**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ODONTOLOGIA**

**Efeitos da contração e do módulo de elasticidade de compósitos
sobre a tensão de polimerização em sistemas com diferentes
complacências: análise por elementos finitos**

JOSETE BARBOSA CRUZ MEIRA

São Paulo
2010

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO FACULDADE DE ODONTOLOGIA

Efeitos da contração e do módulo de elasticidade de compósitos sobre a tensão de polimerização em sistemas com diferentes complacências: análise por elementos finitos

JOSETE BARBOSA CRUZ MEIRA

Tese apresentada à Faculdade de Odontologia da Universidade de São Paulo, para obter o título de Livre Docente em Materiais Dentários.

São Paulo
2010

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Catálogo da Publicação
Serviço de Documentação Odontológica
Faculdade de Odontologia da Universidade de São Paulo

Meira, Josete Barbosa Cruz

Efeitos da contração e do módulo de elasticidade de compósitos sobre a tensão de polimerização em sistemas de diferentes complacências: análise por elementos finitos / Josete Barbosa Cruz Meira. -- São Paulo, 2010.

67p. : fig., tab.; 30 cm.

Tese (Livre-Docência) -- Departamento de Materiais Odontológicos -- Faculdade de Odontologia da Universidade de São Paulo.

1. Materiais compósitos poliméricos -- Ensaio de tensão. 2. Materiais dentários. I. Título.

CDD 617.695

BLACK D15

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho para o Beto, a Mari e o Bebel.

Amo vocês!

AGRADECIMENTOS ESPECIAIS

Sou uma pessoa de muita sorte, por ter ao meu lado pessoas tão especiais:

Roberto Ruggiero Braga, obrigada pelo apoio firme e constante. Sua competência, organização, determinação, comprometimento e objetividade me impulsionam. Seu carinho e afeto me confortam e me fortalecem. Sou uma mulher de muita sorte!

Rafael Yague Ballester, obrigada por ajudar a "desatar os nós" que surgiram durante a redação deste trabalho. Vejo os seus olhos brilharem quando encaixa a peça que faltava no quebra-cabeça. Isto demonstra o quanto você gosta do que faz. E faz muito bem! É muito bom trabalhar com alguém assim.

Antheunis Versluis, obrigada por todos os ensinamentos pacientemente transmitidos, especialmente a programação em Fortran. A utilização de sub-rotinas representou um grande avanço na nossa capacidade de simulação. Agora sobra mais tempo para a melhor parte do trabalho científico: discutir os achados!

Carina Tanaka, obrigada pela ajuda em diversas etapas. Sua iniciativa e disposição são impressionantes. Soma-se a elas sua grande capacidade de trabalhar em equipe. Tive muita sorte de ter uma orientada como você.

Vocês foram essenciais para a concretização deste trabalho. MUITO OBRIGADA!

AGRADECIMENTOS

Não poderia deixar de agradecer...

...aos demais professores do Departamento de Materiais Dentários,

Alyne Simões Gonçalves, Antônio Muench, Carlos Eduardo Francci, Fernando Neves Nogueira, Igor Studart Medeiros, José Fortunato Ferreira Santos, Leonardo Elloy Rodrigues Filho, Paulo Eduardo Capel Cardoso, Paulo Francisco Cesar, Rosa Helena Miranda Grande, Victor Elias Arana-Chavez e Walter Gomes Miranda Jr.

pelo convívio acolhedor. Tenho muito orgulho de trabalhar com um grupo tão competente.

...aos meus (ex-) orientados,

Ana Carolina Pereira de Carvalho, Andrea Cristina Rangel Baptista, Andrea Fagundes Vaz dos Santos, Camila Oliveira Moraes Esposito, Daniela Gaiño, Fernanda Silveira Yoshida, Mayra Fidelis Zamboni Quitero, Neide Pena Coto e Thiago Cesar Ramalho Pereira

pela oportunidade de ensinar o que sei sobre análise por elementos finitos. Saibam que aprendi muito com vocês.

...aos funcionários do Departamento de Materiais Dentários,

Antônio Carlos Lascafa, Elidamar Guimarães, Rosa Cristina Nogueira e Silvio Soares

pelo apoio e pela amizade.

...aos docentes da Escola Politécnica da USP,

Larissa Driemeier, Raul Gonzalez Lima e Roberto Martins de Souza

pela paciência em nos ensinar.

...aos co-autores não mencionados anteriormente,

Bárbara Pick, Carmem Silvia Pfeifer, Edmea Lodovici, Eliane Plácido, Flávia Gonçalves, Flávia Pires Rodrigues, Ísis Andrea Poiate, Letícia Cristina Boaro, Marcelo F. Witzel e Tathy Aparecida Xavier

pelas trocas de experiências.

...ao amigo *Carlos José Soares*, por ter incentivado e facilitado a nossa viagem para

Minneapolis.

...à amiga *Nívea Fróes*, pelas últimas correções.

...à *Gláuci Elaine Damásio Fidelis*, pela formatação final.

...à empresa MSC. Software, em especial ao *Eduardo Araújo*, pelo suporte técnico.

...à FAPESP, Pró reitoria de Pós-graduação e Pró Reitoria de Pesquisa, pelos apoios financeiros.

Finalmente, gostaria de agradecer à minha família:

A meus avós,

*Lá em nosso Sertão, onde ao contemplar em silêncio
O cantar dos pássaros, que exalta a alegria da vida,
O cheiro da chuva, que traz a esperança de boas colheitas,
O orvalho condensado nas folhas, que se mistura com o suor do trabalho árduo,
E o brilho do céu estrelado que enaltece a presença de Deus..
..A Natureza fez de vocês mestres equilibrados, corajosos e perseverantes.
Obrigada por terem me ensinado e dado...o que mais ninguém poderia...*

A meu pai,

*A emoção é nítida nos olhos de antigos pacientes ao saberem que estão diante dos filhos do "finado
Zé Meira"...um médico de bondade indescritível.
Sorte, tiveram seus pacientes...Receberam atenção e carinho quando iam buscar diagnósticos e
medicamentos; já lá vão trinta anos e ainda lhes queima a saudade.
Sorte maior tive eu...que tenho orgulho de ser sua filha.*

À minha mãe,

*As palavras fugiram...a emoção colabora para a fuga.
Talvez não fugiram, apenas não existem.
Não há palavras para expressar o amor de mãe...
Hoje entendo isso mais do que nunca.
Mãe, te amo muito!*

À tia Sô,

*Você é como uma mãe para mim.
Perdi meu pai cedo, mas, em compensação, fui criada com duas mães.
Tia, te amo muito!*

Ao meu irmão,

*Seu abraço é forte e acolhedor,
Sua amizade é verdadeira e ilimitada,
Sua alegria de viver é contagiante.*

Aos tios, tias e primos,

*obrigada pelos valores morais transmitidos, pelos exemplos de coragem e determinação e,
principalmente, pelo amor e carinho que sempre me deram.*

RESUMO

Meira JBC. Efeitos da contração e do módulo de elasticidade de compósitos sobre a tensão de polimerização em sistemas com diferentes complacências: análise por elementos finitos [tese]. São Paulo: Universidade de São Paulo, Faculdade de Odontologia; 2010.

O objetivo deste trabalho foi simular, por análise de elementos finitos, o ensaio de tensão de polimerização com vistas a um melhor entendimento da mecânica do teste que permita explicar divergências encontradas entre estudos que utilizaram montagens experimentais semelhantes, porém com diferentes substratos de colagem. Com base em dados extraídos da literatura, foi formulada a hipótese que o efeito da contração volumétrica e do módulo de elasticidade do compósito sobre a tensão de polimerização depende da complacência do sistema. Em sistemas de teste com alta complacência, os valores de tensão estariam diretamente relacionados à contração do compósito, enquanto que a utilização de sistemas menos complacentes realçaria a influência do módulo de elasticidade do compósito. Um ensaio de tensão de polimerização frequentemente utilizado foi simulado pelo método por elementos finitos. Devido à simetria geométrica e de carregamento, apenas um oitavo do modelo foi representado. Foram simulados quatro diferentes complacências do teste, correspondentes a diferentes materiais dos bastões: aço, vidro, compósito e acrílico. A contração de polimerização foi simulada através de analogia térmica. A temperatura foi reduzida em 1°C e o coeficiente de expansão térmica foi ajustado para conferir a contração volumétrica desejada. A polimerização foi simulada em duas fases: pré-gel e pós-gel. Na fase pré-gel os elementos do compósito apresentavam módulo de elasticidade bastante baixo, para simular o alívio de tensões decorrente do escoamento do compósito nos estágios iniciais da polimerização. Na fase pós-gel, os elementos do compósito apresentavam seu valor final de módulo de elasticidade. Foram simulados compósitos com módulos entre 1 e 12 GPa (em incrementos de 1 GPa) e com contração volumétrica total entre 0,5% e 6% (em incrementos de 0,5%). A contração pós-gel foi 30% da contração volumétrica total. A tensão nominal foi calculada dividindo a força de reação nodal pela área de seção transversal do cilindro. Além da tensão nominal, foram

registradas as distribuições das tensões radiais e axiais no compósito e o perfil de deformação da interface compósito/bastão. A hipótese foi parcialmente confirmada. Para um módulo constante, o aumento da contração aumenta a tensão, independentemente do material do bastão. Para uma contração constante, o efeito do módulo sobre a tensão depende do material do bastão. Se o módulo de elasticidade e a contração volumétrica aumentam simultaneamente, a tensão de polimerização aumenta independentemente do material do bastão. Se o módulo de elasticidade aumenta e a contração volumétrica diminui, a evolução da tensão dependerá do material do bastão. Para o bastão de acrílico, a tensão diminui, devido à diminuição da contração. Com os demais bastões o efeito do módulo de elasticidade pode prevalecer sobre o efeito da contração, na dependência dos valores de módulo de elasticidade e contração dos compósitos em estudo. As contradições encontradas nos trabalhos publicados são explicadas em função da possibilidade de interação entre módulo de elasticidade e contração volumétrica e destas variáveis com o material do bastão.

Palavras-chave: Análise por elementos finitos. Tensão de polimerização. Complacência. Ensaio mecânicos. Compósitos.

ABSTRACT

Meira JBC. Effects of composite shrinkage and elastic modulus on polymerization stress in systems with different compliances: finite element analysis. [thesis]. São Paulo: Universidade de São Paulo, Faculdade de Odontologia; 2010.

The purpose of the present study was simulate, using finite element analysis, the polymerization stress test aiming at a better understanding of the test mechanics that could explain the divergences among studies using similar experimental set-ups but different bonding substrates. Based on literature data, a hypothesis was formulated stating that the effects of composite volumetric shrinkage and elastic modulus on polymerization stress depend upon the compliance of the testing system. In high compliance systems, stress values would be directly related to shrinkage, while low compliance systems would emphasize the influence of the composite elastic modulus. A frequently used testing apparatus was simulated by finite element method. Due to the geometry and loading symmetry, only one-eighth of the model was represented. Four different compliance levels were simulated, corresponding to different rod materials: steel, glass, composite and acrylic. Polymerization shrinkage was simulated by thermal analogy. Temperature was reduced by 1°C and the coefficient of thermal expansion was adjusted to result in the desired shrinkage. Polymerization was simulated in two stages, pre-and post-gel. In the pre-gel phase, the elements representing the composite presented very low modulus to simulate the stress relief resulting from viscous flow occurring in the early stages of the reaction. In the post-gel phase, composite elements presented its final elastic modulus. Different composites were simulated with modulus between 1 and 12 GPa (in 1 GPa increments) and total volumetric shrinkage between 0.5% and 6% (in 0.5% increments). Post-gel shrinkage was set as 30% of the total shrinkage. Nominal stress was calculated dividing the nodal reaction force by the rod cross-section. Besides nominal stress, axial and radial stress distributions at the composite/rod interface were recorded. The hypothesis was partially confirmed. For a given elastic modulus, increases in shrinkage increase stress, regardless of the rod material. For a fixed shrinkage value, the effect of composite elastic modulus on stress depends upon the rod material. If both shrinkage and modulus increase simultaneously,

polymerization stress also increases regardless of the rod material. If shrinkage and modulus vary in opposite directions, nominal stress behavior depends upon the rod material. For acrylic rods, stress increases with shrinkage. For the other rod materials, the stress follows the increase in modulus, though experimentally such effect may not be evident depending on the choice of tested materials and their respective shrinkage and elastic modulus. Therefore, the divergences found in published studies in terms of the role of composite shrinkage and elastic modulus as determinants of polymerization stress may be explained by the interactions among these variables and the rod material.

