

CENTRO DE ENSEÑANZA TÉCNICA Y SUPERIOR



Colegio de Ingeniería
Dirección de Posgrado
Campus Mexicali

Tesis/Proyecto de Ingeniería e Innovación

**Simulación computacional 3D mediante el método de elementos
finitos para recubrimiento con grafeno a implantes dentales de
Titanio**

para obtener el grado de

Maestro en Ingeniería e Innovación

Presenta:

Eduardo Emmanuel Camacho Guillen

Comité evaluador:

Director de tesis: Dr. Abiud Flores Valentín

Co-director de tesis: Dra. Verónica Rojas Mendizábal

Mexicali, Baja California. 11 de Junio del 2020

Agradecimientos y dedicatorias.

En este pequeño espacio me gustaría agradecer a todas las personas involucradas en mi vida, que de cierta manera me dieron su apoyo y soporte, para poder concluir mi maestría.

Doy gracias a mi familia, por estar a mi lado, sin importar condición alguna, siempre estarán a mi lado ayudándome y apoyándome. Quiero dar gracias especialmente a mi madre Violeta y a mi tío Vicente, que son un ejemplo inspirador para seguir, y de apoyo incondicional, con el cual estaré eternamente agradecidos.

Doy gracias a mis amigos, los cuales siempre estuvieron a mi lado, para sacar lo mejor de mí, apoyándome a no rendirme, sin duda son mi segunda familia, que valoro y aprecio mucho. También quiero dar gracias a mi novia, por estar a mi lado día con día, apoyándome a no rendirme y a convertirme en una mejor persona.

Doy gracias a la universidad CETYS y a todos los profesores con los que tome clases, a mi tutor Abiud Flores, ya que sin ellos esto no fuera posible, doy gracias porque son un ejemplo para Mexico, transmitiendo, guiando y formando estudiantes día con día, ante cualquier adversidad.

Doy gracias al CONACYT, por haberme ayudado otorgándome una beca nacional monetaria, durante todo mi periodo de maestría con mi CVU 941498, con la cual me ayudo a solventar los gastos académicos.

Por último, sin embargo, no menos importante, doy gracias a la empresa Rheem, quien me ha ayudado desde que entre a mi maestría, es especial a mi supervisor, quien ha estado sacando día con día el potencial que llevo dentro y poniéndolo a prueba, con el fin de ser mejor cada día.



Mexicali B.C, 2 de Junio de 2020

Dra. Verónica Rojas Mendizábal
CETYS Universidad

Estimado Dra. Rojas, anteponiendo un cordial saludo me permito informarle que el alumno EDUARDO EMMANUEL CAMACHO GUILLEN perteneciente a la Maestría en Ingeniería e Innovación desarrolló el proyecto titulado “SIMULACIÓN COMPUTACIONAL 3D MEDIANTE EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS PARA RECUBRIMIENTO CON GRAFENO A IMPLANTES DENTALES DE TITANIO” de manera exitosa en Cetys Universidad.

Sirva la presente como evidencia para los fines académicos del Posgrado en Ingeniería de CETYS Universidad, campus Mexicali.

Atentamente

Dra. Karla Garduño Palomino
Coordinadora de Posgrado de Ingeniería
Cetys Universidad Campus Mexicali

índice

Capítulo 1: Introducción	8
1.1 Antecedentes	8
1.2 Justificación.....	10
1.3 Planteamiento de la investigación	15
1.4 Preguntas de investigación	16
1.5 Objetivos.	17
1.6 Hipótesis:	17
Capítulo 2: Marco teórico y referencial	17
2.1 Implante dental:.....	18
2.2 Materiales biocompatibles:.....	18
2.3 Grafeno:	18
2.4 Titanio:	20
2.5 Caracterización mecánica para biomateriales (para implantes dentales):	21
2.6 Deposición del grafeno en implantes dentales de titanio:	21
2.6.1 Deposición química por vapor (CVD):	24
2.6.2 Procesamiento térmico rápido (RTA):	25
2.6.3 Polvo en aerosol (Powder spray):	26
2.6.4 Deposición electroforética (EPD):	26
2.6.5 Recubrimiento por inmersión/capilaridad (Dip Coating):	27
2.6.6 Recubrimiento por centrifugación (Spin Coating):	28
2.6.7 Deposición por goteo (Drop casting):	29
2.6.8 Deposición por cepillado (Brushing):	30
2.7 Análisis de elementos finitos.	30
Capítulo 3: Metodología	33

Etapa 1 – Modelado 3D del implante:	33
Etapa 2 – Mallado:	35
Etapa 3 – Asignar materiales y propiedades físicas:.....	35
Etapa 4 – Crear las condiciones de frontera:	35
Etapa 5 – Crear las condiciones de carga:.....	36
Capítulo 4: Resultados.	36
Capítulo 5: Conclusión y recomendaciones.....	43
Referencias	44

Listado de figuras

Figura 1.1.1 Representación del injerto de implantes	9
Figura 1.1.2 Representación de la osteointegración	10
Figura 1.2.1 Tendencia creciente de la investigación de materiales de implantes dentales para evitar la enfermedad de peri implantitis	13
Figura 1.2.2 Tendencia de patentes con la búsqueda de “Graphene dental Implant” como palabras clave	14
Figura 1.2.3 El grafeno como nueva estrategia para diseñar y manipular implantes dentales y regeneración de tejidos	14
Figura 2.3.1 Varios métodos utilizados para fabricar grafeno	20
Figura 2.6.1. Diagrama esquemático del método de CVD	25
Figura 2.6.2. Diagrama esquemático del método de RTA	25
Figura 2.6.3 Diagrama esquemático del método de aerosol Recuperado	26
Figura 2.6.4 Deposición electroforética	27
Figura 2.6.5 Diagrama esquemático del método de deposición por inmersión	28
Figura 2.6.6 Diagrama esquemático del método de rotación	29

