MODELO COMPUTACIONAL DE ANÁLISE DO COMPORTAMENTO MECÂNICO DA LIGA Ti-6Al-4V EM COMPARAÇÃO A LIGA Ti-20Nb

COMPUTATIONAL MODEL FOR THE MECHANICAL BEHAVIOR ANALYSIS OF THE Ti-6Al-4V TITANIUM ALLOY IN COMPARISON TO Ti-20Nb ALLOY

Alessandro Márcio Hakme da Silva[I]
Alessandro Fraga Farah[II]
Abimael Caleb Ribeiro[III]
Alexandre José Ribeiro[IV]
Jonas de Carvalho[V]

RESUMO

O presente trabalho apresenta um modelo computacional com análise pelo método dos elementos finitos aplicado a uma liga Titânio-Nióbio Ti-20Nb comparativamente a liga de titânio Ti-6Al-4V. Os dois modelos de compressão mecânica foram criados e simulados no Software Ansys. Os objetivos do trabalho foram analisar comparativamente, através de um modelo computacional, as ligas a fim de se interpretar as características mecânicas de tensões e deformações sob carregamento estático, buscando compreender e verificar se os comportamentos das ligas são similares, em vista que o nióbio poderá ser usado como material para próteses ortodônticas e ortopédicas em um cenário futuro. Foi utilizado o Método dos Elementos Finitos (MEF), que é um método numérico usado para resolver, de forma aproximada, equações diferenciais que governam o comportamento mecânico dos materiais das ligas consideradas no estudo. Foi utilizado o software de desenho 3D SpaceClaim, para a criação dos modelos simplificados TiM1 (titânio malha 1) e NbM1 (Nióbio malha 1). A análise comparativa entre os resultados computacionais e experimentais foi realizada em termos qualitativos e quantitativos. Na comparação dos comportamentos mecânicos das ligas, Ti-6Al-4V e Ti-20Nb, as tensões se concentraram na porção onde foi feita a vinculação do modelo e os maiores valores de tensão encontrados diferiram entre os modelos considerados da ordem de 7%. As tensões médias encontradas ficaram bem próximas do modelo numérico para escalas em tecidos ósseos com implantes, e as deformações totais foram pequenas comparadas com modelos para ligas de titânio mais utilizadas em medicina, o que corrobora que a liga Ti-Nb é bastante promissora para aplicações na área de saúde.

[I] Prof. Dr. do curso superior de Tecnologia em Mecânica da Faculdade de Tecnologia Deputado Waldyr Alceu Trigo de Sertãozinho (Fatec-Stz) – São Paulo – Brasil. E-mail: alessandro.hakme@fatec.sp.gov.br

[II] Prof. Dr. do curso superior de Tecnologia em Mecânica da Faculdade de Tecnologia Deputado Waldyr Alceu Trigo de Sertãozinho (Fatec-Stz) – São Paulo – Brasil. E-mail: alessandro.farah@fatec.sp.gov.br

[III] Estudante do curso superior de Tecnologia em Mecânica: processos de soldagem da Faculdade de Tecnologia Deputado Waldyr Alceu Trigo de Sertãozinho (Fatec-Stz) – São Paulo – Brasil. E-mail: abimael.ribeiro@fatec.sp.gov.br

[IV] Estudante do curso superior de Tecnologia em Mecânica: processos de soldagem da Faculdade de Tecnologia Deputado Waldyr Alceu Trigo de Sertãozinho (Fatec-Stz) – São Paulo – Brasil. E-mail: alexandre.ribeiro17@fatec.sp.gov.br

[V] Professor Titular do Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo – São Carlos, São Paulo – Brasil. E-mail: prjonas@sc.usp.br

Palavras-chave: Liga Ti-Nb. Liga Ti-6AL-4V. Comportamento mecânico. Método de elementos finitos. Análise estática.