Keywords: Finite element analysis. Polymerization stress. Compliance. Mechanical testing. Composites.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
2 REVISÃO DA LITERATURA	13
2.1 CONTRAÇÃO DE POLIMERIZAÇÃO E TENSÃO DE POLIMERIZAÇÃO	13
2.2 SIMULAÇÃO DA CONTRAÇÃO DE POLIMERIZAÇÃO POR MEF	16
2.3 ENSAIO DE TENSÃO DE POLIMERIZAÇÃO	18
2.3.1 Complacência do sistema	19
2.3.2 Contração volumétrica e módulo de elasticidade do compósito	21
3 PROPOSIÇÃO	23
3.1 PROPOSIÇÃO GERAL	23
3.2 PROPOSIÇÃO ESPECÍFICA	23
3.3 HIPÓTESE TESTADA.....	23
4 MATERIAL E MÉTODOS	24
5 RESULTADOS	27
5.1 TENSÃO NOMINAL	27
5.2 DISTRIBUIÇÃO DAS TENSÕES AXIAIS E RADIAIS	30
5.3 PERFIL DA INTERFACE COMPÓSITO / BASTÃO	36
6 DISCUSSÃO	38
7 CONCLUSÕES	48
REFERÊNCIAS	49
ANEXOS	54

1 INTRODUÇÃO

Existe um grande interesse dos pesquisadores e dos fabricantes em estudar formas de reduzir a tensão de polimerização gerada pelos compósitos odontológicos^{1, 2}, uma vez que esta é considerada uma das principais causas de fracasso das restaurações em compósito. Um ensaio mecânico muito utilizado consiste em polimerizar um cilindro de compósito entre duas superfícies planas, paralelas e opostas, de bastões de aço, vidro, compósito ou acrílico. Os bastões são conectados a uma célula de carga e ligados a um sistema de retroalimentação que mantém fixa a distância entre as extremidades de um extensômetro³⁻⁶. Esta montagem permite o cálculo da tensão nominal de polimerização, dividindo a força registrada na célula de carga pela área de seção transversal do espécime. Entretanto, seria necessário lembrar que tensão de polimerização não é uma propriedade do material, como é, por exemplo, módulo de elasticidade, contração de polimerização ou grau de conversão^{7, 8}. A tensão gerada pela contração depende das restrições impostas ao compósito que contrai. Quanto maior a restrição, maior a tensão⁹.

As restrições que surgem no ensaio mecânico acima descrito podem ser divididas em restrição longitudinal e restrição transversal¹⁰. A restrição longitudinal está relacionada com a complacência longitudinal do sistema, que, por sua vez, depende do comprimento de bastão entre as extremidades do extensômetro, área de seção transversal e módulo de elasticidade. Quanto maior a complacência longitudinal, menor a restrição longitudinal^{11, 12}. A restrição transversal (ou radial) depende da razão diâmetro/altura do compósito (fator-C) e do módulo de elasticidade do bastão. O aumento do fator-C ou do módulo de elasticidade do bastão, aumenta a restrição transversal^{9, 10, 13, 14}.

Um trabalho delineado para comparar diferentes compósitos padroniza a complacência do sistema por utilizar a mesma montagem do dispositivo de teste. Assim, as restrições longitudinais e a transversais são iguais para todos os compósitos testados. Eventuais diferenças nos valores da tensão seriam atribuídas às propriedades dos compósitos, em particular à contração volumétrica ou ao módulo de elasticidade. Portanto, seria esperado um mesmo ordenamento dos compósitos quanto à tensão de polimerização em diferentes trabalhos, mesmo que

os sistemas de teste utilizados não apresentassem complacências iguais. Entretanto, observa-se ordenamentos distintos dos compósitos e grandes contradições nas correlações entre tensão e contração e tensão e módulo, quando são utilizadas diferentes montagens do ensaio mecânico¹⁵.

Estudos que utilizam sistemas de baixa complacência relatam correlações diretas entre tensão nominal e módulo de elasticidade ou conteúdo de carga¹⁶ e correlações inversas entre tensão nominal e contração volumétrica¹⁷. Por outro lado, o uso de sistemas de alta complacência evidência uma correlação direta entre tensão nominal e contração volumétrica^{15, 18} e, em determinadas situações, pode surgir uma relação inversa entre tensão nominal e módulo de elasticidade¹⁹.

A hipótese deste estudo é que o efeito da contração volumétrica e do módulo de elasticidade de compósitos sobre a tensão de polimerização depende da complacência do sistema. Um modo sistemático para verificar a influência da complacência do sistema é mudar o material do bastão, mantendo constantes os demais parâmetros do ensaio (comprimento do bastão entre as extremidades do extensômetro, área de seção transversal). Experimentalmente é difícil isolar o efeito das variáveis contração e módulo de elasticidade do compósito sobre a tensão de polimerização, pois os fatores que influem sobre o módulo de elasticidade do compósito também costumam alterar simultaneamente a contração volumétrica. Com o método de elementos finitos (MEF) é possível isolar o efeito da contração volumétrica e do módulo de elasticidade do compósito sobre a tensão de polimerização, pois é possível alterar apenas uma das variáveis. Além disso, com o MEF é possível determinar não apenas a tensão média ou nominal, mas os deslocamentos, tensões e deformações locais do compósito. Estas informações são bastante úteis para entender a mecânica do teste.

Assim, o objetivo deste trabalho foi simular, por análise de elementos finitos, o ensaio de tensão de polimerização de diferentes compósitos com vistas a um melhor entendimento da mecânica do teste que permita explicar divergências encontradas entre estudos que utilizaram montagens experimentais semelhantes, porém com diferentes substratos de colagem.

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 CONTRAÇÃO DE POLIMERIZAÇÃO E TENSÃO DE POLIMERIZAÇÃO

O desenvolvimento de um compósito à base de monômeros de dimetacrilatos por Bowen no final dos anos 50²⁰ representou um grande marco na Odontologia Restauradora. Avanços científicos e tecnológicos na matriz resinosa, na carga, nos sistemas de ativação e nos sistemas adesivos permitiram uma ampliação das indicações deste material na clínica odontológica^{1, 21}. Entretanto, a tensão gerada pela contração que o material apresenta ao ser polimerizado continua sendo a grande limitação dos compósitos^{1, 2, 21, 22}. A tensão de polimerização é apontada como responsável pela formação de fendas entre dente e restauração²³, que permitiria a microinfiltração e, conseqüentemente, o desenvolvimento de dor pós-operatória e cárie secundária^{24, 25}.

A distância intermolecular entre os monômeros antes da polimerização é de 0,3 a 0,4 nm. A distância entre átomos da ligação covalente estabelecida no processo de polimerização é da ordem de 0,15 nm²⁶. Assim, a polimerização é acompanhada por um adensamento do material e uma contração volumétrica da matriz resinosa. Se o compósito contraísse livre no espaço, a contração ocorreria sem gerar tensão⁷. Entretanto, se o compósito estiver aderido a um substrato suficientemente rígido, haverá restrição à contração e, conseqüentemente, haverá tensão no compósito, no substrato e na interface compósito/substrato.

Mesmo quando o compósito contrai aderido a um substrato, a contração inicial ocorre sem gerar tensão, pois as curtas cadeias poliméricas formadas ainda conferem ao compósito grande capacidade de escoamento¹. À medida que a polimerização evolui, as ligações cruzadas entre as cadeias formam uma rede polimérica densa e elástica que diminui a capacidade de escoamento do compósito. Assim, durante a polimerização, é possível determinar dois momentos: o ponto gel e o ponto de vitrificação.

O ponto gel corresponde ao grau de conversão a partir do qual o polímero se torna borrachóide, por apresentar um nível de reticulação que limita o escoamento¹. Do ponto de vista químico, o ponto gel é definido pelo aparecimento de uma fração

de polímero insolúvel por todo o compósito, e ocorre com grau de conversão próximo de 5%. A contração anterior ao ponto-gel não gera tensão se houver tempo para que ocorra escoamento¹. Após o ponto gel, ainda ocorre escoamento, porém de forma mais lenta. Com o aumento do grau de conversão há um momento em que ocorre um aumento brusco do módulo de elasticidade do material. O ponto de vitrificação é definido como o grau de conversão em que a temperatura de transição vítrea do polímero ultrapassa a temperatura do ambiente no qual ocorre a polimerização. Do ponto de vista mecânico, a vitrificação corresponde ao ponto a partir do qual o polímero se torna vítreo, com relaxação desprezível ou muito demorada entre cadeias. Após a vitrificação o material se comporta como um sólido predominantemente elástico, portanto qualquer contração é acompanhada por tensão¹. Como em compósitos odontológicos fotoativados a polimerização é muito rápida, os momentos do ponto gel e do ponto de vitrificação ficam muito próximos e frequentemente são tratados como conceitos equivalentes do ponto de vista mecânico. Portanto, o momento a partir do qual a tensão de polimerização é detectável pode ser chamado de ponto gel ou ponto de vitrificação indistintamente.

A contração de polimerização é uma propriedade do material, enquanto que a tensão de polimerização não é decorrência apenas das propriedades do material⁷. A tensão de polimerização depende das restrições impostas à contração do compósito. Em testes para medir a tensão de polimerização é preciso padronizar as condições de restrição à contração do compósito, e o cálculo de tensão é feito dividindo a força registrada na célula de carga pela área de seção transversal do espécime. Esta tensão é um valor médio. A tensão local pode ser estimada por modelos de elementos finitos. A tensão local é uma grandeza tensorial, composta por três componentes de tensão normal (σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz}) e três tensões cisalhantes (τ_{xy} , τ_{yz} , τ_{zx}). Para um material isotrópico, ou seja, que apresenta as mesmas propriedades em todas as direções, a tensão pode ser definida pelas seis equações a seguir⁷:

$$\sigma_{xx} = \frac{E}{((1+\nu)(1-2\nu))((1-\nu)\epsilon_{xx} + \nu(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}))} \quad (1)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{E}{((1+\nu)(1-2\nu))((1-\nu)\epsilon_{yy} + \nu(\epsilon_{xx} + \epsilon_{zz}))} \quad (2)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{E}{((1+\nu)(1-2\nu))((1-\nu)\epsilon_{zz} + \nu(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}))} \quad (3)$$

$$\tau_{xy} = \frac{E}{(2(1+\nu))}\gamma_{xy} \quad (4)$$

$$\tau_{yz} = \frac{E}{(2(1+\nu))}\gamma_{yz} \quad (5)$$

$$\tau_{zx} = \frac{E}{(2(1+\nu))}\gamma_{zx} \quad (6)$$

onde x , y e z indicam as direções dos eixos da coordenada do modelo, E refere-se ao módulo de elasticidade do material, ν ao coeficiente de Poisson, ϵ à deformação e γ à deformação cisalhante.