Figura 2.6.7 Diagrama esquemático del método de deposición por goteo	29
Figura 2.6.8 Diagrama esquemático del método de deposición por cepillado	30
Figura 2.7.1 Etapas típicas del análisis de elementos finitos	32
Figura 3.1.1 Representación conceptual del proceso metodológico de la presente investigación	33
Figura 4.1.1 Modelo 3D de implante original	37
Figura 4.2.1 Dar color azul al nuevo modelo de recubrimiento y visualización	37
Figura 4.3.1 Guardado del nuevo modelo de recubrimiento	38
Figura 4.4.1 Concentricidad entre ambos modelos	38
Figura 4.5.1 Mallado del modelo del recubrimiento	38
Figura 4.6.1 Restricciones del modelo final imagen	39
Figura 4.7.1 Grafica de desplazamiento del implante de titanio	40
Figura 4.8.1 Gráfica de desplazamiento del implante recubierto con grafeno	40
Figura 4.9.1 Gráfica con los valores máximos y mínimos del análisis de desplazamiento	41
Figura 4.10.1 Gráfica de estrés por distribución de Von Mises del titanio	41
Figura 4.11.1 Gráfica de estrés por distribución de Von Mises del grafeno	42
Figura 4.12.1 Gráfica de máximos y mínimos del análisis de estrés mecánico por el método de Von Mises	42

Listado de tablas

Tabla 1.3.1 Pacientes con fracaso del implante dental según causa y localización	16
Tabla 2.6.1 Métodos de deposición del grafeno en el implante dental	24
Tabla 4.1.1 Propiedades mecánicas de los materiales simulado.	39

Resumen

En cualquier parte del mundo existe la necesidad de reemplazar un diente perdido por algún implante sustituto, el cual pueda ser duradero en el tiempo y confiable en uso, es por ello que en esta investigación se centra en mejorar estas dos características mencionadas, mediante el uso de nuevas tecnologías de materiales, específicamente en el uso del grafeno como material auxiliar del titanio, el cual es el material más común para los implantes dentales, con el fin de llevar a cabo un mayor nivel de osteointegración del implante dental con el paciente. De hecho, el grafeno junto con resinas se está empezando a implementar en prótesis dentales en base a CAD/CAM, sin embargo, aún está en investigación para implementarse en implantes de titanio dentales, por eso el objetivo de esta investigación es ayudar aportando datos sobre que métodos utilizar para que el grafeno pueda ser recubierto en implantes dentales, por otro lado la focalización de la investigación se basa en realizar una simulación computacional de elementos finitos en 3D, para corroborar la propuesta e hipótesis de que al usar un recubrimiento de grafeno sobre el implante comercial de titanio, la resistencia mecánica del implante de titanio incrementa, esto con el objetivo de que el implante tenga un nivel mayor de osteointegración y aceptación por los tejidos del paciente.

Capítulo 1: Introducción

1.1 Antecedentes

Los implantes dentales tienen razón de uso desde los años 60's con el objetivo de la sustitución de dientes; Esta pérdida de dientes puede darse debido a diversos factores, como el padecer de alguna enfermedad periodontal o traumatismo bucodental (el cual se debe a lesiones en los dientes, la boca y la cavidad bucal). Aproximadamente un 20% de las personas sufren traumatismos dentales en algún momento de su vida; o también pudiera ser porque no se lleva un cuidado bucal adecuado, tener una mala alimentación basadas en azúcares, o tener hábitos perjudiciales como el de fumar tabaco o consumir mucho café. Según la Organización Mundial de la Salud (OMS, 2020) se estima que las periodontopatías graves afectan a casi el 10% de la población mundial, sus principales causas son la mala higiene bucodental y el consumo de tabaco (Organización mundial de la salud, 2020).

Tal situación pone en riesgo la salud bucal de las personas, y es por eso por lo que doctores dentistas han dedicado su vida profesional a encontrar diferentes soluciones o sustituciones dentales tales como implantes o prótesis, Por lo cual, para fines de esta investigación, se enfocara de sustituciones dentales, mediante implantes comerciales de titanio, tal que, Paulina et al. (2016) menciona que 1982, el cirujano ortopédico sueco Per-Ingvar Brånemark (1929 - 2014), presentó su trabajo que había comenzado 13 años antes en Gotemburgo. En donde su descubrimiento se basa en la aplicación de la osteointegración, o la fusión biológica del hueso a un material extraño, esto era incomparable y sobresaliente en la comunidad científica de la implantología. Esto trajo consigo un amplio reconocimiento a los métodos de implantes Brånemark y materiales, y es uno de los avances científicos más importantes en la odontología desde finales de 1970. Se presume que su equipo y el hallaron la manera de implantar una estructura de titanio en los fémures de conejos, estos no se podían separar del hueso, claro después de haber pasado el tiempo cicatrización.

Los implantes de titanio se definen de acuerdo con Paulina et al. (2016) como implantes osteointegrados, que tiene la finalidad de colocar un material artificial en los huesos

maxilares para reponer los dientes perdidos, mediante la correcta unión estructural y funcional del material artificial con el hueso, y colocar la corona dental atornillada a este implante, en la figura 1.1.1 se representa el injerto del implante. En relación, Wang, C., Yan, J., et al. (2018) nos dice que las aleaciones de titanio son uno de los metales biomédicos más importantes ampliamente utilizados en implantes debido a su alta resistencia mecánica, tenacidad a la fractura y resistencia a la corrosión y su excelente biocompatibilidad como huesos y articulaciones artificiales, así como placas, tornillos y materiales sustitutos para otros tejidos duros. A pesar de que Las aleaciones de titanio se han utilizado en clínicas durante más de 40 años, todavía hay fallas que deben resolverse como propiedades mecánicas y biológicas, ya que esto es la clave para un implante exitoso es la fuerza de fijación inicial y osteointegración a largo plazo de la interfaz implante-hueso.