ABSTRACT

The present work presents a computational model with finite element analysis applied to a Titanium-Niobium Ti-20Nb alloy compared to a Ti-6AL-4V titanium alloy, the two models of mechanical compression were created in Ansys Software. The objectives of the work were to comparatively analyze the alloys through a mechanical computational model to investigate the mechanical behavior of stresses and strains by the structural static model, seeking to understand and verify whether the behavior of the alloys is similar, given that the niobium material could be used as a material for orthodontic and orthopedic prostheses in a future scenario. The Finite Element Method (FEM) was used to solve, in an approximate way, differential equations that govern the mechanical behavior of the materials of the Niobium alloy created. The 3D design software SpaceClaim was used to create the simplified models TiM1 (titanium mesh 1) NbM1 (Niobium mesh 1). The comparative analysis between computational results was carried out in qualitative and quantitative terms. In the comparison of the mechanical behavior of the Ti-6Al-4V and Ti-20Nb alloys, the Von Mises Stresses were concentrated in the portion where the test was fixed, and the highest stress values found differed by around 7%. The average stresses founded were very close to the numerical model for scales in bone tissue with implants, and the total deformations were smaller than to the models for titanium alloys, more used in medicine, which confirms that the Ti-Nb alloy can be very promising in health area.

Keywords: Titanium-niobium alloy. Ti-6Al-4V titanium alloy. Mechanical behavior. Finite element method. Static structural analysis.

Data de submissão do artigo: 18/06/2021.
Data de aprovação do artigo: 31/08/2021.
DOI: 10.33635/sitefa.v4i1.163

1 INTRODUÇÃO

As ligas de implante destinadas a aplicações médicas, devem possuir uma boa estabilidade à corrosão no corpo humano, alta resistência à fadiga, alta relação resistência-peso, boa ductilidade, baixo módulo de elasticidade, excelente resistência ao desgaste, baixa citotoxicidade e um tendência muito baixa de provocar reações alérgicas. No caso dos implantes ósseos, encontrar materiais que atendam a todos os critérios acima mencionados para aplicações em saúde e tenham um módulo próximo ao do osso tem se mostrado um desafio um tanto complexo (FRIÁK *et al*. 2012). Modelos computacionais para análise do comportamento mecânico de ligas de Titânio-Nióbio (Ti-Nb) têm mostrado boas previsões para critérios de compatibilidade. Neste contexto o presente trabalho acadêmico propõe analisar comparativamente o comportamento mecânico de ligas Ti-Nb e a sua importância para a biomedicina e os demais segmentos da área da saúde. Um estudo eficiente do comportamento mecânico da liga é um grande processo para a qualidade e a compreensão dos efeitos práticos no uso de implantes médicos em seres humanos.

Atualmente, próteses ortodônticas e ortopédicas têm como aço liga composto principalmente de cromo, níquel e molibdênio. Ligas com esses tipos de materiais acabam sendo ruins para o organismo, pois tendem a corroer, assim na interface de contato pode-se gerar falhas estruturais no implante, como fratura por fadiga, bem como formação de biofilmes bacterianos. As ligas que se tem menores índices de reação no organismo são as ligas de titânio combinado com o alumínio e o vanádio, porém em regiões que sofram desgaste, as partículas ficam saturadas nos tecidos adjacentes, isso é devido o titânio ter pouca resistência a abrasão quando a região sofrer grandes esforços por cisalhamento. Devido alguns desses materiais serem tóxicos e causar danos ao corpo humano, o nióbio por possuir características como: menor resistência mecânica comparada ao titânio, tungstênio, molibdênio, baixa toxicidade e um bom custo-benefício, tem grande potencial de uso na área de saúde.

O objetivo geral do trabalho foi analisar comparativamente através de um modelo computacional a liga Ti-6Al-4V e liga Ti-20Nb, a fim de se interpretar suas propriedades mecânicas pelo software Ansys. Como objetivos específicos pretendeu-se analisar numericamente pelo método dos elementos finitos, em uma geometria cilíndrica simples, os valores de tensão e deformação dos materiais e resistência ao carregamento aplicado, como um primeiro modelo computacional biomecânico de engenharia aplicado à saúde, inicialmente através de carregamentos de compressão. Parâmetros da elasticidade isotrópica foram obtidos através da revisão da literatura envolvendo o estado da arte em pesquisas na área de saúde com o foco na análise do comportamento mecânico das ligas.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A constante busca por materiais para aplicação na medicina e odontologia se permeia em boas propriedades mecânicas e de custo não tão elevados, em pesquisas no campo dos biomateriais para o uso em implantes devem exibir propriedades como biocompatibilidade, bio-funcionalidade e resistência a corrosão e a não formação de biofilmes (Da SILVA, *et al.* 2012 e (CHEN; THOUAS, 2015). Propriedades mecânicas são: resistência a tração-compressão, modo de elasticidade e alongamento. O material sujeito a repetidos ciclos de carga ou tensão determina o sucesso em longo prazo de um implante sujeito a cargas cíclicas. Se um implante sofre fratura devido a diferença entre propriedades mecânicas existente entre ossos e implante, isso é chamado de incompatibilidade biomecânica (BLACK; HASTINGS, 1998; GEETHA, *et al.* 2009).

