim da dentina indicadas.

Na terceira simulação (simulação 3) e na quarta (simulação 4), foram modificadas as dimensões dos blocos, sendo que, na simulação 3 os blocos tiveram a altura reduzida de 3,5 mm para 2,75 mm, e na simulação 4 os blocos tiveram a sua altura aumentada de 3,5 mm para 4,25 mm. Isso para avaliar possíveis modificações nos tamanhos dos blocos quando estes foram construídos.

2.3 Propriedade dos materiais

A difusividade do peróxido de hidrogênio (D) à temperatura de 25°C em dentina e esmalte bovino foi determinada por Kyle (2012) como sendo, $1,47 \times 10^{-7} \pm 0,30 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ e $5,83 \times 10^{-8} \pm 0,50 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$, respectivamente. A constante de proporcionalidade k, também foi considerada. Um valor de $2,12 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ para essa constante foi encontrado também por Kyle (2012), e foi considerada apenas no esmalte, onde a sua reação com o peróxido de hidrogênio é consideravelmente maior.

Em todas as simulações foi considerado um tempo de 18000 segundos, sendo o comprimento do incremento igual a 10.

3. RESULTADOS

Os resultados obtidos para as 4 simulações realizadas no modelo em duas dimensões são apresentados na Fig. 3 e na Tab. 1.

Na Fig. 3 são apresentadas imagens que representam as concentrações de peróxido de hidrogênio em cada ponto do bloco para os tempos de 0s, 9000s e 18000s para cada uma das 4 simulações. Vê-se que, a partir do tempo 0 a tendência é a concentração ir aumentando do topo do bloco, onde foi atribuída uma concentração inicial igual a 21 %, para o fim, onde a concentração inicial atribuída foi de 0 %. No tempo 0 a concentração é nula em todo o bloco por que ainda não houve difusão, a medida que o tempo aumenta o clareador é difundido gradativamente para o interior do bloco, no sentido da maior concentração para a menor.