Figura 1.1.1 Representación del injerto de implantes. Dr. Gonzalo Navarro. (2018) *Implantes dentales: tipos y clasificación*. Recuperado de www.dentalnavarro.com

De acuerdo con Wang, C., Yan, J., et al. (2018), estas aleaciones de titanio se oxidan fácilmente, es decir se desarrolla una película densa y fuerte de óxido de titanio TiO_2 sobre la superficie, la cual proporciona un sustrato fundamental con una fuerte resistencia a la corrosión. Pero la capa oxidada de la aleación de titanio es una película biológicamente inerte que dificulta la interacción directa del implante con los tejidos óseos, que puede fallar debido a una integración insuficiente en el hueso. Dentro del análisis de implantes dentales, y su principal problemática de oxidación. Cabe destacar que Park et al. (2017) menciona que incluso con un tratamiento de implante completamente exitoso, los pacientes experimentan dificultad masticatoria durante el período de osteointegración de 3 a 6 meses. En la figura 1.1.2 se aprecia la

representación de cómo se va formando la osteointegración, cuando el implante de titanio ya está perforado en el hueso maxilar.

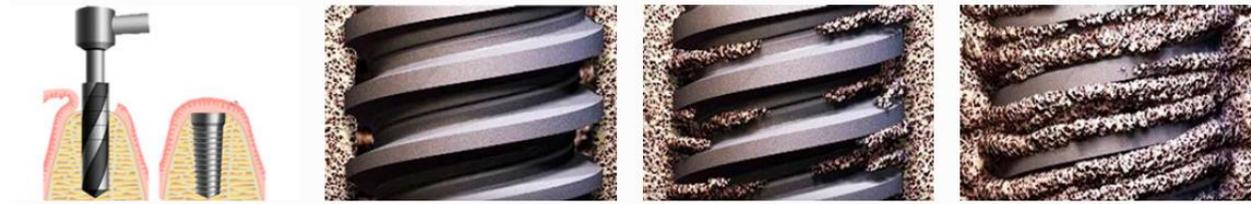


Figura 1.1.2 Representación de la osteointegración. Dr. Jose L. Molina. (2018). Carga Inmediata Sobre Implantes Dentales. Recuperado de www.maxilofacialesimplantes.com.

Los implantes dentales óseo-integrados permiten reemplazar dientes ausentes sin la necesidad de tocar los pilares vecinos, y ofrecen como ventaja adicional que el tejido óseo que recibe una fijación no colapsa en los tres planos del espacio, sobre todo en el vestíbulo-palatino, por lo que el sostén de las estructuras duras y blandas se mantiene a distancia, lo que garantiza así una arquitectura preservable de la zona. A esto se le suma el hecho de que como no se desgastan los dientes vecinos la aparición de caries secundaria es más remota, y los compromisos pulpares de un pilar tallado, no existen (Joubert R., 2016). No a cualquier paciente se le pueden poner implantes dentales. Es importante considerar que todo paciente que pretenda colocarse implantes dentales debe tener maxilares y mandíbula sanos con un hueso bastante fuerte, ya que los implantes se integrarán a estos huesos. En caso de que esto no sea así, lo más recomendable es que el cirujano dentista le informe al paciente que es posible y necesario que se someta, previamente, a un tratamiento de restauración de hueso mandibular. El riesgo real con los implantes dentales es que no se integren con la fuerza suficiente para soportar las fuerzas a que los somete la masticación (Bernal, J., 2016).

1.2 Justificación

En la historia de la implantología bucal se han empleado diversos materiales para reemplazar los dientes faltantes. Esto con la razón de ir modificando las superficies de los implantes dentales mediante distintos métodos y materiales, esto ha incrementado el área de superficie, modificando la energía superficial para favorecer la humectación y

adsorción de las proteínas, esto se ha realizado para favorecer el proceso de osteointegración (Basáñez E., 2009).

Los principales métodos de acuerdo con Park (2017), para aumentar la cantidad y calidad de la osteointegración entre el implante y los tejidos óseos, se pueden dividir en métodos físicos y químicos. Primero, el método físico incrementa el área de contacto del implante al aumentar la rugosidad. En segundo lugar, un método químico implica la adición de otros materiales para aumentar la reactividad del implante de titanio. Lo cual aumenta la reactividad del implante de titanio al elevar la rugosidad de la superficie al nivel nanométrico, lo que resulta en un mayor potencial para la regeneración ósea, los efectos antibacterianos. Por lo que sabemos que “El riesgo real con los implantes dentales es que no se integren con la fuerza suficiente para soportar las fuerzas a que los somete la masticación. Sin embargo, esto no ocurre comúnmente, ya que las técnicas de colocación de implantes se han mejorado y simplificado considerablemente en los últimos años, lo que se ha traducido en un porcentaje de éxito de un 98% (Bernal, J., 2016).

No obstante, uno de los problemas más frecuentes en implantología bucal es la movilidad del tornillo de sujeción que conlleva a la movilidad de la restauración, lo que incrementa el riesgo de fractura del tornillo, así como de la pérdida de la osteointegración del implante. La aplicación de un correcto torque al tornillo de sujeción se traduce en una precarga que mantiene los componentes unidos, por el contrario, un mal ajuste resulta en vibración y micro movimientos durante la carga funcional, que permite movimientos del tornillo de sujeción y del aditamento, lo que podría generar fatiga del metal y producir que se deforme el implante, llevando a la fractura de este (Osorio J., 2016). En términos generales podemos acordar que la pérdida de un implante, puede presentarse desde que se instala o días después de su osteointegración, en esta última un fallo mecánico por sobrecarga o una infección es la causa más común.