2.1 Ligas de Titânio

O titânio foi descoberto em 1791, por William Gregor, ao realizar experiências de tratamento da ilmenita com ácido sulfúrico e ácido clorídrico concentrado. O titânio é resistente à maioria dos ácidos orgânicos, ao ácido clorídrico e sulfúrico diluídos, a gases e soluções contendo cloro. O titânio é utilizado em diversas aplicações industriais, desde a fabricação de turbinas para aviões supersônicos até próteses dentárias. A utilização do titânio se deve as propriedades: densidade elevada (4,5 g/cm^3); alto ponto de fusão (1670 ºC); grande resistência à corrosão (equivalente à da platina); elevada resistência mecânica (comparável à do aço); estabilidade térmica; grande capacidade de dispersão e elevada brancura.

As ligas de titânio são amplamente utilizadas na fabricação de implantes médicos, pois possuem uma boa combinação de propriedades físicas e mecânicas, e excelente

biocompatibilidade. A liga mais utilizada atualmente é a Ti-6Al-4V, mas alguns estudos relataram efeitos adversos com a presença de Al e V no corpo com o passar dos anos, embora o Ti-6Al-4V tenha um módulo de elasticidade inferior (112 GPa) do que o aço inoxidável 316L (210 GPa) por exemplo. Esse valor ainda é muito maior em comparação com o módulo de elasticidade do osso (osso cortical - 15-30 GPa). Além disso, alguns estudos indicaram que efeitos citotóxicos de longo prazo podem surgir com o vanádio e que o alumínio pode estar associado a distúrbios neurológicos (Da Silva, *et. al.* 2012).

A composição química típica do Ti-6Al-4V (referida como a liga de titânio α + β) típicas investigadas no presente modelo são apresentadas nas Tabela 1.

Tabela 1 – Valores em porcentagem para composição química

Elementos	Al	V	O	N	Ti
%	6.50	4.24	0.17	0.004	Bal.

Fonte: Santos *et al.* (2017, p. 3)

2.2 Ligas de Nióbio

O nióbio é não tóxico, não alérgico e exibe alta biocompatibilidade; também promove redução do módulo de elasticidade quando combinados com o titânio, aumenta a resistência à corrosão e melhora as propriedades biológicas da liga (Da Silva, *et al.* 2012). As propriedades mecânicas do nióbio dependem principalmente de sua pureza e, em particular, de seu teor de oxigênio, nitrogênio, hidrogênio e carbono. Mesmo pequenas concentrações desses elementos podem ter um efeito muito significativo. O processo de fabricação, o nível de deformação e o tratamento térmico são outros fatores que modificam as propriedades do nióbio. Como quase todos os metais refratários, o nióbio possui uma estrutura cúbica de corpo centrado, e a temperatura de transição frágil para dúctil está abaixo da temperatura ambiente, portanto, muito fácil de conformar (NIKONOV, *et al.* 2015). À temperatura ambiente, o nióbio tem um alongamento de ruptura de mais de 20%. Embora se torne mais resistente e mais duro com o aumento da deformação, isso simultaneamente faz com que o alongamento de ruptura do material caia. Assim, embora o material perca a ductilidade, ele não se torna quebradiço, à temperatura ambiente o módulo de elasticidade do nióbio é menor do que o do tungstênio, molibdênio ou tântalo, sendo da ordem de 104 GPa,

Com objetivo de complementar informações relativas de equilíbrio de fase da liga Ti-6Al-4V e Ti-20Nb de acordo com o modelo, foram utilizados dados de Friák *et al.* (2012). A composição química típica da Liga Titânio-Nióbio 20% no presente modelo são apresentadas nas Tabela 2.