Ao simular um ensaio de tensão de polimerização pelo método dos elementos finitos, é interessante registrar a tensão nominal (calculada pela divisão da força de reação nodal dos pontos de fixação do modelo, na direção X, pela área de seção transversal), as tensões axiais (que são correspondentes às tensões σ_{yy} , caso a direção y seja a do longo eixo do cilindro de compósito) e as tensões transversais nas direções radiais. A tensão radial é calculada pela fórmula:

$$\sigma_r = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{zz}}{2} + \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{2} \cos(2\theta) + \tau_{xz} \sin(2\theta) \quad (7)$$

Embora a tensão nominal obtida em ensaios mecânicos de tensão de polimerização não seja uma propriedade do material, nem simule as condições clínicas, é muito utilizada para comparar a capacidade de desenvolvimento de tensão de diferentes compósitos. Como no ensaio mecânico o compósito está submetido a condições de restrições mais facilmente determinadas e controladas, é possível um estudo mais sistemático do que ocorreria se o compósito contraísse em cavidades em dentes. Além disso, foi observada correlação positiva entre tensão nominal de polimerização e a microinfiltração *in vitro*^{5, 27}. Mas é fundamental um bom entendimento da mecânica do ensaio para poder interpretar corretamente os resultados.

2.2 SIMULAÇÃO DA CONTRAÇÃO DE POLIMERIZAÇÃO POR MEF

Nos últimos anos, o uso do método de elementos finitos nas áreas biológicas aumentou consideravelmente, inclusive na Odontologia. Modelos com diferentes níveis de simplificação têm sido utilizados para simular a contração de polimerização de compósitos. Alguns dos modelos foram construídos para representar a condição clínica, na qual o compósito está aderido às paredes das cavidades dentárias²⁸⁻³¹. Outros modelos representaram o ensaio de tensão de polimerização^{10, 13, 14, 32}.

Na maioria dos trabalhos, a contração de polimerização de compósitos foi simulada por analogia térmica^{10, 14, 28-30, 32}. Nestas análises, a contração do compósito foi ajustada pela combinação de um determinado valor de variação térmica a um valor de coeficiente de expansão térmico linear (cetl). Assim, se ao cetl for atribuído um valor de $3,33 \times 10^{-3} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, quando a temperatura final for 1°C abaixo da temperatura inicial, ocorrerá uma contração volumétrica do compósito de 1%.

Embora alguns autores tenham representado a evolução da contração e do módulo de elasticidade em função do tempo^{30, 33, 34}, a maioria dos trabalhos utilizou análise estática, na qual a contração é instantânea e imposta a um material que apresenta o módulo de elasticidade final do compósito. Nestes casos, a tensão de polimerização é superestimada por dois motivos: primeiro, não considera que uma fração da contração ocorreu em um momento que o compósito apresentava um módulo de elasticidade bem abaixo do seu valor máximo, atingido ao final do processo de polimerização; segundo, porque não é representado o escoamento que o compósito apresenta antes de atingir o ponto gel (ou ponto de vitrificação).

O escoamento do compósito na fase pré-gel pode ser representado utilizando um modelo pré e pós-gel^{30, 33}. O modelo pré e pós-gel consiste em representar a polimerização em duas etapas. Na primeira etapa, é atribuído ao compósito um módulo de elasticidade bastante baixo (em torno de 1 MPa). A tensão gerada pela contração do compósito pré-gel é bastante baixa, devido ao seu baixo módulo de elasticidade. Assim, embora a lei constitutiva seja de um material linear elástico o efeito sobre a tensão é semelhante ao gerado pelo escoamento³³.

Alguns autores³⁵⁻³⁷ já demonstraram que o comportamento visco-elástico do compósito no início da polimerização (primeiros 3 minutos) poderia ser representado com o modelo de Maxwell^a e no restante do processo poderia ser representado com o modelo de Kelvin^b. Entretanto, os modelos visco-elásticos são pouco utilizados. Os fatores que podem justificar o pequeno número de trabalhos que tenham utilizado modelo visco-elástico são: a dificuldade em obter os parâmetros experimentais do material para fornecer ao programa de elementos finitos; o alto custo computacional das análises que, apesar do avanço tecnológico, ainda são muito demoradas, especialmente em modelos com geometria mais complexa e grande número de elementos; finalmente, o fato dos modelos lineares-elásticos pré-gel e pós-gel fornecerem uma boa predição da tensão gerada pela contração do compósito.

^a O modelo viscoelástico de Maxwell consiste na associação em série de um componente elástico (usualmente representado por uma mola) com um componente viscoso (usualmente representado por um amortecedor).

^b O modelo viscoelástico de Kelvin consiste na associação em paralelo de um componente elástico com um componente viscoso.

2.3 ENSAIO DE TENSÃO DE POLIMERIZAÇÃO

O ensaio mecânico mais utilizado para avaliar a tensão de polimerização consiste em polimerizar o compósito entre duas superfícies planas de aço, vidro, compósito ou acrílico^{6, 38}. Ao contrair, o compósito aproxima as superfícies às quais se encontra aderido. Esta aproximação traciona a célula de carga que registra a força desenvolvida durante a polimerização. Algumas montagens incluem um extensômetro para diminuir a complacência do sistema. Com o extensômetro, garante-se que não exista deslocamento relativo entre os dois pontos onde ele é fixado. Para evitar este deslocamento, a cabeça de avanço da máquina de ensaios se movimenta sob o comando da informação recebida pelo extensômetro: através deste sistema de retro-alimentação a distância entre os pontos de fixação é mantida constante.

A tensão nominal de polimerização é calculada dividindo a força registrada na célula de carga pela área de seção transversal do espécime. Este cálculo assume que as tensões são uniformes e uniaxiais. Entretanto, as tensões não são nem uniformes, nem uniaxiais. A falta de uniformidade e a triaxialidade das tensões ficam evidentes nos trabalhos que simularam o ensaio de tensão de polimerização^{10, 32}. Ao contrair, o compósito tende não apenas a aproximar os bastões, mas também a diminuir o próprio diâmetro, o que induz uma diminuição do diâmetro do bastão na região da interface. Esta fração da força de contração não é detectada pela célula de carga e, portanto, não é computada para efeito de cálculo da tensão. As tensões transversais são altas nos ensaios de tensão de polimerização porque, devido às limitações impostas pela fotopolimerização, os espécimes normalmente apresentam uma alta razão de aspecto (diâmetro dividido pela altura).

Os primeiros pesquisadores a trabalhar nesta área utilizaram bastões de aço^{9, 11, 12, 39}. Devido principalmente aos problemas de polimerização dos compósitos fotoativados, os bastões de aço foram substituídos por bastões de vidro^{40, 41}. Entretanto, os bastões de vidro também apresentam problemas durante a realização do ensaio, como o descolamento do compósito ou a fratura do bastão. Em ambos os casos, é necessário descartar o espécime.

Mais recentemente, alguns autores^{15, 18, 42} começaram a utilizar bastões de acrílico por apresentarem a transparência do vidro (atuando como meio condutor óptico para a passagem da luz durante a fotopolimerização), associada a uma melhor relação entre a resistência de união bastão / compósito e as tensões geradas durante o ensaio, o que resulta em um risco muito menor de descolamento ou de fratura do bastão durante o ensaio. Outro material também utilizado como bastão é o compósito^{10, 43}. Embora o compósito ofereça a vantagem de apresentar um módulo de elasticidade mais próximo ao da dentina, a dificuldade de obtenção de bastões padronizados e o fato de não serem transparentes são provavelmente responsáveis pelo pequeno número de trabalhos que utilizaram este material como substrato.

2.3.1 Complacência do sistema

A complacência do sistema refere-se ao quanto ele permite que a interface bastão / compósito se desloque por ação das forças de contração¹³. Muitas vezes, o termo é substituído pelo seu inverso, que é a rigidez do sistema. Assim, falar que o sistema apresenta baixa complacência é o mesmo que dizer que o sistema é rígido. Nas máquinas de ensaios universais, os componentes do sistema são interligados por encaixes que apresentam folgas. Tanto as deformações dos componentes do sistema quanto as folgas entre eles aumentam a complacência do sistema. Para testes como o de tensão de polimerização, em que as magnitudes dos deslocamentos do compósito em teste são pequenas, é importante que a complacência não seja muito alta, ou então o sistema não acusaria tensão porque seria equivalente ao caso do compósito contrair sem restrições.

Nas montagens que utilizam extensômetro, a complacência é diminuída porque qualquer aproximação das partes fora do extensômetro é compensada pelo afastamento da cabeça de avanço da máquina de ensaios². Portanto, a única complacência do sistema será compreendida entre os pontos de fixação do extensômetro¹⁰. A complacência longitudinal (C_L) é a mais considerada e refere-se ao valor de alongamento (ΔL , em milímetros) dos bastões entre os pontos de fixação por unidade de força (F , em Newtons) provocada pela contração do

compósito e registrada pela célula de carga¹³. Outra forma de calcular a complacência longitudinal é dividir o comprimento inicial (L_0) de bastão entre os pontos de fixação do extensômetro pelo produto da área de seção transversal (A) e módulo de elasticidade (E) dos bastões. Já está bastante estabelecida na literatura a influência da complacência do sistema de teste sobre os valores de tensões nominais obtidas: quanto maior a complacência, menor o valor de tensão nominal de polimerização^{11, 12}.

$$C_L = \Delta L / F \quad (9)$$

$$C = L_0 / AE \quad (10)$$

O cálculo da complacência longitudinal considera que o alongamento (longitudinal) do bastão é uniforme em sua seção transversal. Entretanto, uma simulação por elementos finitos³² demonstrou que o alongamento não é uniforme, porque a interface bastão / compósito, inicialmente plana, apresenta um formato côncavo ao final do ensaio devido às tensões transversais. Ao calcular a complacência considerando a média de alongamento entre os pontos situados na altura do extensômetro e os correspondentes pontos na interface, observou-se, paradoxalmente, um aumento da complacência do bastão ao simular compósitos mais rígidos. Isto poderia ser explicado pelo fato do compósito mais rígido, que também tem maior força de contração, apresentar maior facilidade para tornar a interface côncava, por gerar maiores tensões transversais. Ou seja, os nós da periferia apresentam maior deslocamento longitudinal, provocado por uma força transversal, que não é registrada pela célula de carga. Assim, o valor de complacência aumenta porque parte do deslocamento longitudinal é consequência de forças transversais, que não são consideradas na complacência longitudinal calculada por análise por elementos finitos.

A consideração da complacência radial, ou transversal, é menos frequente na literatura^{10, 14}. Ao aumentar o módulo de elasticidade do bastão, aumenta-se a restrição à contração transversal do compósito, portanto diminui-se a complacência transversal. Como o módulo de elasticidade também altera a complacência longitudinal, é difícil isolar o efeito de cada uma das complacências. Em uma simulação por elementos finitos¹⁴, foi possível mudar o módulo de elasticidade do bastão e manter a complacência longitudinal através da mudança do comprimento

do bastão. Neste estudo, a complacência transversal estava relacionada ao módulo de elasticidade do material (12 GPa ou 207 GPa), enquanto que a complacência longitudinal (1×10^{-6} N/mm ou 28×10^{-6} N/mm) foi definida pela associação do módulo e do comprimento do bastão. Os autores observaram interação significativa entre as duas variáveis. Para uma baixa complacência longitudinal, uma baixa complacência transversal aumentou ainda mais a tensão de polimerização. Para uma complacência longitudinal alta, a complacência transversal não influenciou sobre a tensão.