Para evitar fallos mecánicos en el implante dental y poder mejorar la compatibilidad entre en la paciente y el implante dental, se presume que el recubrimiento de grafeno puede llegar a solucionarlo. El grafeno (Gr) lleva detrás un premio nobel en física en el año 2010, a sus investigadores Andre Geim y Kostya Novoselov, de acuerdo con Nobel prize

(2010). Los materiales a base de grafeno ha sido un gran tema de interés en el desarrollo de recubrimientos nuevos y avanzados debido a su excelente resistencia química, impermeabilidad gaseosa, capacidad de adsorción, propiedades antibacterianas, resistencia mecánica, lubricidad y estabilidad térmica. Este material es un alótropo de carbono, tiene propiedades únicas atribuidas principalmente a su estructura reticular hexagonal 2D. Como material atómicamente delgado, el Gr exhibe simultáneamente un nivel extremadamente alto de conductividad térmica (superior a $3,000\text{WmK}^{-1}$), conductividad eléctrica ($2.5 \times 10^5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$), junto con excelente resistencia mecánica, con un módulo de Young de 1 TPa y resistencia intrínseca de 130GPa (Nine et al., 2015).

En definitiva, para llegar a tener una buena osteointegración, Sunho Park et al. (2017) sugieren tener en cuenta los siguientes seis factores:

1. La biocompatibilidad del implante
2. El diseño del implante
3. La condición de la superficie
4. La ubicación
5. Los métodos quirúrgicos
6. El control de peso postoperatorio.

Bajo estas condiciones, muchos casos clínicos dentales han reportado resultados satisfactorios, con la restauración en poco tiempo. De acuerdo con Gerardo Asensio (2019) se ha realizado un gran esfuerzo por parte de la industria y las instituciones de investigación para proporcionar una solución definitiva. En este sentido, se ha publicado un número creciente de publicaciones y desarrollos técnicos que reclaman nuevas alternativas que combinan la capacidad de prevenir la adhesión bacteriana y la formación de biopelículas con la capacidad de osteointegración y el desarrollo del sello biológico. En la figura 1.2.1 se puede observar la tendencia creciente de las investigaciones de materiales en implantes dentales para evitar la enfermedad de peri implantitis.

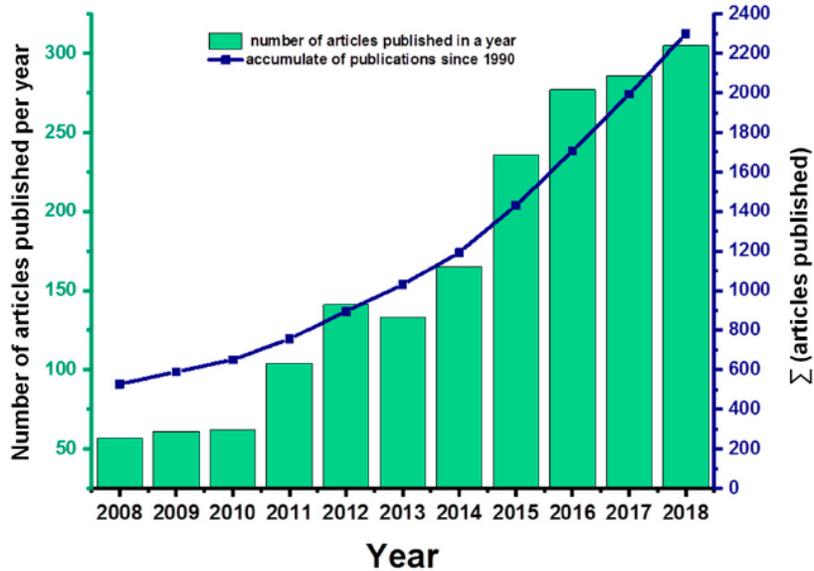


Figura 1.2.1 Tendencia creciente de la investigación de materiales de implantes dentales para evitar la enfermedad de peri implantitis. Gerardo Asensio et al. (2019) Achievements in the Topographic Design of Commercial Titanium Dental Implants: Towards.

Para complementar los datos de la gráfica de la figura 1.2.1, se realiza una investigación en tres bases de datos de patentes alrededor del mundo, con el objetivo de entender como el material grafeno ha sido mencionado en la implantología dental en la sociedad odontológica, se realiza la investigación usando las palabras clave “Graphene Dental Implant”. Graficando el resultado, podemos ver en la figura 1.2.2, en donde a pesar del decremento diferencial que se aprecia entre 2018 y 2019, la tendencia exponencial es positiva. A continuación, se nombran las tres bases de patentes que se utilizaron.

Base de datos:

1. Pantentscope WIPO
2. USPTO
3. Espacenet

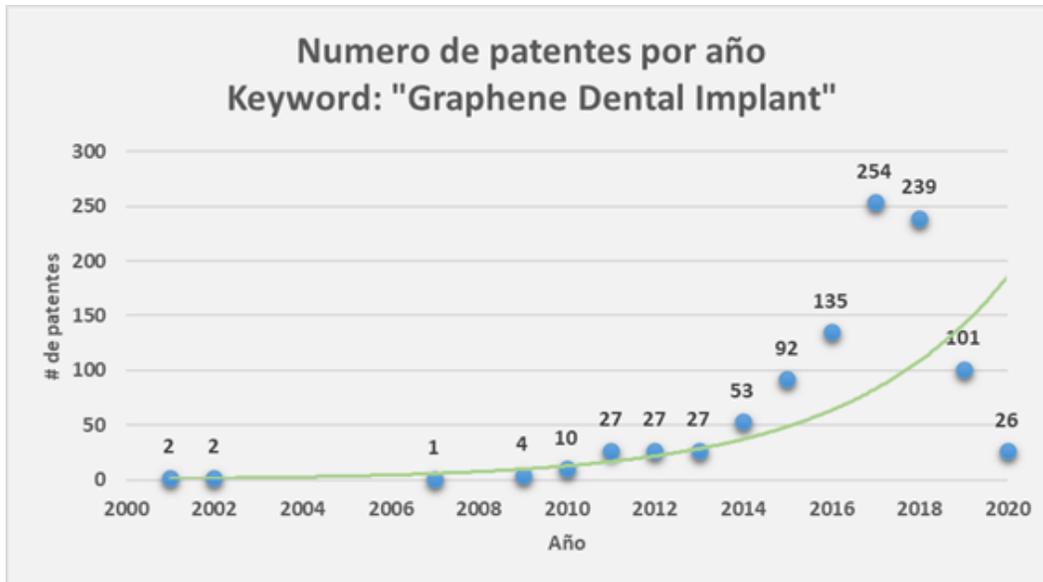


Figura 1.2.2 Tendencia de patentes con la búsqueda de "Graphene dental Implant" como palabras clave [Gráfica propia]

Los diferentes tratamientos de la superficie de titanio pueden modificar el comportamiento fisicoquímico y las propiedades microestructurales del implante que a su vez pueden afectar los procesos de formación ósea: arenado, grabado ácido, deposición física o química de vapor, anodización por chispa, oxidación, tratamientos con láser, entre otros. Los tratamientos más comúnmente aplicados son el arenado (sandblasting), combinado con grabado de ácido y procesos de oxidación mediante tratamientos electroquímicos. En la figura 1.2.3 se hace referencia al grafeno como una nueva estrategia de material en la ayuda de la restauración de tejidos en implantes dentales.