Tabela 2 – Valores em porcentagem (peso) para composição química da Liga de Ti-20Nb

Elementos	Ti	Nb
%	80	20

Fonte: Friák, *et al.* (2012)

2.3 Modelos Computacionais para Análise do Comportamento Mecânico

O pacote de software de análise estrutural da Ansys conta com ferramentas de análise de elementos finitos (FEA), análise modal, análises térmicas e elétricas, tornando possível personalizar e automatizar as simulações, analisando vários cenários de projetos e modelos

(ANSYS, 2021). Como os estudos *in vivo* representam fases de pesquisa posteriores às etapas *in vitro*, considerou-se a utilização do método computacional dos elementos finitos (MEF) como etapa inicial de estudo para consideração de uma nova liga de Nióbio com comportamento mecânico similar ao da liga de titânio convencionais, biocompatível e não tóxica para área de saúde (CHENG, *et al*. 2008). O MEF é amplamente utilizado para análises biomecânicas em próteses e modelos em materiais compósitos.

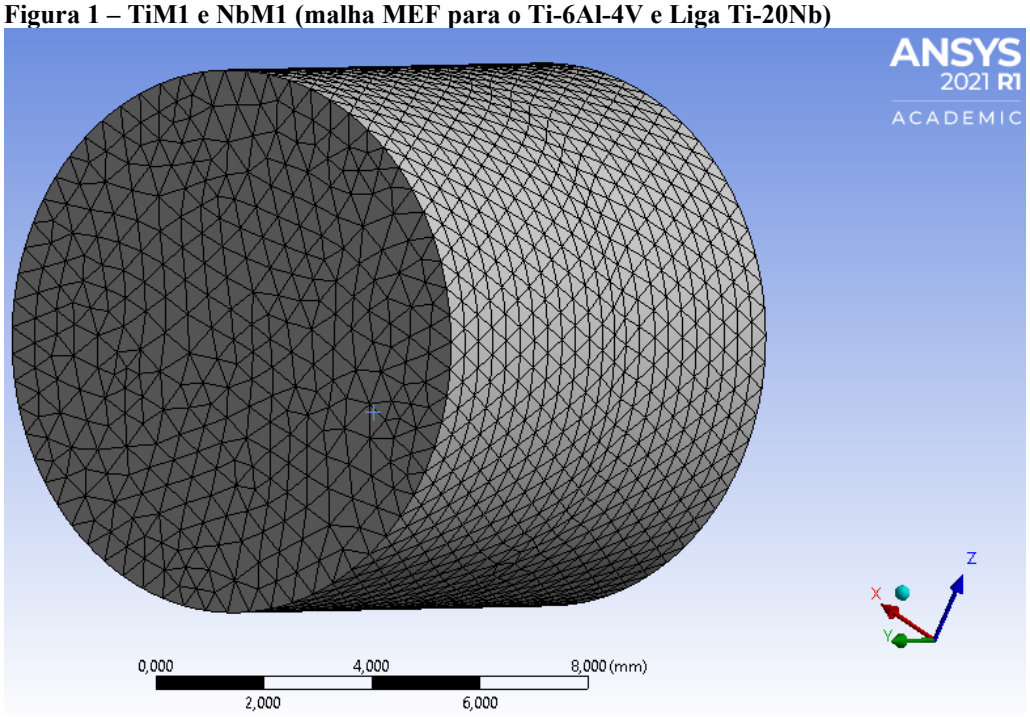
3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

Nesse trabalho foram analisados dois modelos geométricos estruturais para as ligas, com a malha e condições de contorno definidas pelo MEF.

3.1 Geometria das Estruturas

No presente estudo foram considerados dois modelos de estudo pelo método de elementos finitos pelo software Ansys 2021 [R1], nomeados como TiM1 (titânio malha 1) e NbM1 (Nióbio malha 1). Os modelos TiM1 e NbM1 são referentes a abordagem de uma malha (*mesh)* conforme ilustrado na Figura 1, gerada em um modelo geométrico cilíndrico com 10 mm de diâmetro e 9,97 mm de altura. Para a construção das geometrias foi utilizado o software SpaceClaim 2021 [R1]. Os componentes foram definidos como cilindros pois implantes e os biomateriais geralmente aderem a estruturas cilíndricas como corpo de prova para testes pré-clínicos.