2.3.2 Contração volumétrica e módulo de elasticidade do compósito

Como não há tensão sem contração, parece intuitivo pensar que compósitos que apresentam maior contração apresentariam maior tensão de polimerização⁴⁴. Entretanto, a tensão é influenciada por outros fatores que interagem com a contração⁴⁵, por exemplo, o módulo de elasticidade. Assim, podem ocorrer casos em que pequenas contrações sejam acompanhadas por grandes tensões, e vice-versa.

Um estudo que utilizou um sistema de baixa complacência¹⁷ confirmou a possibilidade de correlação negativa entre contração volumétrica e tensão. Na série de 17 compósitos comerciais avaliados, foi observada uma correlação inversa entre contração (determinada em dilatômetro de mercúrio) e módulo de elasticidade (medido em ensaio de tração). Um dos compósitos testados representou uma exceção por apresentar baixa contração e baixa tensão. Os autores justificaram que neste compósito microparticulado, embora a porcentagem de carga inorgânica fosse menor (em torno de 40% em volume) do que dos compósitos híbridos (em torno de 60%) aos quais foi comparado, a contração era baixa porque parte da matriz era adicionada em aglomerados pré-polimerizados. Esta particularidade do referido compósito já tinha sido considerada por outros autores^{46, 47}.

Outro trabalho que também utilizou sistema de alta complacência¹⁶ encontrou uma correlação positiva entre tensão e porcentagem de carga inorgânica para 11 compósitos comerciais. Embora os autores não tenham avaliado o módulo de elasticidade, ou a contração volumétrica, pode-se supor que, de modo geral, materiais com maior porcentagem de carga inorgânica apresentariam menor

contração volumétrica e maior módulo de elasticidade. Assim, seria também esperada uma correlação positiva entre tensão e módulo e uma correlação negativa entre tensão e contração.

Entretanto, quando o ensaio foi realizado em sistema de alta complacência, os resultados foram diferentes, ou mesmo contraditórios. Um destes estudos¹⁵ avaliou a tensão, contração volumétrica (medida em dilatômetro de mercúrio), módulo de elasticidade (medido através de ensaio de dobramento em três pontos) e grau de conversão de nove compósitos experimentais. Os autores encontraram correlação positiva entre tensão e as demais variáveis (contração, módulo e grau de conversão), sendo que o coeficiente de regressão foi mais alto na correlação entre tensão e contração (0,825) do que entre tensão e módulo (0,623). Vale destacar que os compósitos testados apresentavam o mesmo conteúdo inorgânico e diferentes concentrações de Bis-GMA, Bis-EMA e TEGDMA. Assim, o aumento de módulo de elasticidade e o aumento de contração eram determinados pelo aumento no grau de conversão. Ou seja, havia uma relação direta entre contração e módulo de elasticidade.

Outro trabalho que utilizou sistema de alta complacência¹⁹ verificou uma relação inversa entre tensão e módulo de elasticidade e uma correlação positiva entre tensão e contração. Neste trabalho foram comparados oito compósitos experimentais com mesma composição da matriz resinosa e diferentes porcentagens de carga inorgânica (entre 25% e 60% em volume, com incrementos de 5%). Assim, neste trabalho existia uma relação inversa entre contração e módulo de elasticidade, uma vez que o aumento da proporção de carga inorgânica era acompanhado por aumento do módulo e diminuição da contração.

Os resultados de trabalhos publicados que avaliaram o efeito da contração e do módulo de elasticidade sobre a tensão apresentam informações conflitantes. As aparentes contradições parecem ser decorrentes da diferença de complacência entre os trabalhos e da interação entre contração e módulo, que ora apresentam efeitos opostos sobre a tensão, ora apresentam efeitos sinérgicos. Entender o porquê destas contradições é o objetivo geral desta tese.

3 PROPOSIÇÃO

3.1 PROPOSIÇÃO GERAL

Simular, por análise de elementos finitos, o ensaio de tensão de polimerização com vistas a um melhor entendimento da mecânica do teste que permita explicar divergências encontradas entre estudos que utilizaram montagens experimentais semelhantes, porém com substratos de colagem variados, que produzem diferentes complacências.

3.2 PROPOSIÇÃO ESPECÍFICA

Verificar a influência e interações dos seguintes fatores sobre a tensão de polimerização:

- Complacência do sistema, que está vinculada ao módulo de elasticidade do bastão;
- Contração volumétrica do compósito em teste;
- Módulo de elasticidade do compósito em teste.

3.3 HIPÓTESE TESTADA

O efeito da contração volumétrica e do módulo de elasticidade do compósito sobre a tensão de polimerização dependeria do E do material do bastão. Em sistemas de teste que utilizam bastões menos rígidos, os valores de tensão estariam mais influenciados pela contração do compósito, enquanto que a utilização de bastões mais rígidos realçaria a influência do módulo de elasticidade do compósito.

4 MATERIAL E MÉTODOS

Foi simulado, pelo método por elementos finitos, uma montagem para ensaio de tensão de polimerização frequentemente utilizada^{3-5, 13, 15, 32, 42, 48}, apresentada na Figura 1. Foram utilizados os programas MSC.Mentat (como pré e pós processador) e o MSC.Marc (como processador). Devido à simetria geométrica e de carregamento, apenas um oitavo do modelo foi representado (Figura 2). Foram simulados quatro diferentes materiais para bastão: aço, vidro, compósito e acrílico. Os valores de módulos de elasticidade para estes materiais (E) e a correspondente complacência longitudinal do bastão estão apresentados na Tabela 1. O coeficiente de Poisson foi mantido constante (0,25) a fim de isolar o efeito do E. Os nós da região correspondente ao extensômetro, na periferia do bastão, tiveram seu deslocamento longitudinalmente restringido. Foi realizado um teste de convergência de malha para garantir que os resultados não eram dependentes dela. O modelo escolhido apresentou 15.360 elementos e 17.577 nós.

Figura 1 - Foto da montagem utilizada no ensaio de tensão de polimerização: 1 - espécime de compósito, 2 - bastão inferior, 3 - braço superior do extensômetro. Retirado de Calheiros, Dental Materials, 2004⁴⁸

Figura 2 – A: Esquema da montagem utilizada no ensaio experimental, mostrando o compósito entre dois bastões e os pontos de fixação do extensômetro. B: Modelo de elementos finitos, representando 1/8 da montagem experimental. H_b : altura do bastão. H_c : altura da parte simulada do compósito. r : raio do bastão e do compósito

Tabela 1 - Módulo de elasticidade (E) dos materiais e complacência dos bastões

Material dos bastões	E (GPa)	Complacência dos bastões (N/mm)
aço	$207,0^{10}$	$1,5 \times 10^{-3}$
vidro	$64,0^{32}$	$4,8 \times 10^{-3}$
compósito	$12,0^{10}$	$26,5 \times 10^{-3}$
acrílico	$3,1^{32}$	$102,7 \times 10^{-3}$

Uma série de sub-rotinas escritas em linguagem de programação Fortran (ANEXO A) foi desenvolvida para interagir com o programa MSC.Marc Mentat 2005r3 (MSCSoftware, Santa Ana, CA, USA). O processo de polimerização foi simulado em duas fases: pré-gel e pós-gel. Como o MSC.Marc é um programa desenvolvido para mecânica de sólidos, para simular as particularidades e a grande mudança apresentada pelo material durante a polimerização, foi necessário duplicar os elementos do compósito e ativá-los em momentos diferentes^c. Para simular a fase

^c Era essencial que os elementos pré-gel e pós-gel fossem distintos, embora apresentassem os mesmos nós, para carregar a memória de volume final dos elementos pré-gel. De outro modo, ficaria anulado o efeito do alívio de tensões dado pela fase pré-gel.

pré-gel, ativavam-se os elementos que apresentavam módulo de elasticidade baixo (1 MPa) e alto coeficiente de Poisson (0,49). Enquanto os elementos pré-gel estavam ativos, a contração do compósito ocorria praticamente sem gerar tensão, simulando o alívio de tensões decorrente do escoamento do compósito nos estágios iniciais da polimerização (fase pré-gel). Para simular a fase pós-gel, no segundo incremento, eram ativados os elementos com módulos de elasticidade mais altos e específicos do compósito simulado. Ao todo foram simulados 12 módulos de elasticidade, entre 1 e 12 GPa, em acréscimos de 1 GPa. O coeficiente de Poisson de todos os compósitos pós-gel foi de 0,24.

A contração de polimerização foi simulada através de analogia térmica. A temperatura foi reduzida em 1°C e o coeficiente de expansão térmica foi ajustado para conferir a contração volumétrica desejada. Foram simulados compósitos com contração volumétrica total entre 0,5% e 6%, em acréscimos de 0,5%. A contração pós-gel foi considerada como sendo 30% da contração volumétrica total. Este valor foi escolhido com base em valores de contração total obtidos em dilatômetro de mercúrio e contração pós-gel obtidos pelo método do *strain-gauge* de compósitos fotoativados comerciais (Boaro *et al.*, dados não publicados). Assim, foram simulados 144 modelos para cada um dos quatro materiais do bastão (12 níveis de contração x 12 níveis de módulo de elasticidade), num total de 576 modelos.

A tensão nominal foi calculada dividindo a força de reação nodal pela área de seção transversal do cilindro. Como apenas 1/8 do compósito foi representado, a força de reação nodal foi multiplicada por 8. Foram construídos gráficos 3D da tensão (eixo Y) em função do módulo de elasticidade (eixo X) e da contração volumétrica (eixo Z). As superfícies de respostas para os diferentes bastões foram comparadas entre si e confrontadas com resultados de outros trabalhos experimentais publicados. Além da tensão nominal, foram registradas as distribuições das tensões radiais e axiais no compósito e o perfil de deformação da interface compósito/bastão.

5 RESULTADOS

5.1 TENSÃO NOMINAL

Os valores de tensão nominal obtidos com os diferentes substratos são apresentados em gráficos 3D de superfície. Neles, os valores de módulo de elasticidade, tensão de polimerização e contração volumétrica do compósito foram dispostos nos eixos X, Y e Z, respectivamente (Figura 3-A). Na Figura 3-B, as faixas de tensão foram projetadas no plano XZ, para complementar a visualização 3D. Devido à grande diferença nos valores de tensão observados entre os substratos, os gráficos apresentam fundos de escala distintos. Com os bastões de aço, os valores de tensão nominal ficaram entre 1,6 e 113,3 MPa; com os bastões de vidro ficaram entre 1,3 e 51,3; com os bastões de compósito, entre 0,6 e 9,9; finalmente, com os bastões de acrílico, entre 0,2 e 2,7 MPa. As superfícies de resposta apresentaram formatos distintos para cada tipo de bastão. Com o bastão de acrílico, a maior tensão foi localizada na região correspondente ao compósito com alta contração e baixo módulo de elasticidade. Com o bastão de compósito, os maiores valores de tensão nominal foram encontrados na região correspondente aos compósitos com alta contração e módulo intermediário (4 a 6 GPa). Já com os bastões de vidro e aço, o ponto mais alto ocorreu na região correspondente aos compósitos com alta contração e alto módulo de elasticidade.

Fixando-se um valor de contração, nota-se que o aumento do módulo influencia de forma diferente a variação nos valores de tensão de polimerização, na dependência do material do bastão. O padrão de resposta foi o mesmo para qualquer valor de contração; como exemplo, foram escolhidas as curvas correspondentes a uma contração volumétrica de 0,5% (Figura 4). Para o bastão de acrílico, o aumento do módulo foi acompanhado por redução nos valores de tensão. Para o bastão de compósito, a tensão aumentou para compósitos com módulos entre 1-4 GPa e diminuiu ao variar o módulo entre 4-12 GPa. Para os bastões de vidro e de aço, o aumento do módulo foi acompanhado de aumento da tensão.