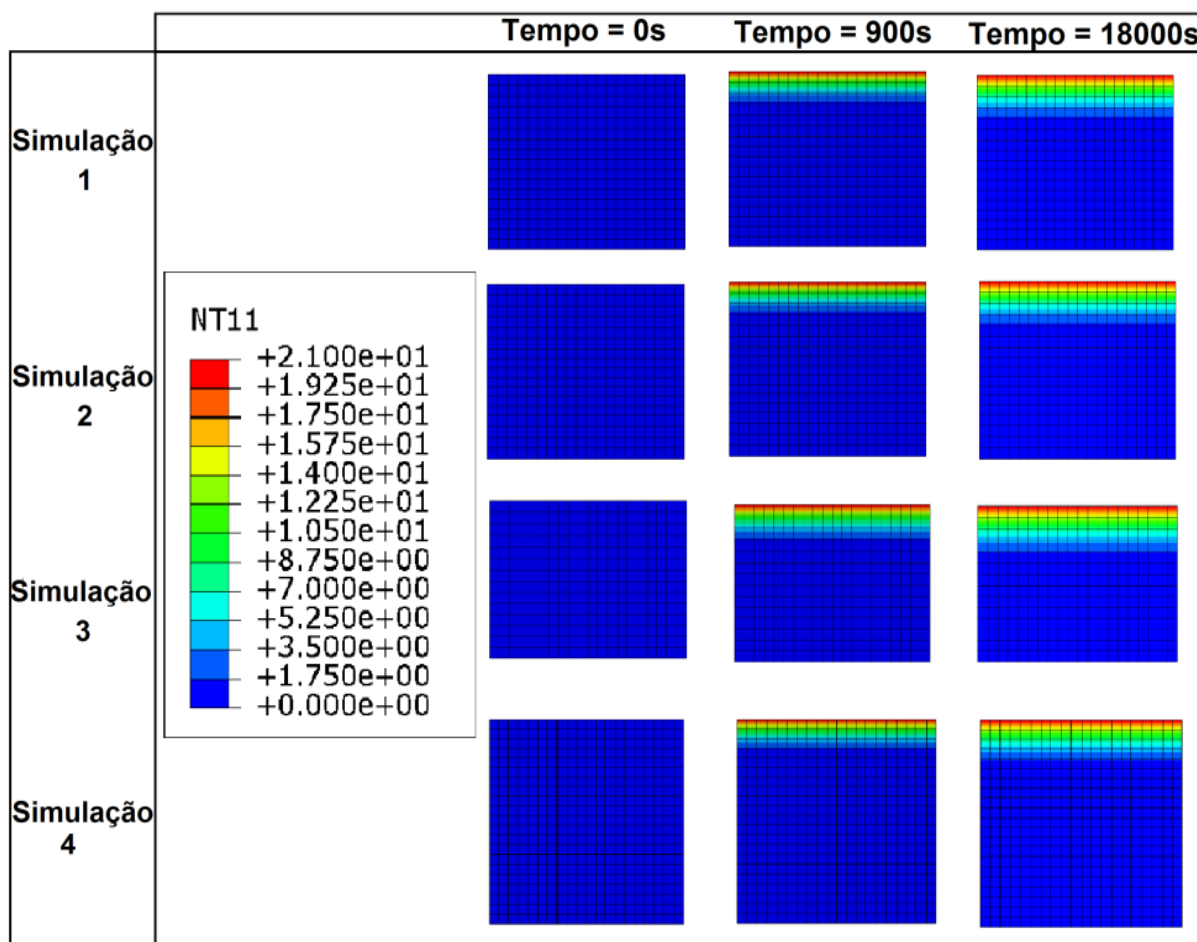


Figura 3: concentração de clareador em cada ponto do bloco, para os tempos de 0, 900 e 18000 segundos, para todas as simulações.

Na Tab. 1, é apresentado o volume de clareador que conseguiu penetrar os blocos no tempo estimado, para cada uma das 4 simulações realizadas. Esses volumes foram obtidos a partir de gráficos de fluxo de calor em relação ao tempo gerados pelo programa. Para a construção desses gráficos foi analisado o fim da dentina, isso para saber o quanto de peróxido de hidrogênio havia penetrado por todo o esmalte e dentina e chegado até o fim do bloco.

Tabela 1. Volume de clareador que atravessa o bloco esmalte dentina, calculado para as 4 simulações realizadas no modelo 2D.

Simulação	Volume de clareador que atravessa o bloco [μL]
1	$1,6035 \times 10^{-5}$
2	$7,3800 \times 10^{-5}$
3	$2,2294 \times 10^{-3}$
4	$6,0244 \times 10^{-8}$

4. DISCUSSÃO

Na análise dos resultados vamos considerar as condições desenvolvidas na simulação 1 como ponto de referência, pois foram essas condições adotadas no experimento realizado por Costa (2015), e queremos avaliar o quanto as modificações dessa geometria podem influir nos resultados finais.

Quando analisamos a Tab. 1 vemos que as maiores divergências na quantidade de clareador que penetra no bloco em relação à simulação 1 ocorre nas simulações 3 e 4.

Na simulação 4 a quantidade de clareador difundida foi consideravelmente menor, que na simulação 1, essa modificação é esperada por que na simulação 4 a dimensão do bloco teve a sua altura aumentada em 0,75 mm, ou seja, o esperado é que a quantidade de clareador que penetre o bloco seja menor para um mesmo tempo, já que o caminho que ele percorre é maior.

Já na simulação 3 a quantidade de clareador que penetrou no bloco foi consideravelmente maior, isso por que no caso da simulação 3 o bloco teve a sua altura diminuída em 0,75 mm, e de forma análoga ao ocorrido com a simulação 4 o caminho que devia ser percorrido pelo clareador foi menor, ou seja, para um mesmo tempo a quantidade de clareador que penetra no bloco deve ser maior.

Pode-se salientar ainda, que nas simulações 3 e 4, o bloco teve a sua altura diminuída e aumentada, respectivamente, em uma mesma quantidade (0,75 mm), ao analisar a quantidade de clareador que penetrou no bloco percebe-se que para a simulação 3 a quantidade de clareador que penetrou foi aproximadamente 139 vezes maior que na simulação 1, enquanto na simulação 4 a quantidade foi aproximadamente 266 vezes menor que na simulação 1.

Na simulação 2, foram atribuídas condições de contorno de concentração de clareador igual a 0 % também em uma porção das laterais do bloco, isso para simular que havia fluxo de clareador também por essa porção. O resultado obtido foi exatamente o esperado, que uma quantidade maior de clareador penetraria, em relação à simulação 1, porém essa quantidade não foi tão maior se comparado com as simulações 3 e 4 que apresentaram diferenças muito maiores.