Figura 1.2.3 El grafeno como nueva estrategia para diseñar y manipular implantes dentales y regeneración de tejidos. Chan Park et al. (2017). *Graphene as an Enabling Strategy for Dental Implant and Tissue Regeneration*.

Es importante destacar que los nanomateriales a base de grafeno, especialmente GO, se utilizan como andamios en la ingeniería de tejidos para apoyar la unión celular, la proliferación y la diferenciación, y se han llevado a cabo numerosos estudios de células madre para explorar estas propiedades (Di Carlo, Brauner, et al., 2019). En una investigación del efecto de las membranas de colágeno recubiertas con GO en las DPSC (células madre de pulpa dental) se tiene como resultado que las membranas recubiertas de GO promueven una mayor proliferación de la diferenciación de DPSC en odontoblastos /osteoblastos y, al mismo tiempo, pueden controlar la aparición de eventos inflamatorios (Radunovic, De Colli, et al., 2017).

En otro estudio se determina si las membranas de titanio GO (GO-Ti) en diferentes concentraciones (10, 100, 1000 mg / ml) pudieron mejorar la osteogénesis de los pre-osteoblastos MC3T3-E1 y promover la formación de hueso nuevo. Los autores señalaron que las membranas GO-Ti estimulaban significativamente la actividad de la fosfatasa alcalina (ALP), las membranas GO-Ti también se usaron en el procedimiento de regeneración ósea guiada (GBR) para el tratamiento de defectos óseos de ratas y se observó que las membranas GO-Ti han conducido a una mejor regeneración ósea en comparación con el grupo control (membranas de titanio) (Keun Oh Park, Jong Ho Lee. et al., 2016). En otro aspecto, se hicieron cultivos de fibroblastos gingivales humanos (hGF), células madre derivadas de tejido adiposo humano (hASC) y células madre mesenquimales de médula ósea humana (hBMMSC) en muestras de grafeno. Este estudio fue realizado in vitro e in vivo, para determinar los efectos del recubrimiento de grafeno sobre el implante de titanio sobre la adhesión, la proliferación y la diferenciación osteogénica en donde se observó que el grafeno provocó un aumento en la adhesión de hASC y hBMMSC al sustrato, por lo que el recubrimiento de grafeno sobre sustratos de Ti podría mejorar la interacción entre el material y el tejido blando circundante (Gu, Lv, Du, Niu, et al., 2018).

1.3 Planteamiento de la investigación

El presente estudio de investigación enfoca el problema principal de los implantes dentales la ausencia de la osteointegración, seguido de la pérdida de la osteointegración,

y en tercer lugar problemas del tipo mecánico, debido a que el implante de titanio comercial sufre deformaciones mecánicas, ocasionando la necesidad de tener que cambiarlo por uno nuevo, esto de acuerdo con Carpio Marcia, Espinosa Yanelkis et al. (2015), quienes realizaron un estudio con 97 pacientes, en donde se puede observar en la tabla 1.3.1 los porcentajes con los pacientes que tuvieron un fracaso del implante dental según su causa.

Causa	Localización en el maxilar				Total	
	Maxilar superior		Mandíbula			
	No.	%*	No.	%*	No.	%
Ausencia de osteointegración	34	35,0	18	18,5	52	53,7
Pérdida de la osteointegración	17	17,5	10	10,3	27	27,8
Tipo mecánico	11	28,3	7	7,2	18	18,5
Total	62	63,9	35	36,1	97	100,0

* Porcentajes calculados sobre la base del total de pacientes

Tabla 1.3.1 Pacientes con fracaso del implante dental según causa y localización. Dra. Marcia Hortensia Corona Carpio, I Dra. Yanelkis Hernández Espinosa et al. (2015). Principales factores causales del fracaso de los implantes dentales, recuperado de <http://scielo.sld.cu/>.

Las fallas de los implantes dentales generalmente se deben a problemas biomecánicos y biológicos. De acuerdo con las estadísticas encontradas en los diferentes artículos dentales, el problema de los implantes dentales tiene un rango de falla entre el 5% y el 11%, ya que no logran un grado satisfactorio de osteointegración en el hueso maxilofacial, lo que lleva a la falla del implante y la alteración de la función oral. Lo cual implica un daño físico y económico para el paciente y el especialista.

La presente investigación tiene el fin de encontrar diferencias mecánicas, entre un implante dental comercial de titanio grado 4, contra un implante del mismo material, pero recubierto con grafeno, y compararlos mediante un análisis de elementos finitos, simulado por computadora.

1.4 Preguntas de investigación

- ¿Qué efecto mecánico se obtiene de simular el recubrimiento de grafeno, sobre el implante dental de titanio?

- ¿Cuáles son las diferencias de deformación elástica entre un implante dental de titanio recubierto de grafeno y no recubierto?

1.5 Objetivos.

Objetivo General:

Analizar mecánicamente el comportamiento de desplazamiento nodal y deformación elástica del grafeno mediante simulación computacional por el método de elementos finito, al ser implementado como recubrimiento en el implante dental de titanio.