Figura 3 - Tensão nominal de polimerização em função do módulo de elasticidade (X) e da contração volumétrica (Z) do compósito, com bastões de diferentes materiais. A: gráfico de contorno (resultante da projeção ortogonal da superfície 3D no plano XZ). B: gráfico 3D de superfície; linhas pretas apresentam as curvas de respostas e as brancas separam as faixas de tensões.

Figura 4 - Tensão (nominal) de polimerização em função do módulo de elasticidade do compósito, com bastões de diferentes materiais (contração 0,5 %).

Figura 5 - Tensão (nominal) de polimerização em função da contração volumétrica do compósito, com bastões de diferentes materiais (módulo de elasticidade 1 GPa). A: gráfico em escala linear. B: gráfico em escala log/log.

Na Figura 5-A foram agrupadas as curvas obtidas com diferentes materiais de bastão para os casos em que o módulo de elasticidade foi mantido constante (1 GPa) e a contração variou de 0,5% a 6%. Observou-se que o aumento da contração provocou um aumento linear na tensão de polimerização, independente do material do bastão. Para todos os casos, a tensão registrada no compósito com 6% de contração foi 12 vezes maior do que o compósito com 0,5% de contração, o que fica evidente pelo paralelismo entre as retas do gráfico tensão x contração em escala log/log (Figura 5-B). O padrão de resposta foi o mesmo para qualquer valor de módulo de elasticidade.

5.2 DISTRIBUIÇÃO DAS TENSÕES AXIAIS E RADIAIS

As distribuições das tensões axiais e radiais no compósito dos casos que combinam valores extremos de módulo de elasticidade e de contração volumétrica são apresentadas na Figura 6 e na Figura 7^d. A distribuição das tensões foi apresentada sobre a malha deformada, com fator de escala igual a 10. Regiões com tensões compressivas são apresentadas em cor cinza para todos os casos. As tensões de tração foram divididas em 10 faixas, sendo o valor mínimo igual a zero e o valor máximo correspondente à máxima tensão registrada para cada caso ($\sigma_{a,max}$: máxima tração axial ou $\sigma_{r,max}$: máxima tração radial). As informações contidas nestas figuras foram complementadas com gráficos. Para a construção dos gráficos foram registrados os valores de tensão do elemento e o respectivo volume. Os valores de tensão foram dispostos em ordem crescente e apresentados em função do volume cumulativo dos elementos (Figura 8 e Figura 9). Assim, para cada substrato de colagem, podem ser comparadas, além da distribuição, a magnitude das tensões e a fração volumétrica do compósito submetida a um determinado valor de tensão.

^d As distribuições das tensões axiais e radiais para todo intervalo de módulo de elasticidade, com os diferentes materiais de bastão, estão apresentadas entre o ANEXO B e o ANEXO I.

Para um dado substrato de colagem, as distribuições das tensões axiais e radiais no compósito apresentaram padrões semelhantes entre casos com mesmo módulo e contrações diferentes (na Figura 6 e na Figura 7, comparar colunas A com C e B com D). Além disso, as tensões nos elementos aumentaram 12 vezes quando a contração variou de 0,5% para 6% (comparar colunas A e B da Figura 8 e da Figura 9).

Entretanto, ao comparar casos de diferentes módulos de elasticidade do compósito ou de diferentes materiais do bastão, os padrões de distribuição axial foram distintos (na Figura 6, comparar colunas A com B, C com D, ou linhas diferentes em cada coluna). Na Figura 8, nota-se que com o bastão de acrílico, cerca de 20% do volume total do compósito ficou submetido a tensões axiais de compressão. Por outro lado, com o bastão de aço, apenas poucos elementos do compósito com módulo de 12 GPa apresentaram tensões compressivas na direção axial, o que não é possível visualizar na figura nem no gráfico. Com os bastões de acrílico e compósito, a região de máxima tensão axial ocorreu na porção central do espécime, independentemente do módulo do compósito. Com bastões de vidro ou aço, a região de maior tensão deslocou-se para a periferia do compósito, próxima à interface com o bastão.

As diferenças no padrão de distribuição das tensões radiais devidas às mudanças no módulo de elasticidade do compósito ou no material do bastão foram menos evidentes (Figura 7). As tensões geradas na direção radial foram essencialmente trativas, sendo que apenas o caso do compósito de módulo 12 GPa aderido ao bastão de acrílico apresentou uma pequena região com tensões compressivas na periferia do espécime.

Figura 6 – Distribuição das tensões axiais em compósitos dos casos que combinaram valores extremos de módulo de elasticidade (1 GPa e 12 GPa) e contração volumétrica (0,5 % e 6%), com bastões de diferentes materiais.

Figura 7 – Distribuição das tensões radiais em compostos dos casos que combinaram valores extremos de módulo de elasticidade (1 GPa e 12 GPa) e contração volumétrica (0,5 % e 6 %), com bastões de diferentes materiais.

Figura 8 - Tensões axiais em compósitos em função do volume cumulativo dos elementos, dos casos que combinaram valores extremos de módulo de elasticidade (1 GPa e 12 GPa) e contração volumétrica (0,5 % e 6 %), com bastões de diferentes materiais. A: Contração 0,5%. B: Contração 6%.

Figura 9 - Tensões radiais em compósitos em função do volume cumulativo dos elementos, dos casos que combinaram valores extremos de módulo de elasticidade (1 GPa e 12 GPa) e contração volumétrica (0,5 % e 6 %) com bastões de diferentes materiais. A: Contração 0,5%. B: Contração 6%.

5.3 PERFIL DA INTERFACE COMPÓSITO / BASTÃO

A Figura 10 apresenta o formato de um dos raios da interface compósito / bastão após a contração de polimerização, para os casos de módulos extremos (1 e 12 GPa) com contração 0,5%. A posição em Y para todos os nós do raio da interface antes da contração do compósito era igual a 0,5 mm. Nota-se que quanto mais rígido é o material do bastão, menor é o deslocamento dos nós da interface em relação ao eixo Y. Para os bastões de vidro e aço, o compósito com maior módulo de elasticidade provocou maior deslocamento da interface. Para o bastão de compósito, isso também ocorreu, porém de modo menos evidente. Para o bastão de acrílico, praticamente não houve diferença entre os deslocamentos em Y observados com os compósitos de módulos extremos. Além disso, é possível notar que os bastões de acrílico e compósito apresentam um grande encurvamento em direção ao compósito na sua periferia. O encurvamento é menos acentuado nos bastões de vidro e aço, especialmente com compósito de menor módulo.

Figura 10 – Posição inicial (linha tracejada) e final dos nós situados na interface compósito / bastão de um raio da interface.

6 DISCUSSÃO

Os ensaios mecânicos para determinação de tensões de polimerização apresentam a mesma limitação fundamental que os testes de resistência adesiva: os valores de tensão nominal obtidos com eles são afetados pela geometria e condições de contorno do espécime⁸. Assim, as mesmas críticas podem ser dirigidas a ambos os ensaios no que se refere à falta de concordância entre resultados provenientes de diferentes centros de pesquisa e ao significado clínico dos valores reportados.

O presente estudo teve como objetivo investigar as possíveis causas das divergências observadas entre estudos que utilizaram sistemas de teste semelhantes, porém com substratos de colagem constituídos por materiais com módulos de elasticidade distintos. Em linhas gerais, estudos que utilizam bastões de aço ou vidro relatam correlações diretas entre tensão nominal e módulo de elasticidade do compósito ou conteúdo de carga¹⁶ e correlações inversas entre tensão nominal e contração volumétrica¹⁷. Por outro lado, o uso de bastões de acrílico parece realçar a correlação direta entre tensão nominal e contração volumétrica^{15, 18} e, em determinadas situações, pode mostrar relação inversa entre tensão nominal e módulo de elasticidade¹⁹. Em ambos os casos, aparecem resultados contrários ao comportamento teoricamente esperado com base na Lei de Hooke, ou seja, compósitos com maior contração ou com maior rigidez tracionariam mais o bastão, resultando em maior tensão nominal. Estes resultados conflitantes poderiam ser explicados se fosse admitida interdependência entre os efeitos destas variáveis sobre a tensão.

A hipótese de que o efeito da contração volumétrica e do módulo de elasticidade do compósito sobre o desenvolvimento da tensão de polimerização depende do material do bastão foi parcialmente confirmada. O módulo de elasticidade, de fato, apresentou efeitos bastante distintos dependendo do bastão utilizado na simulação. Entretanto, todos os sistemas identificaram um efeito positivo da contração volumétrica sobre a tensão, independentemente do material do bastão. Observando-se a Figura 3, fica evidente que o resultado obtido no ensaio mecânico é fruto da interação entre o compósito testado (mais especificamente da sua contração volumétrica e seu módulo de elasticidade) e o material que constitui os

bastões entre os quais o compósito é colado. Assim, não é precipitado afirmar que os valores registrados pela célula de carga correspondem à resposta do conjunto “bastão + compósito” às mudanças físicas apresentadas por este último durante a sua polimerização.

Ao considerar a variação da tensão em compósitos com mesmo módulo de elasticidade e diferentes contrações, é possível notar o aumento na inclinação das retas em função da rigidez do material do bastão (Figura 5-A). A princípio, isto poderia ser interpretado como uma maior influência da contração sobre a tensão ao se utilizar bastões de aço em comparação a bastões de acrílico. De fato, quando a inclinação da reta é maior, a variação absoluta dos valores de tensão para um determinado aumento na contração é maior. No entanto, como os prolongamentos das retas passam pela origem das coordenadas do gráfico, variações no eixo das ordenadas são sempre proporcionais às variações no eixo das abscissas. Por exemplo, independentemente do substrato, um aumento de 6 vezes na contração provoca um aumento de magnitude igual na tensão nominal, ou seja, em termos relativos, o efeito da contração sobre a tensão foi o mesmo para os quatro substratos avaliados. Isto é visualizado com maior clareza no gráfico apresentado em escala logarítmica (Figura 5-B), no qual as retas são paralelas. As tensões locais na direção axial ou radial também variaram de forma linear com a contração, ou seja, as tensões axiais e radiais para o caso de compósito com contração 6% foram 12 vezes maiores do que os valores destas tensões para o compósito de 0,5% (Figura 8 e Figura 9)

Para um valor fixo de contração volumétrica, o aumento do módulo de elasticidade do compósito foi acompanhado por aumento da tensão nominal para os bastões de aço e de vidro (Figura 3 e Figura 4). Para o bastão de compósito, o efeito do módulo de elasticidade do compósito foi menos consistente: a tensão aumentou para compósitos com módulos entre 1-4 GPa e diminuiu ao variar o módulo entre 4-12 GPa. Além disso, as variações nos valores de tensão nominal devidas às variações no módulo de elasticidade foram relativamente pequenas, o que se reflete no paralelismo entre as faixas de tensão e o eixo das abscissas no gráfico de contorno (Figura 3-B). Para o bastão de acrílico, entretanto, o aumento do módulo de elasticidade do compósito foi acompanhado de diminuição da tensão nominal. Esta relação inversa entre módulo e tensão observada com o uso de bastões de

acrílico ocorre por causa de um fenômeno já observado em trabalho anterior, denominado “efeito pinça”³², que será explicado a seguir.