Figura 1 – TiM1 e NbM1 (malha MEF para o Ti-6Al-4V e Liga Ti-20Nb)



Fonte: Fatec-Stz Ansys (2021)

3.2 Malha e Condições de Contorno

Para a criação da malha (subdivisão/elementos discretos do modelo) foram utilizadas as ferramentas do software Ansys 2021 [R1]. Os elementos foram considerados tetraédricos com tamanho dos elementos de 0.5 mm. A Tabela 3 lista os números de nós e elementos para os modelos.

Tabela 3 – Números de nós e elementos para as malhas

Malha	Nós	Elementos
TiM1	75878	53565
NbM1	75878	53565

Fonte: Fatec-Stz Ansys (2021)

3.3 Método de Elementos Finitos

As propriedades dos materiais dos modelos TiM1 e NbM1, pelo modelo estático estrutural foram considerados isotrópicos e linearmente independentes. Foi aplicada uma força máxima de 4800 N, na seção superior da geometria na direção "y" mantendo a base inferior fixa no teste de compressão, e uma vez que o peso típico de pessoas podem estar entre 50 e 120 kg, as forças aplicadas à geometria cilíndrica variaram de 0 a 4800 N para simular as condições normais, considerando que a força total do quadril pode chegar a quatro vezes o peso corporal em circunstâncias especiais (SPINELLI *et al*. 2012). As propriedades mecânicas dos materiais usados no modelo, encontram-se nas Tabelas 4 e 5, respectivamente.

Tabela 4 – Propriedades Mecânicas Isotrópicas da Liga Ti-6Al-4V

Liga	Ti-6AL-4V
Densidade (kg/m^3)	4429
Módulo de Young (GPa)	111,2
Coeficiente de Poisson	0,3387
Módulo de Elasticidade Volumétrico (GPa)	114,9
Módulo de Torção (GPa)	41,53
Tensão de Escoamento (Mpa)	845,7
Tensão Máxima (Mpa)	918

Fonte: modelo estático ANSYS (2021)

Tabela 5 – Propriedades Mecânicas Isotrópicas da Liga Ti-20Nb

Liga	Nióbio
Módulo de Young (GPa)	75
Coeficiente de Poisson	0,40
Módulo de Elasticidade Volumétrico (GPa)	125
Módulo de Torção (GPa)	26,78

Fonte: Kollnig (2016), Moreno *et al.* (2018) e ANSYS (2021)

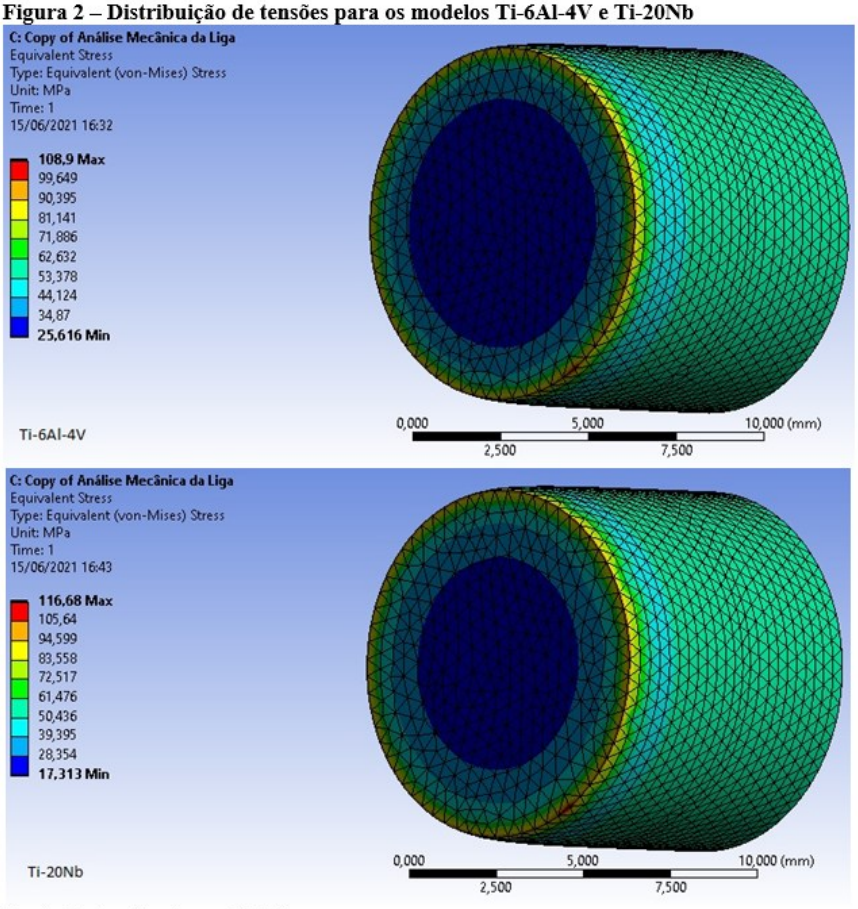
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foi realizada uma análise qualitativa e quantitativa da distribuição das tensões de Von Mises, deformação total e deformação elástica equivalente pelo teste de compressão com uma pressão de 61 MPa máxima na face superior da geometria. Foram utilizados os valores máximos, médios e mínimos que foram fornecidas pelos resultados do modelo para fins de comparações.