Os resultados mostraram que as diferenças geométricas podem produzir variações consideráveis na quantidade final de peróxido de hidrogênio que penetra o bloco, principalmente nos casos em que o tamanho do bloco é modificado, como na simulação 3 e 4 onde houve modificação de aproximadamente 139 e 266 vezes respectivamente na quantidade de clareador, por isso é importante que os experimentos que utilizem amostras sejam rigorosos quanto a preparação destas, para evitar possíveis erros que possam provocar grandes modificações nos resultados obtidos.

5. CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho foi avaliar a quantidade de peróxido de hidrogênio que conseguia penetrar pelo esmalte e dentina, e avaliar a influência que as possíveis modificações geométricas das amostras tinham nos resultados finais. Para isso, foram feitas 4 simulações com condições de contorno e geométricas diferentes.

As propriedades dos materiais adotadas para a difusão do peróxido de hidrogênio foram baseadas em propriedade reais adquiridas em experimento, no entanto, os resultados mostram que os valores para as simulações apresentaram resultados que variaram bastante, principalmente para as simulações 3 e 4 quando comparadas com a simulação 1, por isso, mais estudos são necessários para melhor esclarecer a influência de mudanças geométricas na concentração final dos clareadores.

Uma adequação importante seria a elaboração de modelos em três dimensões, por exemplo, isso proporcionaria uma abordagem mais realista e estaria mais relacionado com os estudos realizados por Costa (2015), ou ainda a elaboração de mais modelos que considerem mais condições de contorno diferentes que possam apresentar mais resultados para comparação. Pretende-se ainda, aprofundar esse estudo considerando essas melhorias para analisar mais detalhadamente a difusividade do peróxido de hidrogênio no esmalte e na dentina.

AGRADECIMENTOS

Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

NOMENCLATURA

c	Concentração de Peróxido de Hidrogênio, kg/m^3	Letras gregas	
D	Difusividade do Peróxido de Hidrogênio no esmalte ou na dentina, m^2/s	μ	micro (10^{-6})
k	Constante de proporcionalidade da taxa de reação do Peróxido de Hidrogênio (kc), s^{-1}	Símbolos matemáticos	
t	tempo, s	∂	diferencial parcial
x	direção x, m		

REFERÊNCIAS

- Briso A.L.F., Lima A.P.B., Gonçalves R.S., Gallinari M.O., Santos P.H., 2013. Transenamel and Transdental Penetration of Hydrogen Peroxide Applied to Cracked or Microabraded Enamel. *Operative Dentistry*, 38-6.
- Corovic S., Markelc B., Dolinar M., Cemazar M., Jarm T., 2015. Modeling of Microvascular Permeability Changes after Electroporation. *PLoS ONE* 10 3 doi:10.1371/journal.pone.0121370
- Costa, D. C., 2015. Penetração trans-amelodentinária de peróxido de hidrogênio proveniente de géis clareadores aplicados do esmalte após microabrasão com dois agentes abrasivos. Dissertação (mestrado), Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Diamantina, MG, BRA.
- Durand BL, Guimarães CJ, Monteiro Junior S, Baratiéri LN., 2015. Effect of Ceramic Thickness and Composite Bases on Stress Distribution of Inlays - A Finite Element Analysis. *Brazilian Dental Journal* 26(2): 146-151.

- Lotti R.S., Machado A.W., Mazzeiro E.T., Landre Júnior J., 2006. Aplicabilidade científica do método dos elementos finitos. Revista Dental Press de Ortodontia e Ortopedia Facial;11(2): 35-43
- Kyle, P. B., 2012. Quantitative analysis of the diffusion of hydrogen peroxide through teeth. Tese (doutorado), University Of California, California, LA, USA.
- Rotstein I., Dankner E., Goldman A., Heling I., 1996. Stabholz A and Zalkind M. Histochemical analysis of dental hard tissues following bleaching. Journal of Endodontics. 22:23-5.
- Soares, Diana G., 2013. Effective tooth-bleaching protocols capable of reducing H₂O₂ diffusion through enamel and dentine.

NOTA DE RESPONSABILIDADE

Os autores são os únicos responsáveis pelo material reproduzido nesse artigo.