A contração do compósito provoca não apenas a aproximação dos bastões superior e inferior, mas também o dobramento de suas superfícies. Este dobramento se deve às tensões radiais geradas pela contração do compósito na direção transversal. Nos casos em que $E_{\text{bastão}}/E_{\text{compósito}}$ é menor do que 17, as superfícies dos dois bastões funcionam, em conjunto, como uma “pinça” (Figura 10), gerando tensões axiais de compressão na periferia do compósito (Figura 6). No entanto, nos casos em que a razão $E_{\text{bastão}}/E_{\text{compósito}}$ é menor do que 3 (ou seja, em todas as simulações com bastão de acrílico e com bastão de compósito associado a compósitos com E maior do que 4 GPa), o bastão tem dificuldade em deformar na superfície e “pinçar” o compósito. Com isso, ao invés da aproximação da periferia dos dois bastões, ocorre uma elevação de suas regiões centrais. Na prática, isso faz com que, durante a polimerização, o compósito mais rígido, em média, tracione menos o bastão e, com isso, o valor registrado pela célula de carga é menor. A Figura 10 confirma o menor alongamento do bastão de acrílico com o compósito mais rígido, enquanto que com os demais substratos o compósito mais rígido provoca um maior alongamento do bastão.

A análise por elementos finitos aplicada ao estudo das tensões de polimerização apresenta a grande vantagem de permitir variações nos valores de contração volumétrica e módulo de elasticidade dos compósitos de forma independente e assim obter uma ampla gama de respostas que possibilita um estudo mais abrangente do fenômeno. Na prática, existem fatores que apresentam efeitos opostos sobre as duas variáveis (por exemplo, a adição de carga inorgânica ao compósito) e fatores que atuam de forma positiva em ambas (por exemplo, o aumento do grau de conversão¹⁵).

Na Figura 11-A e na Figura 12-A, as linhas tracejadas nos gráficos de contorno indicam a evolução da tensão em casos em que módulo de elasticidade e contração volumétrica apresentam relação inversa. Nestas linhas, o incremento de 1 GPa no módulo corresponde a uma diminuição de 0,5% na contração. Para cada substrato, os valores de tensão nominal dos casos correspondentes às combinações de módulo e contração contidas na linha tracejada foram apresentados em um gráfico 2D (Figura 11-B e Figura 12-B), no qual os eixos das abscissas (inferior e superior) mostram, respectivamente, os valores de módulo e contração.

Teoricamente, o aumento de módulo e a diminuição da contração apresentariam efeitos contrários sobre a tensão. Entretanto, com o bastão de acrílico, o aumento do módulo esteve associado a uma diminuição da tensão, devido ao "efeito pinça". Assim, os valores de tensão diminuem gradualmente, passando por todas as faixas de cores (Figura 11 – A). Com o bastão de compósito, já é possível notar o antagonismo dos efeitos do módulo e da contração a partir do ponto inflexão da curva de tensão no ponto correspondente a módulo 2 GPa e contração 5,5%. Entre os dois primeiros pontos da curva observa-se um aumento da tensão atribuído ao aumento do módulo. Para estes dois pontos o módulo dobrou de valor (de 1 para 2 GPa) e a contração apresentou uma variação percentual menor (de 6 para 5,5%). Para os pontos seguintes a tensão diminuiu devido à diminuição da contração (de 5,5 para 0,5 %). Com os bastões de vidro e de aço, os efeitos antagônicos do aumento do módulo e da diminuição da contração se tornam mais evidentes. Com o vidro, no intervalo entre 1 GPa e 4 GPa, o efeito do módulo foi mais pronunciado, levando a um aumento da tensão. A partir de 4 GPa o efeito da contração foi predominante (Figura 12-B). Com o aço, no intervalo entre 1 e 5 GPa, predominou o efeito do módulo sobre o da contração; entre 5 GPa e 12 GPa, a diminuição da contração foi mais influente.

As linhas contínuas traçadas nos gráficos de contorno de tensões (Figura 11-A e Figura 12-A) indicam a evolução da tensão nos casos em que módulo de elasticidade e contração volumétrica apresentam relação direta. Os mesmos valores de tensão para estas linhas são apresentados também em gráficos 2D (Figura 11-C e Figura 12- C). De modo contrário ao das linhas tracejadas, para as linhas contínuas, um incremento de 1 GPa no módulo correspondeu a um aumento de 0,5% na contração. No gráfico de contorno percebe-se que, exceto para o acrílico, a linha contínua atravessa todas as faixas de tensão (Figura 11-A e Figura 12-A). É importante ressaltar que as curvas de tensão mostradas na Figura 11-C e Figura 12- C apresentam tendências semelhantes e, portanto, espera-se que o ordenamento de uma série de compósitos apresentando relação direta entre valores de contração e módulo seja semelhante qualquer que seja o substrato de colagem utilizado.

Figura 11 – Bastões de compósito ou acrílico: A – gráficos de contorno tensão (nas cores) x contração x módulo de elasticidade (E) do compósito. B – tensão nominal em função da contração ou do E do compósito para a linha tracejada do gráfico da coluna A. C – tensão nominal em função da contração ou do módulo de elasticidade (E) do compósito para a linha contínua do gráfico da coluna A.

Figura 12 - Bastões de vidro ou aço: A – gráficos de contorno tensão (nas cores) x contração x módulo de elasticidade (E) do compósito. B – tensão nominal em função da contração ou do E do compósito para a linha tracejada do gráfico da coluna A. C – tensão nominal em função da contração ou do módulo de elasticidade (E) do compósito para a linha contínua do gráfico da coluna A.

Os gráficos de contorno permitem analisar outras possibilidades além dos exemplos apresentados acima. Em um trabalho recente¹⁹ foram utilizados bastões de acrílico para verificar a influência do conteúdo inorgânico sobre a tensão de polimerização de compósitos experimentais. Os dados deste estudo indicam existir uma relação direta entre tensão e contração e inversa entre tensão e módulo (Figura 13 - B e C), compatível com a tendência apresentada pelos resultados da curva tracejada com o acrílico (Figura 11 - B).

Estes resultados seriam aparentemente discordantes em comparação com os relatados em um estudo que utilizou a mesma montagem experimental, no qual tanto a contração quanto o módulo apresentaram relações diretas com a tensão¹⁵ (Figura 13– E e F). No referido trabalho, diferenças encontradas nos valores de módulo de elasticidade e de contração volumétrica foram provocadas principalmente por diferenças no grau de conversão decorrentes do uso de compósitos com diferentes composições da fase orgânica. Ao aumentar a proporção de TEGDMA, observou-se um aumento do grau de conversão e, conseqüentemente, um aumento do módulo de elasticidade e da contração volumétrica. Estes resultados são compatíveis com o efeito representado pela linha contínua (Figura 11 - A). O aumento do módulo tenderia a provocar uma diminuição da tensão, devido ao efeito pinça. Entretanto, como o aumento do módulo foi acompanhado por aumento da contração, explica-se que tenham verificado uma relação direta entre tensão e módulo (Figura 13 - E).

Figura 13 – Sobreposição de resultados publicados sobre o gráfico de contorno obtido por MEF (na Figura 3, coluna B) para casos em que E do compósito e contração apresentam uma relação direta (linha contínua) ou relação inversa (linha tracejada)

A relação direta observada entre tensão e contração nos dois trabalhos descritos anteriormente parece conflitante com a correlação negativa entre tensão e contração encontrada em outro estudo no qual a montagem experimental utilizou um dos bastões de vidro e o bastão oposto de aço¹⁷. Assim, poderíamos esperar que os

resultados fossem intermediários àqueles encontrados com os bastões de vidro e com os de aço. Na série de compósitos comerciais ensaiados, foi verificada uma correlação inversa entre contração e módulo (Figura 13 - G). As porções iniciais das curvas de tensão da Figura 12-B, que contemplam o intervalo de variação de módulo dos compósitos testados, de fato apresentam uma relação inversa entre tensão e contração. Entretanto, ao sobrepor os pontos referentes às combinações de módulo e contração (e a respectiva linha de tendência) nos gráficos de contorno para vidro e aço (Figura 13-G), nota-se que a linha fica dentro de uma faixa de tensão apenas, percorrendo-a próxima ao seu limite superior (na região central) e inferior (nos extremos da linha).

Ao analisar os contornos das faixas de tensão na Figura 3, é possível notar que para o bastão de vidro cada uma das faixas de tensão encontra-se situada, em relação ao eixo da contração, dentro de limites de aproximadamente 4% de variação (pois as faixas apresentam um formato muito encurvado). Para o acrílico, como as faixas apresentam curvaturas menos acentuadas, a variação de contração em cada uma delas é ao redor de 2%. Assim, com bastões de vidro, um compósito com contração 6% (e módulo 1GPa) e um compósito com 2% (e módulo 12 GPa) apresentariam tensões nominais próximas (situadas na mesma faixa de tensões). Isso explicaria, por exemplo, resultados de tensão semelhantes obtidos em vidro por diferentes compósitos de baixa viscosidade ("flow") e compósitos de consistência regular⁴⁷.

Frente ao exposto, fica evidente que cada substrato apresenta vantagens e limitações. Bastões de acrílico não evidenciam o efeito do módulo de elasticidade devido ao efeito pinça. Por outro lado, em bastões de vidro e de aço, as tensões axiais se concentram na periferia da interface bastão/compósito, aumentando o risco de descolamento. Se o descolamento for detectado pelo pesquisador, o corpo-de-prova será descartado. No entanto, caso o descolamento passe despercebido, pode aumentar o erro experimental uma vez que a célula de carga registrará uma força menor do que a que seria registrada caso a interface não tivesse se descolado.

Nenhum substrato é capaz de reproduzir condições de complacência encontradas em situações clínicas. Dados de microinfiltração *in vitro* já apresentaram fortes correlações com dados de tensão de polimerização utilizando bastões de vidro^{5, 27} e acrílico⁴². Retomando-se a analogia feita entre o ensaio de tensão de polimerização e ensaios de resistência de união, deve-se pensar que a

grande utilidade destes ensaios é promover uma avaliação inicial dos materiais, cujo desempenho apenas poderá ser aferido através de estudos clínicos. Não obstante, nos últimos anos, através de simulações por elementos finitos, foi possível adquirir um melhor entendimento da mecânica dos ensaios de tensão de polimerização. Este entendimento, além de ser fundamental para interpretar os resultados experimentais e explicar as aparentes discrepâncias encontradas na literatura, permitirá o desenvolvimento de sistemas de teste que associe o maior número possível de características favoráveis no que se refere à distribuição de tensões e união efetiva entre compósito e substrato.

7 CONCLUSÕES

A hipótese foi parcialmente confirmada. Para uma contração constante, o aumento do módulo influencia de forma diferente a variação nos valores de tensão de polimerização, na dependência do material do bastão. Para um módulo constante, o efeito da contração sobre a tensão foi independente do material do bastão.

Se o módulo de elasticidade e a contração volumétrica aumentam simultaneamente, a tensão de polimerização aumenta independentemente do material do bastão. Se o módulo de elasticidade aumenta e a contração volumétrica diminui, a evolução da tensão dependerá do material do bastão. Para o bastão de acrílico, a tensão diminui, devido à diminuição da contração. Com os demais bastões o efeito do módulo de elasticidade pode prevalecer sobre o efeito da contração, na dependência dos valores de módulo de elasticidade e contração dos compósitos em estudo.

As contradições encontradas nos trabalhos publicados são explicadas em função da possibilidade de interação entre módulo de elasticidade e contração volumétrica e destas variáveis com o material do bastão.