Objetivos específicos:

- Diseñar el modelo 3D del implante de titanio recubierto con grafeno.
- Simular mediante software computacional y el método de elementos finitos el modelo del implante dental recubierto con grafeno y el no recubierto.
- Analizar los resultados de la simulación para observar diferencias entre ambos modelos descritos.

1.6 Hipótesis:

H1: El recubrimiento de grafeno en el implante dental de titanio, incrementara la resistencia mecánica del implante original de titanio puro.

H2: Existe una diferencia porcentual positiva en el resultado de estrés mecánico, entre el implante dental recubierto y el no recubierto.

Capítulo 2: Marco teórico y referencial

A continuación, se detallarán los principales temas que soportan a la investigación, esto ayudara a entender mejor como se desarrollara en el siguiente capítulo la metodología para resolver la propuesta de investigación.

2.1 Implante dental:

Se define de acuerdo con Kelekis-Cholakakis A., Atout R. et al. (2018) como: implante endóseo en forma de raíz: un implante colocado en el proceso alveolar y / o hueso basal que deriva su soporte de una longitud vertical del hueso y soporta una prótesis u otros dispositivos. Más comúnmente hecho de titanio, puede ser cilíndrico, cónico.

De acuerdo con la Revista Española Odontoestomatológica de Implantes (2018, Vol.22). Los implantes dentales constituyen la opción terapéutica más predecible en la reposición total o parcial de dientes ausentes, sin embargo, pueden existir factores inherentes al paciente, a los implantes o a la técnica quirúrgica que pueden incrementar el riesgo de fracaso del tratamiento implantológico y que se deben de tener en consideración.

2.2 Materiales biocompatibles:

Por definición, Denitsa D. Kiradzhyska (2019), no dice que el biomaterial es cualquier sustancia (que no sea un medicamento) o una combinación de sustancias, naturales o sintéticas, que puede usarse durante un período de tiempo, independientemente o como parte de un sistema que trata, aumenta o reemplaza cualquier tejido, órgano o función del cuerpo. Todos los materiales utilizados para la fabricación de implantes deben exhibir una serie de propiedades que no cambian después de un largo período de contacto con el entorno biológico. Esto significa que el material o sus productos no causan muerte celular, inflamación crónica o daño de las funciones de las células.

También son esenciales una serie de propiedades mecánicas, como resistencia a la tracción, dureza, elasticidad, densidad adecuada, resistencia al desgaste, etc. Estos parámetros corresponden a la función que el implante cumplirá en el organismo. Y según su naturaleza, los biomateriales se pueden clasificar como polímeros, materiales cerámicos, metales y compuestos.

2.3 Grafeno:

Según Artur D. Moreira (2017). El grafeno es la estructura elemental del grafito, que es una lámina gruesa de un átomo de carbono, compuesta de átomos de carbono sp^2

dispuestos en una estructura de panal plana. En esta hoja, cada átomo de carbono se une a otros tres que se colocan a 120° uno del otro, con una distancia interatómica de 1.42 \AA y una distancia de centro a centro de 2.46 \AA . Debido a sus características únicas, el grafeno tiene propiedades electrónicas, mecánicas, ópticas y térmicas sin igual. junto con una excelente resistencia mecánica (módulo de Young de 1 TPa y resistencia intrínseca de 130 GPa . De acuerdo con Di Carlo Stefano (2019). El grano también es un material extremadamente ligero, con una densidad de solo 2.26 g / cm^3 , y tiene una buena conductividad eléctrica y térmica (aproximadamente $5000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$), alta movilidad intrínseca ($200\,000 \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1}\text{s}^{-1}$) y una buena transparencia óptica con una transmitancia de aproximadamente 97.7% .

En la figura 2.3.1 podemos ver varios métodos para fabricar grafeno; El grafeno puede sintetizarse mediante dos enfoques: de arriba hacia abajo y de abajo hacia arriba. El enfoque de arriba hacia abajo consiste en la producción de grafeno por separación, pelado, escisión o exfoliación mecánica, electroquímica, a base de solvente de grafito o sus derivados. El enfoque abajo hacia arriba, en cambio, incluye técnicas estándar como la deposición química de vapor (CVD), pirólisis, síntesis química, descarga de arco, descompresión de CNT, solvotermia, crecimiento epitaxial y síntesis asistida eléctricamente (Chengzhu Liao, Yuchao Li, Sie Chin Tjong. 2018).

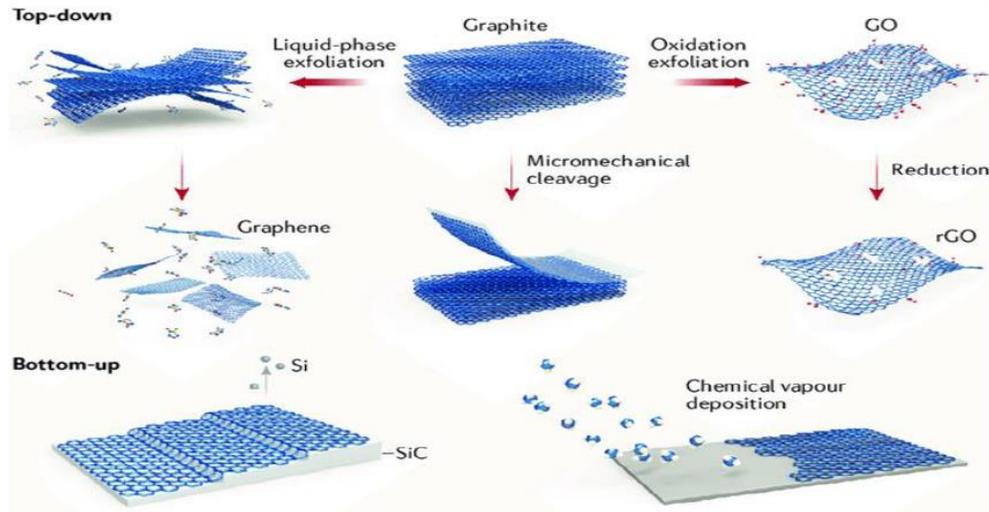


Figura 2.3.1 Varios métodos utilizados para fabricar grafeno. Wang, X. Y., Narita, A., & Müllen, K. (2017). Precision synthesis versus bulk-scale fabrication of graphenes. *Nature Reviews Chemistry*.