4.1. Tensões de Von Mises

Neste primeiro resultado, as tensões se concentraram na porção onde foi fixado o modelo da geometria cilíndrica, em que os maiores valores de tensão encontrados diferiram da ordem de 7% indicando 108,9 MPa e 116,7 MPa, respectivamente para as ligas. No modelo TiM1 as tensões se distribuíram na mesma região do modelo NbM1. A tensão média encontrada foi de 58,6 MPa e 58,2 MPa, respectivamente. Assim, como se esperava no modelo proposto, as tensões médias representam valores praticamente semelhantes e bem próximos de um modelo numérico para escalas em tecidos ósseos com implantes e parafusos, como o modelo do osso cortical no fêmur com parafusos, em que as tensões são da ordem de 50 MPa (HENSCHEL; EBERLE; AUGAT, 2016). A Figura 2 mostra as distribuições de tensões nos modelos TiM1 e NbM1.

Figura 2 – Distribuição de tensões para os modelos Ti-6Al-4V e Ti-20Nb

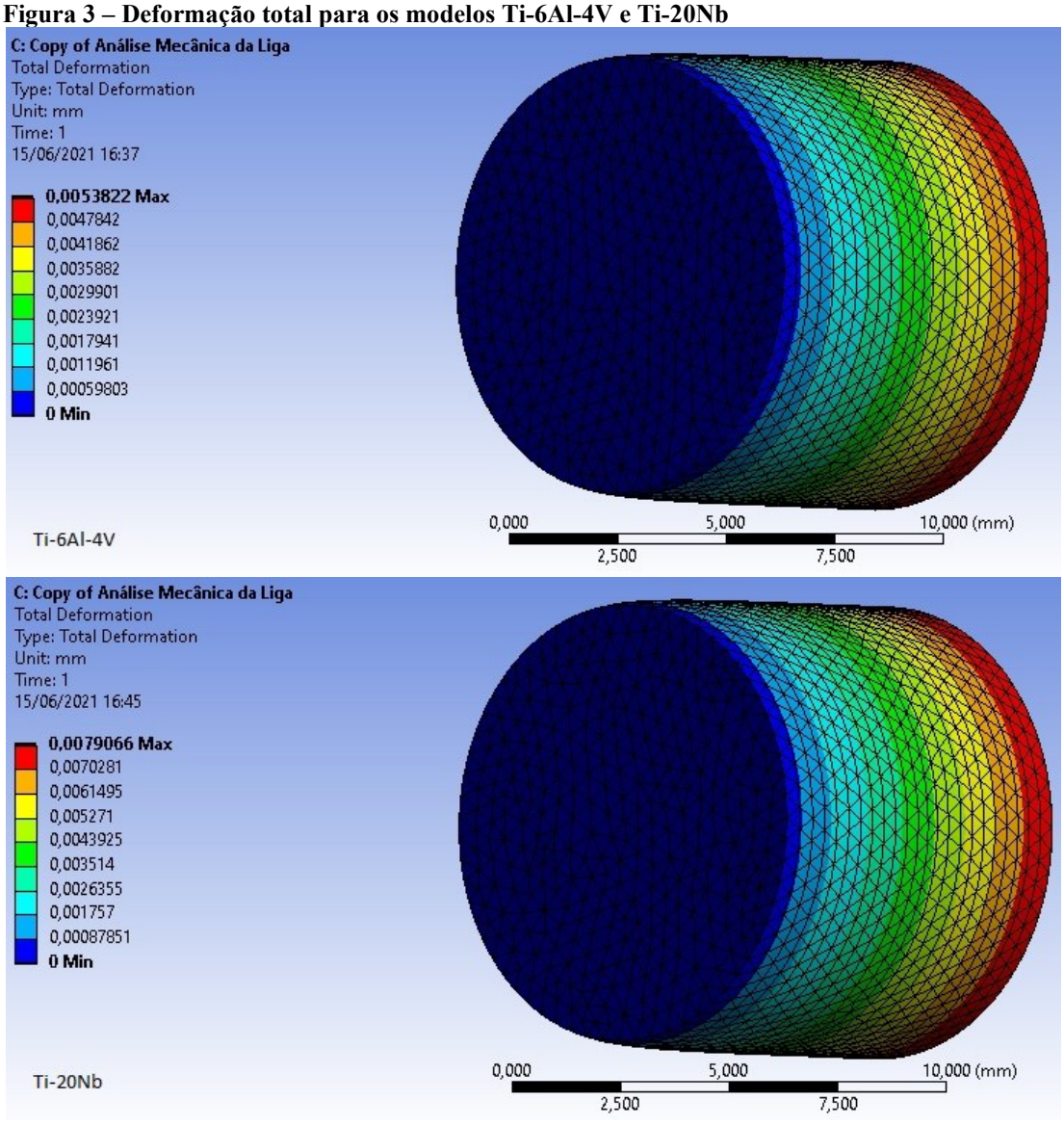


Fonte: Fatec-Stz Ansys (2021)

4.2 Deformação de Von Mises e Deformação Total