REFERÊNCIAS^e

- 1 Stansbury JW, Trujillo-Lemon M, Lu H, Ding X, Lin Y, Ge J. Conversion-dependent shrinkage stress and strain in dental resins and composites. *Dent Mater*. 2005 Jan;21(1):56-67.
- 2 Braga RR, Ferracane JL. Alternatives in polymerization contraction stress management. *Crit Rev Oral Biol Med*. 2004;15(3):176-84.
- 3 Calheiros FC, Daronch M, Rueggeberg FA, Braga RR. Influence of irradiant energy on degree of conversion, polymerization rate and shrinkage stress in an experimental resin composite system. *Dent Mater*. 2008 Sep;24(9):1164-8.
- 4 Calheiros FC, Sadek FT, Boaro LC, Braga RR. Polymerization stress related to radiant exposure and its effect on microleakage of composite restorations. *J Dent*. 2007 Dec;35(12):946-52.
- 5 Calheiros FC, Sadek FT, Braga RR, Cardoso PE. Polymerization contraction stress of low-shrinkage composites and its correlation with microleakage in class V restorations. *J Dent*. 2004 Jul;32(5):407-12.
- 6 Condon JR, Ferracane JL. Reduced polymerization stress through non-bonded nanofiller particles. *Biomaterials*. 2002 Sep;23(18):3807-15.
- 7 Versluis A, Tantbirojn D. Relationship between shrinkage and stress. In: Klinger K, editor. *Dental computing and applications: advanced techniques for clinical Dentistry*. Hershey: IGI Global; 2009. p. 45-64.
- 8 Versluis A, Tantbirojn D, Douglas WH. Why do shear bond tests pull out dentin? *J Dent Res*. 1997 Jun;76(6):1298-307.
- 9 Feilzer AJ, De Gee AJ, Davidson CL. Setting stress in composite resin in relation to configuration of the restoration. *J Dent Res*. 1987 Nov;66(11):1636-9.
- 10 Laughlin GA, Williams JL, Eick JD. The influence of system compliance and sample geometry on composite polymerization shrinkage stress. *J Biomed Mater Res*. 2002;63(5):671-8.

^e De acordo com Estilo Vancouver.

- 11 Alster D, Feilzer AJ, de Gee AJ, Davidson CL. Polymerization contraction stress in thin resin composite layers as a function of layer thickness. *Dent Mater*. 1997 May;13(3):146-50.
- 12 Alster D, Venhoven BA, Feilzer AJ, Davidson CL. Influence of compliance of the substrate materials on polymerization contraction stress in thin resin composite layers. *Biomaterials*. 1997 Feb;18(4):337-41.
- 13 Witzel MF, Ballester RY, Meira JB, Lima RG, Braga RR. Composite shrinkage stress as a function of specimen dimensions and compliance of the testing system. *Dent Mater*. 2007 Feb;23(2):204-10.
- 14 Meira JB, Braga RR, de Carvalho AC, Rodrigues FP, Xavier TA, Ballester RY. Influence of local factors on composite shrinkage stress development--a finite element analysis. *J Adhes Dent*. 2007 Dec;9(6):499-503.
- 15 Goncalves F, Pfeifer CS, Ferracane JL, Braga RR. Contraction stress determinants in dimethacrylate composites. *J Dent Res*. 2008 Apr;87(4):367-71.
- 16 Condon JR, Ferracane JL. Assessing the effect of composite formulation on polymerization stress. *J Am Dent Assoc*. 2000 Apr;131(4):497-503.
- 17 Kleverlaan CJ, Feilzer AJ. Polymerization shrinkage and contraction stress of dental resin composites. *Dent Mater*. 2005 Dec;21(12):1150-7.
- 18 Charton C, Falk V, Marchal P, Pla F, Colon P. Influence of Tg, viscosity and chemical structure of monomers on shrinkage stress in light-cured dimethacrylate-based dental resins. *Dent Mater*. 2007 Nov;23(11):1447-59.
- 19 Gonçalves F, Kawano Y, Ferracane JF, Braga RR. Influence of inorganic fraction on polymerization stress development in composites *Dent Mater*. 2010;26(2):e126.
- 20 Bowen RL. Dental filling material comprising vinyl silane treated fused silica and a binder consisting of the reaction product of bis-phenol and glycidil acrylate. US Patent 3.066. 1962:112.
- 21 Braga RR, Ballester RY, Ferracane JL. Factors involved in the development of polymerization shrinkage stress in resin-composites: a systematic review. *Dent Mater*. 2005 Oct;21(10):962-70.
- 22 Davidson CL, Feilzer AJ. Polymerization shrinkage and polymerization shrinkage stress in polymer-based restoratives. *J Dent*. 1997 Nov;25(6):435-40.

- 23 Alomari Q, Ajlouni R, Omar R. Managing the polymerization shrinkage of resin composite restorations: a review. *SADJ*. 2007 Feb;62(1):12, 4, 6 passim.
- 24 Hilton TJ. Can modern restorative procedures and materials reliably seal cavities? In vitro investigations. Part 2. *Am J Dent*. 2002 Aug;15(4):279-89.
- 25 Hilton TJ. Can modern restorative procedures and materials reliably seal cavities? In vitro investigations. Part 1. *Am J Dent*. 2002 Jun;15(3):198-210.
- 26 Peutzfeldt A. Resin composites in dentistry: the monomer systems. *Eur J Oral Sci*. 1997 Apr;105(2):97-116.
- 27 Ferracane JL, Mitchem JC. Relationship between composite contraction stress and leakage in Class V cavities. *Am J Dent*. 2003 Aug;16(4):239-43.
- 28 Ausiello P, Apicella A, Davidson CL. Effect of adhesive layer properties on stress distribution in composite restorations--a 3D finite element analysis. *Dent Mater*. 2002 Jun;18(4):295-303.
- 29 Ausiello P, Apicella A, Davidson CL, Rengo S. 3D-finite element analyses of cusp movements in a human upper premolar, restored with adhesive resin-based composites. *J Biomech*. 2001 Oct;34(10):1269-77.
- 30 Versluis A, Tantbirojn D, Pintado MR, DeLong R, Douglas WH. Residual shrinkage stress distributions in molars after composite restoration. *Dent Mater*. 2004 Jul;20(6):554-64.
- 31 Kowalczyk P. Influence of the shape of the layers in photo-cured dental restorations on the shrinkage stress peaks-FEM study. *Dent Mater*. 2009 Dec;25(12):e83-91.
- 32 Goncalves F, Pfeifer CS, Meira JB, Ballester RY, Lima RG, Braga RR. Polymerization stress of resin composites as a function of system compliance. *Dent Mater*. 2008 May;24(5):645-52.
- 33 Versluis A, Tantbirojn D, Douglas WH. Do dental composites always shrink toward the light? *J Dent Res*. 1998 Jun;77(6):1435-45.
- 34 Koplin C, Jaeger R, Hahn P. A material model for internal stress of dental composites caused by the curing process. *Dent Mater*. 2009 Mar;25(3):331-8.

- 35 Dauvillier BS, Aarnts MP, Feilzer AJ. Modeling of the viscoelastic behavior of dental light-activated resin composites during curing. *Dent Mater.* 2003 Jun;19(4):277-85.
- 36 Dauvillier BS, Feilzer AJ, De Gee AJ, Davidson CL. Visco-elastic parameters of dental restorative materials during setting. *J Dent Res.* 2000 Mar;79(3):818-23.
- 37 Dauvillier BS, Hubsch PF, Aarnts MP, Feilzer AJ. Modeling of viscoelastic behavior of dental chemically activated resin composites during curing. *J Biomed Mater Res.* 2001;58(1):16-26.
- 38 Braga RR, Ferracane JL. Contraction stress related to degree of conversion and reaction kinetics. *J Dent Res.* 2002 Feb;81(2):114-8.
- 39 Bowen RL. Adhesive bonding of various materials to hard tooth tissues. VI. Forces developing in direct-filling materials during hardening. *J Am Dent Assoc.* 1967 Feb;74(3):439-45.
- 40 Condon JR, Ferracane JL. Reduction of composite contraction stress through non-bonded microfiller particles. *Dent Mater.* 1998 Jul;14(4):256-60.
- 41 Ferracane JL, Ferracane LL, Braga RR. Effect of admixed high-density polyethylene (HDPE) spheres on contraction stress and properties of experimental composites. *J Biomed Mater Res B Appl Biomater.* 2003 Jul 15;66(1):318-23.
- 42 Boaro LC, Goncalves F, Braga RR. Influence of the bonding substrate in dental composite polymerization stress testing. *Acta Biomater.* Feb;6(2):547-51.
- 43 Krenkel DC, Laughlin GA, Eick JD, Bowles CQ. Polymerization shrinkage stress measurement: Progress and pitfalls. *J Dent Res.* 80 (S.I. AADR)(Abstract n. 603).
- 44 Feilzer AJ, Dauvillier BS. Effect of TEGDMA/BisGMA ratio on stress development and viscoelastic properties of experimental two-paste composites. *J Dent Res.* 2003 Oct;82(10):824-8.
- 45 Pfeifer CS, Ferracane JL, Sakaguchi RL, Braga RR. Factors affecting photopolymerization stress in dental composites. *J Dent Res.* 2008 Nov;87(11):1043-7.
- 46 Labella R, Lambrechts P, Van Meerbeek B, Vanherle G. Polymerization shrinkage and elasticity of flowable composites and filled adhesives. *Dent Mater.* 1999 Mar;15(2):128-37.

47 Braga RR, Hilton TJ, Ferracane JL. Contraction stress of flowable composite materials and their efficacy as stress-relieving layers. J Am Dent Assoc. 2003 Jun;134(6):721-8.

48 Calheiros FC, Braga RR, Kawano Y, Ballester RY. Relationship between contraction stress and degree of conversion in restorative composites. Dent Mater. 2004 Dec;20(10):939-46.

ANEXOS

ANEXO A- Subrotina escrita em linguagem de programação Fortran.

```

*****
* MARC SUBROUTINE *
* by Antheunis Versluis 2009 *
*
* *** for 3 materials ***
*
* Adjust: (1) path of common statement
*          (2) strength values and material IDs
*****
subroutine ufconn(j,itype,lm,nnodmx)
implicit double precision (a-h,o-z)

c*****
c user routine for changing element connectivity
c j element number
c itype element type
c lm connectivity
c nnodmx maximum number of nodes per element
c*****
dimension lm(*)
integer conn(100000,8)
common/ufconn0/ conn

include 'C:\MSC.Software\MSC.Marc\2005\marc2005\common\elmcom'
include 'C:\MSC.Software\MSC.Marc\2005\marc2005\common\concom'

do i=1,8
  conn(j,i)=lm(i)
enddo

return

```

```

*****
end
*****
subroutine interd(m,nn,xintp,ncrd)
implicit double precision (a-h,o-z)

c*****
c user routine to get integration point coordinates
c m element number
c nn integration point number
c xintp coordinates of this integration point
c ncrd number of coordinate directions
c*****

dimension xintp(ncrd)
double precision coorip(100000,3)
common/interd0/ coorip

include 'C:\MSC.Software\MSC.Marc\2005\marc2005\common\concom'

* ..... Collect coordinates of integration points
do j=1,3
  coorip(m,j)=xintp(j)
enddo
write('102,1') inc,m
format(2i5)
1
return
end
*****
subroutine plotv(v,s,sp,etot,eplas,eCreep,t,m,nn,layer,ndix,
* nshearx,jpltdc)
implicit double precision (a-h,o-z)