2.4 Titanio:

Alina Pruna et al. (2017) no indica que el estándar de oro en implantología es el titanio (Ti), que tiene el registro más largo rastreable de rendimiento clínico predecible. Las altas tasas de éxito de los implantes de Ti se atribuyen principalmente a una capa de óxido nativo (espesor de 3 a 10 nm) formada en la superficie que es notablemente resistente a la corrosión y es biocompatible.

Por otro lado, la modificación de la superficie con un recubrimiento se convirtió en un enfoque popular para mejorar la formación de hueso nuevo y dificultar las reacciones inflamatorias adversas. Además, generalmente se prefiere un recubrimiento bioactivo en la superficie del implante sobre la posible administración sistémica de agentes o fármacos de curación ósea adicionales debido al efecto local que tiene un recubrimiento sobre la curación ósea directamente en el sitio de implantación y la cantidad significativamente disminuida del agente activo requiere.

2.5 Caracterización mecánica para biomateriales (para implantes dentales):

De acuerdo con Pablo Moreno-Garibaldi et al. (2017) Cuando se aplica la mayor fuerza de mordida por los músculos de cierre de la boca. La fuerza promedio ejercida según lo que diferentes investigaciones han delimitado, se encuentra en el rango de 114 N (11.62 Kgf) en niños con dentición mixta y mordida cruzada, hasta valores promedio de 727 N (74.15 Kgf) en hombres adultos sanos, y aunque existen otros autores que reportan una fuerza de mordida promedio de 1024 N en hombres adultos jóvenes con dentición natural completa (n=56), estos cuentan con una desviación estándar de 410 N, por lo que la primera referencia (727 N) se encuentra en este rango de valores

2.6 Deposición del grafeno en implantes dentales de titanio:

Un recubrimiento se puede definir como una capa de material que cubre la superficie de un material a granel para lograr propiedades específicas. Los recubrimientos de ingeniería sintéticos o modernos se aplican típicamente con fines decorativos o funcionales o una combinación de ambos. El objetivo principal de los recubrimientos funcionales en la lucha contra la corrosión, el ensuciamiento, el desgaste mecánico, los microorganismos y el medio ambiente son los objetivos de protección de superficies. De acuerdo con Alina Pruna et al. (2017), describe que se espera que las superficies de los implantes mejoren el crecimiento de las células vivas y al mismo tiempo inhiban las bacterias. Aunque la regeneración del periodonto generalmente no se tiene en cuenta en una inserción directa del implante en el hueso alveolar para lograr la osteointegración, las propiedades biológicas de los sustitutos óseos son esenciales para la función osteoconductiva, ya que afectan el desarrollo de los eventos celulares hacia la regeneración periodontal exitosa. En los implantes dentales se pueden usar recubrimientos protectores, para inhibir el proceso de corrosión, y aislar el metal del medio ambiente que lo rodea, como, por ejemplo, el de los fluidos corporales. Se espera que las superficies de los implantes mejoren el crecimiento de las células vivas y al mismo tiempo inhiban las bacterias con el recubrimiento de grafeno. Aunque la regeneración del periodonto generalmente no se tiene en cuenta en una inserción directa del implante en el hueso alveolar para lograr la osteointegración, las propiedades biológicas de los sustitutos

óseos son esenciales para la función osteo conductiva, ya que afectan el desarrollo de los eventos celulares hacia la regeneración periodontal exitosa. Uno de los métodos más utilizados para modificar las propiedades de la superficie del implante está representado por el aumento de la rugosidad de la superficie (mediante técnicas que incluyen métodos mecánicos (granallado), químicos (grabado ácido o alcalino), electroquímicos (anodización) y físicos (pulverización de plasma) que conduce a un aumento en el área de superficie que finalmente resulta en la diferenciación de osteoblastos.

Estos diferentes tratamientos de la superficie de titanio pueden modificar el comportamiento fisicoquímico y las propiedades microestructurales del implante que a su vez pueden afectar los procesos de formación ósea. Los tratamientos más comúnmente aplicados son el arenado (sandblasting), combinado con grabado de ácido y procesos de oxidación mediante tratamientos electroquímicos (Asensio, G., Vázquez-Lasa, et al., 2019)

El diseño, la síntesis, la caracterización y la aplicación de nanomateriales, en este caso el grafeno, enfrentaron un enorme avance como biomateriales en las últimas décadas, lo que condujo al descubrimiento de nuevas terapias y dispositivos, para tratamientos y diagnósticos de enfermedades, gracias a su química ajustable y excelentes propiedades mecánicas, tribológicas y de corrosión (Pruna et al., 2017).

Con el fin de aportar otro soporte más al grafeno, se hace alusión a la reciente patente en India, WO/2020/021560 (2020), que lleva por título “Surface modification of titanium by incorporation of carbon on surface and within for its dental, medical and other applications” donde explica que el material preparado por la técnica patentada es hidrófilo y más áspero, por lo tanto, más biocompatible para la osteointegración en aplicaciones dentales, ortopédicas y de otro tipo; En donde se concluyó que la humectabilidad de las superficie mejora, siendo esto favorable para mejorar la adsorción de líquido y proteínas en la superficie y las células para unir, extender, proliferar y colocar la adhesión de hueso / tejido en la superficie del implante.

A continuación, se enlistan los métodos más comunes de recubrimiento de grafeno en la tabla 2, explicando en un breve concepto como se logra depositarlo en el metal del

implante, estos métodos se muestran categorizados de acuerdo con dos tipos de procesos, el “wet”, que se refiere a húmedo o mojado, y ‘dry” que se refiere a seco.