Neste segundo resultado as deformações totais se concentraram na porção onde foi aplicada a força compressiva na direção positiva de "y". Os maiores valores para a deformação total encontrados foram de 0,005 mm e 0,008 mm, respectivamente para as ligas. Representando uma diferença da ordem de 60% maior na deformação total para a liga Ti-20Nb As deformações totais médias encontradas foram de 0,003 mm e 0,004 mm, respectivamente, representando uma diferença da ordem de 33,3 % maior na liga de Ti-20Nb, e da ordem de 92%-97,3% menores que a de implantes de quadril de ligas de Ti-6Al-4V com 0,05 a 0,15 mm de deformação total (SPINELLI et. al., 2012). A Figura 3 mostra as distribuições da deformação total nos respectivos modelos Ti-6Al-4V (TiM1) e Ti-20Nb (NbM1). As deformações elásticas equivalentes apresentaram valores bem pequenos para os respectivos modelos, e são apresentadas na Tabela 6.

Figura 3 – Deformação total para os modelos Ti-6Al-4V e Ti-20Nb



Fonte: Fatec-Stz Ansys (2021)

Tabela 6 - Deformações elásticas equivalentes

Liga	Máxima (%)	Média (%)	Mínima (%)
Ti-6Al-V	0,098	0,053	0,023
Ti-20Nb	0,160	0,078	0,023

Fonte: Fatec-Stz Ansys (2021)