```



```

dimension m(2),s(6),etot(6),ps(3),pe(3),r(3,3)
double precision i1,j2,tensile,compres,SDE,vm,mvm
double precision stress(100000,2)
integer active(0:10,100000)
integer node(100000)
integer conn(100000,8)
integer prop(100000)
double precision coorip(100000,3)

common/plotv0/ stress
common/plotv1/ active
common/plotv2/ node
common/plotv3/ prop
common/ufconn0/ conn
common/intcrd0/ coorip

include 'C:\MSC.Software\MSC.Marc\2005\marc2005\common\elmcom'
include 'C:\MSC.Software\MSC.Marc\2005\marc2005\common\concom'

* ....[determine principal stresses]
call princv(ps,r,s,ndix,nsheax,0,0,0,0)
* ....[determine invariants]
i1=ps(1)+ps(2)+ps(3)
j2=((ps(1)-ps(2))**2+(ps(2)-ps(3))**2+(ps(3)-ps(1))**2)/6.d0
* ....[determine strength differential effect]
SDE =1.d0
* =====
* ....[normalize strength values]
tensile = 40.0
compres = 40.0
* ....pre-gel,post-gel
if ((matus(1).eq.1).or.(matus(1).eq.2)) then
tensile = 40.0
compres =250.0
endif
* ....adhesive
if (matus(1).eq.3) then
tensile = 40.0
compres = 40.0
endif
* .....rod
if (matus(1).eq.4) then
tensile = 40.0
compres = 80.0
endif
* =====
* ....[calculate strength differential effect]
SDE = compres/tensile
* ....[determine equivalent stress]
vm =dsqrt(3.d0*j2)
mvm=(SDE-1.d0)*i1
mvm=mvm+dsqrt((SDE-1.d0)*i1)**2+12.d0*SDE*j2)
mvm=mvm/(2.d0*SDE)

* ....[output stresses using POST-options]
if (jplctd.eq.1) v=vm
if (jplctd.eq.2) v=mvm

* .....collect element status
active(inc,m(1))=m(1)

* .....collect material id
do i=1,8
n=conn(m(1),i)
if ((matus(1).eq.1).or.(matus(1).eq.2)) then
node(n)=1
endif
enddo

* .....collect element properties
prop(m(1))=matus(1)
write(1:12,12) inc,m(1),prop(m(1))
12 format (3i5)

* .....calculate fi
y=coorip(m(1),2)

```

```

z=coorip(m(1),3)
fi=dasin(z/dsqrt(y**2+z**2))

* .....calculate radial and axial stress
stress(m(1),1)=s(1)
stress(m(1),2)=(s(2)+s(3))/2.d0+((s(2)-s(3))/2.d0)*dcos(2.d0*fi)+
+s(5)*dsin(2.d0*fi)
write(131,1) m,stress(m(1),1),stress(m(1),2)
1 format(i5,2f10.4)
if (jplfcd.eq.3) v=stress(m(1),2)

return
end

*****
subroutine impd(inode,dd,td,xord,f,v,a,ndeg,ncrd)
implicit double precision (a-h,o-z)
c*****
c
c user subroutine for output of "displacements".
c
c inode(1) user node number
c inode(2) = 1 structural
c = 2 thermal
c = 3 fluids
c = 4 joule
c = 5 pore pressure / diffusion
c = 6 electrostatic
c = 7 magnetostatic
c = 8 electromagnetic
c = 10 acoustics
c
c dd array of incremental displacements of this node
c td array of total displacements of this node
c xord array of coordinates of this node
c f array of reaction forces/residuals
c v array of velocity (dynamics only)
c a array of acceleration (dynamics only)
c ndeg number of degrees of freedom per node
c*****
c

```

```

dimension inode(2)
dimension dd(ndeg),td(ndeg),xord(ncrd),f(ndeg),
* v(ndeg),a(ndeg)

double precision sumf(0:10,2)
double precision radius
double precision ycomp
double precision coor(100000,3)
integer node(100000)

common/impd0/ sumf
common/impd1/ radius
common/impd2/ ycomp
common/impd6/ coor
common/plotv2/ node

include 'C:\MSC.Software\MSC.Marc\2005\marc2005\common\concom'
include 'C:\MSC.Software\MSC.Marc\2005\marc2005\common\elmcom'

* .....write reaction force values
TOL=1.d-8
if (dabs(xord(1)).le.TOL) then
sumf(inc,1)=sumf(inc,1)+f(1)
write(100,1) inc,xord(1),inode(1),f(1),sumf(inc,1)
endif
if (xord(1).ge.(4.5d0-TOL)) then
sumf(inc,2)=sumf(inc,2)+f(1)
write(100,1) inc,xord(1),inode(1),f(1),sumf(inc,2)
endif
1 format(i5,f10.2,i5,2f10.4)

* .....collect radius
if (xord(2).gt.radius) then
radius=xord(2)
endif

* .....collect ycomp
if ((node(inode(1)).eq.1).and.(xord(1).gt.ycomp)) then
ycomp=xord(1)

```

```

endif

* ..... Collect nodes in an array
do j=1,3
  coor(lnode(1),j)=xord(j)+td(j)
enddo

return
end

*****
* ..... UEDINC
  subroutine uedinc(inc,incsub)
  implicit double precision (a-h,o-z)

  character*1 TAB
  integer active(0:10,1000)
  double precision sumf(0:10,2)
  double precision radius
  double precision nomstress
  double precision diameter
  double precision ycomp
  double precision length
  double precision coor(100000,3)
  double precision profile(100000,3)
  integer node(100000)
  integer conn(100000,8)
  double precision a(3),b(3),c(3),d,Area
  double precision u(8,3),vol,Volume
  integer prop(100000)
  double precision Vo,Vf,shrinkage,sri
  double precision stress(100000,2)
  double precision maxa,maxr,ratio

  common/ufconn0/ conn
  common/plotv0/ stress
  common/plotv1/ active
  common/plotv3/ prop
  common/impd0/ sumf
  common/impd1/ radius

  common/impd2/ ycomp
  common/impd6/ coor
  common/plotv2/ node
  common/uedinc0/ a,b,c,d,Area
  common/uedinc1/ u,vol,Volume
  common/uedinc2/ Vo,Vf,shrinkage,sri

* ..... define Pi
pi=2.d0*dasin(1.0d0)
TAB=char(9)

* ..... calculate diameter
diameter=2*radius

* ..... calculate length
length=2*ycomp

c* ..... write nominal stress from diferent files
c if (inc.eq.2) then
c open (unit=103,file='result2.xls',status='unknown')
c1 read (103,3,end=9)
c goto 1
c9 continue
c nomstress=sumf(inc,1)/(pi*radius**2)
c write(103,3) diameter,TAB,length,TAB,nomstress
c endif
c3 format(f10.4,a1,f10.4,a1,f10.4)

* ... Calculate surface area
c Area=0.d0
c do m=1,100000
c do j=1,3
c a(j)=coor(conn(m,1),j)
c b(j)=coor(conn(m,2),j)
c c(j)=coor(conn(m,4),j)
c enddo
c call SurfaceArea(a,b,c,d)
c Area=Area+d
c do j=1,3

```

```

c      a(j)=coor(conn(m,2),j)
c      b(j)=coor(conn(m,3),j)
c      c(j)=coor(conn(m,4),j)
c      enddo
c      call SurfaceArea(a,b,c,d)
c      Area=Area+d
c      enddo
c      write ('110,10) Area
c10  format (f16.8)

* ..... Calculate volume
Volume=0.d0
do m=1,100000
  if (prop(m).eq.1) then
    do n=1,8
      do j=1,3
        u(n,j)=coor(conn(m,n),j)
      enddo
    enddo
    call Volume2(u,vol)
    Volume=Volume+vol
c      write ('111,11) inc,m,vol,Volume
    endif
  enddo
  write ('111,11) inc, Volume
11  format (i10,f16.8)

* ..... Calculate initial e final volume
if (inc.eq.0) then
  Vo=Volume
endif
if (inc.eq.2) then
  Vf=Volume
endif

* ..... Calculate real shrinkage

* ..... write volume and nominal stress from different files
if (inc.eq.2) then

```

```

2      open (unit=105,file='results.xls',status='unknown')
      read (105,5,end=8)
      goto 2
8      continue
      shrinkage=(Vo-Vf)*100/Vo
      sri=4.1-shrinkage
      nomstress=sumf(inc,1)/(pi*radius**2)
      write(105,5) diameter,length,nomstress,Vo,Vf,shrinkage,sri
      endif
5      format(7f10.4)

* ..... write stress values for composite
do m=15361,100000
  if (active(2, m).eq.m) then
    do n=1,8
      do j=1,3
        u(n,j)=coor(conn(m,n),j)
      enddo
    enddo
    call Volume2(u,vol)
    maxa=dmax1(stress(m,1))
    maxr=dmax1(stress(m,2))
    ratio=(dmax1(stress(m,1)))/(dmax1(stress(m,2)))
    write(120,4) m, stress(m,1),vol
    write(121,6) m, stress(m,2),vol
    endif
  enddo
4      format(i5,f10.4,f16.8)
6      format(i5,f10.4,f16.8)

      return
      end

* .....
      subroutine VectorLength(a,d)
* Length d of vector a.
      implicit double precision (a-h,o-z)
      double precision a(3),d
      d=0.0d0
      do i=1,3
        d=d+a(i)**2
      enddo

```

<pre> enddo d=dsqrt(d) return end </pre>	<pre> implicit double precision (a-h,o-z) double precision u(8,3),vol integer nn(4,4),k(4,3) double precision x(4,3),a(3),b(3),c(3),d(0:4) data nn/2,4,5,7, + 1,1,1,3, + 3,3,6,6, + 6,8,8,8/ data k/2,3,4,1, + 3,4,1,2, + 4,1,2,3/ vol=0.0d0 do n=1,4 do i=1,4 do j=1,3 x(i,j)=u(nn(n,i),j) enddo enddo d(0)=0.d0 do i=1,4 do j=1,3 a(j)=x(k(i,1),j) b(j)=x(k(i,2),j) c(j)=x(k(i,3),j) enddo d(i)= c(1)*(a(2)*b(3)-a(3)*b(2)) d(i)=d(i)+c(2)*(-a(1)*b(3)+a(3)*b(1)) d(i)=d(i)+c(3)*(a(1)*b(2)-a(2)*b(1)) d(0)=d(0)+(-1.d0)**(i+1)*d(i) enddo vol=vol+dabs(d(0))/4.d0 enddo return end </pre>
<pre> * subroutine VectorSubtract(a,b,c) * Subtract vectors "c = a - b". implicit double precision (a-h,o-z) double precision a(3),b(3),c(3) do i=1,3 c(i)=a(i)-b(i) enddo return end </pre>	
<pre> * subroutine VectorProduct(a,b,c) * Vector product "c = a X b". implicit double precision (a-h,o-z) double precision a(3),b(3),c(3) c(1)= a(2)*b(3)-a(3)*b(2) c(2)=-a(1)*b(3)+a(3)*b(1) c(3)= a(1)*b(2)-a(2)*b(1) return end </pre>	
<pre> * subroutine SurfaceArea(a,b,c,d) * Calculate surface area d for triangle a-b-c. implicit double precision (a-h,o-z) double precision a(3),b(3),c(3),d double precision x1(3),x2(3),x3(3) call VectorSubtract(a,b,x1) call VectorSubtract(c,b,x2) call VectorProduct(x1,x2,x3) call VectorLength(x3,d) d=0.5d0*d return end </pre>	
<pre> * subroutine Volume2(u,vol) * Calculate volume of 3D 8-noded hexahedral element. </pre>

ANEXO B- Distribuição da tensão axial dos compostos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de acrílico, para qualquer valor de contração.

ANEXO C - Distribuição da tensão axial dos compósitos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de compósito, para qualquer valor de contração.

ANEXO D - Distribuição da tensão axial dos compostos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de vidro, para qualquer valor de contração

ANEXO E - Distribuição da tensão axial dos compósitos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de aço, para qualquer valor de contração.

ANEXO F - Distribuição da tensão radial dos compósitos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de acrílico, para qualquer valor de contração.

ANEXO G - Distribuição da tensão radial dos compósitos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de compósito, para qualquer valor de contração.

ANEXO H - Distribuição da tensão radial dos compósitos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de vidro, para qualquer valor de contração.

ANEXO I - Distribuição da tensão radial dos compósitos de diferentes módulos de elasticidade nos casos de bastões de aço, para qualquer valor de contração.