5 CONCLUSÃO

Os resultados obtidos através da simulação pelo método dos elementos finitos, utilizando análise estrutural estática e material isotrópico, mesmo para a geometria simples adotada, atendeu aos objetivos centrais do trabalho. Na comparação dos comportamentos mecânicos das ligas, Ti-6Al-4V (mesh TiM1) e Ti-20Nb (mesh NbM1), as tensões se concentraram na região onde a peça simulada foi engastada e os maiores valores de tensão encontrados diferiram da ordem de 7%. As tensões médias encontradas ficaram bem próximas de um modelo numérico para escalas em tecidos ósseos com implantes, o que corrobora que a liga Ti-Nb se mostra promissora para uso em implantes médicos. As deformações totais médias representaram uma diferença da ordem de 33,3 % maior na liga de NbM1, quando comparado ao modelo TiM1, entretanto quando comparados a modelos numéricos de implantes de quadril de ligas de Ti-6Al-4V foram da ordem de 92%-97,3% menores. Os ossos reagem às cargas por remodelamento do tecido, que pode ter caráter construtivo ou destrutivo, de acordo com o estresse mecânico ao qual o osso é submetido. Se o tecido ósseo for sobrecarregado, ou seja, submetido a forças que causam deformações plásticas (produzem lesões internas sem que ocorra fratura), ele reage a essa sobrecarga com rápida e massiva hipertrofia. Assim, um liga que tenha uma boa osteointegração com tecidos ósseos e pequenas deformações tenderá a não lesar as estruturas internas.

REFERÊNCIAS

ANSYS. **Workbench**. Versão 2021 [R1]. Disponível em: https://www.ansys.com/academic/students. Acesso em: 20 maio 2021.

BLACK, J., HASTINGS, G. W. **Handbook of biomaterials properties**. Londres: Chapeman and hall, 1998.

CHEN, Q.; THOUAS, G.A. Metallic implant biomaterials. **Materials Science and Engineering** R: Reports, v 87, p.1-57,2015

CHENG, H. C., SHIHA, Y. H., PENG, P.W., PAN, Y. N., OU, K. L. Biomechanical Research of TiNb Alloys with Electrochemical Treatment Using Finite Element Method. **ECS Transactions**, 13 (7) 1-11, 2008.

DA SILVA, L. M., CLARO, A. P. R. A., BUZALAF, M. A. R., GRANDINI, C. R. "Influence of the Substitutional Solute on the Mechanical Properties of Ti-Nb Birany alloys for biomedical Use." **Materials Research** 15: 355-358, 2012.

FRIÁK, M., COUNTS, W. A., MA, D., SANDER, B., HOLEC, D., RAABE, D., NEUGEBAUER, J. Theory-Guided Materials Design of Multi-Phase Ti-Nb Alloys with Bone-Matching Elastic Properties. **Materials**, 5, 1853-1872, 2012. doi:10.3390/ma5101853

GEETHA, M., A.K. SINGH, R. ASOKAMANI, E A.K. GOGIA. "Ti based biomaterials, the ultimate choice of orthopaedic implants – A review." **Progress in Materials Science**,54, 397-425, 2009.

KOLLNIG, S. Niobium. Plansee 2016. Disponível em: https://www.plansee.com/en/materials/niobium.html. Acesso em: 15 jun. de 2021.

HENSCHEL, J., EBERLE, S., AUGAT, P. Load distribution between cephalic screws in a dual lag screw trochanteric nail**. Journal of Orthopaedic Surgery and Research,** 11:41, 2016. DOI 10.1186/s13018-016-0377-y.

MORENO, J. J. G., PAPAGEORGIOU, D. G., EVANGELAKIS, G. A., LEKKA, C. E. **Journal of Applied Physics**, 124, 245102, 2018; doi: 10.1063/1.5025926

NIKONOV, A. YU., ZHARMUKHAMBETOVA, A. M., SKRIPNYAK, N. V., PONOMAREVA, A. V., ABRIKOSOV, I. A., BARANNIKOVA, S. A., DMITRIEV, A. I. Calculation of mechanical properties of BCC Ti-Nb alloys. **AIP Conference Proceedings** 1683, 020165, 2015. doi: 10.1063/1.4932855.

SANTOS, M. W. dos, VELAY, V., VIDAL, V., BERNHART, G., BATALHA, G. F., MATSUMOTO, H. Mechanical behavior of a Ti-6Al-4 V titanium alloy with microstructural evolution modeling under hot and superplastic conditions. **Mat. -wiss. u. Werkstofftech**. Germany, 48, 1–10, 2017. DOI 10.1002/mawe.201700040.

SPINELLI, L. F., MACEDO, C. A. S., GALIA, C. R., ROSITO, R., SCHNAID, F., CORSO, L. L., ITURRIOZ, I. Femoral stem-bone interface analysis of logical uncemented stem. **Braz. J. Biom. Eng.**, 28(3), 238-247, 2012.