Categoría	Método	Concepto
Seco	CVD (Chemical vapor deposition)	Los gases metano (CH ₄) o acetileno (C ₂ H ₂) son los precursores con los gases de argón (Ar) e hidrógeno (H ₂) inyectados en un reactor CVD a alta temperatura (alrededor de 1000 °C) para la síntesis de recubrimiento Gr resistente a la corrosión (JS. Chen, L. Brown, et al., 2011).
	RTA (Rapid Thermal processing)	El recubrimiento de grafeno se puede lograr con acetona en una lámina de Cu previamente recocida a 1000 °C mediante recocido térmico rápido (Jae-Hoon Huh, Seung Hyun Kim, et al., 2014).
	Powder Spray	El polvo compuesto grafeno se alimenta con un gas formador de plasma a alta temperatura depositado a alta velocidad (X. Youtao, L. Hongqing, Z. et al., 2014).
Húmedo	EPD (Electrophoretic deposition)	El óxido de grafeno GrO cargado negativamente es atraído y depositado en un electrodo de carga opuesta por la influencia de un campo eléctrico. Queda una película compacta después del secado (W. He, L. Zhu, H. et al., 2013).
	Dip Coating	El sustrato se sumerge / sumerge en una dispersión de óxido de grafeno GrO y posteriormente se seca después de la extracción (P. F. Li, H. Zhou and X. Cheng, 2014).
	Spin coating	Se aplica una solución dispersa de óxido de grafeno GrO a un sustrato que gira a alta velocidad. La fuerza centrífuga extiende el material de recubrimiento para formar una película delgada [28].
	Drop casting	Gotas de solución de óxido de grafeno GrO, se dejan caer sobre una superficie catiónica tratada con tensioactivo para generar películas uniformes y luego se secan al aire o se colocan en un horno de secado (S. Anandan, T. Narasinga Rao. et al., 2012)
	Brushing	La tinta grafeno Gr y las pinturas a base de óxido de grafeno GrO se han utilizado para recubrimientos preparados con brocha para formar películas delgadas resistentes a la corrosión en metales y

aleaciones de metales (S. Mayavan, T. Siva and S. Sathiyarayanan, 2013).

Vacuum filtration Las dispersiones de grafeno Gr u óxido de grafeno GrO se filtran al vacío utilizando un soporte de membrana para depositar las hojas de Gr / GrO. Mediante este método se fabrican papel antibacteriano basado en GrO y membranas antiincrustantes (Tahir, N.A.M., Abdollah, et al., 2020)

Tabla 2.6.1 –Métodos de deposición del grafeno en el implante dental.

Los métodos mencionados en la tabla 2 son los más utilizados para aplicar el grafeno en diferentes sólidos Y a continuación, se describe los métodos de recubrimiento del grafeno, añadiendo algunas ventajas de cada proceso.

2.6.1 Deposición química por vapor (CVD):

La deposición química de vapor (CVD) es un método mediante el cual se usa una reacción química para inducir la deposición de una película delgada. En el método CVD, el grafeno se sintetiza en la superficie de un sustrato calentando la fuente a su punto transitorio de gas (Tg). Luego, con la ayuda del flujo de gas inerte, el vapor de carbono se transfiere a la superficie del sustrato (Tahir, N.A.M., Abdollah, M.F.B., Tamaldin, N. et al., 2020).

En la figura 4 se muestra la representación del método de deposición química de vapor.

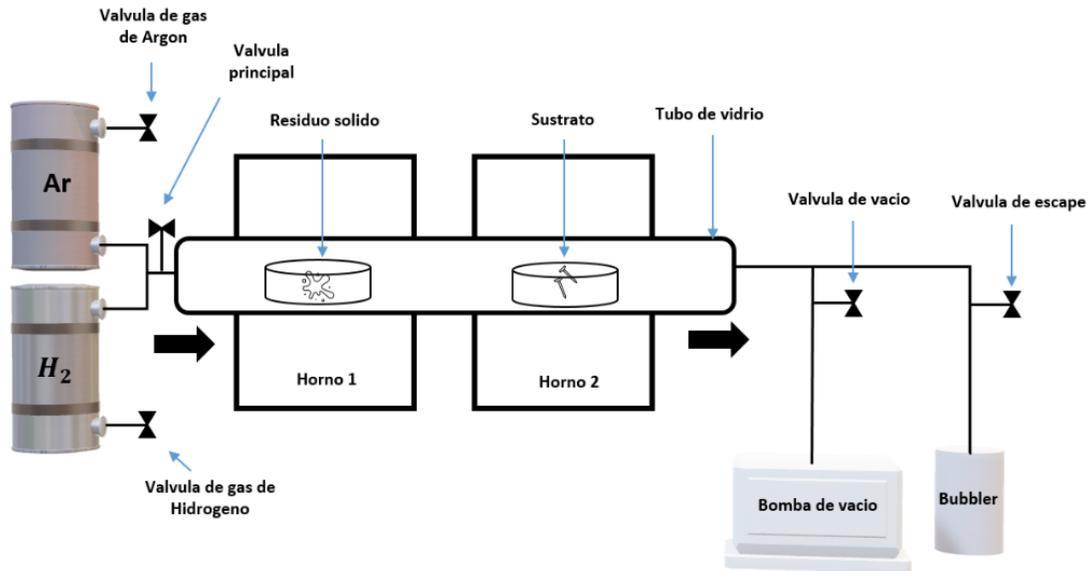


Figura 2.6.1. Diagrama esquemático del método de CVD [diagrama propio].

2.6.2 Procesamiento térmico rápido (RTA):

Los métodos RTA utilizan calentamiento por infrarrojos que se caracteriza por un equilibrio casi térmico en todo el grosor de la muestra, este proceso puede proporcionar un calentamiento y enfriamiento rápidos a temperaturas de proceso de 300–1200 ° C con velocidades de rampa típicamente de 10–250 ° C / s, combinado con un excelente control del ambiente de gas, lo que permite la creación de procesos sofisticados de múltiples etapas dentro de una receta de procesamiento (Wang, X., Estradé, S. et al., 2017).

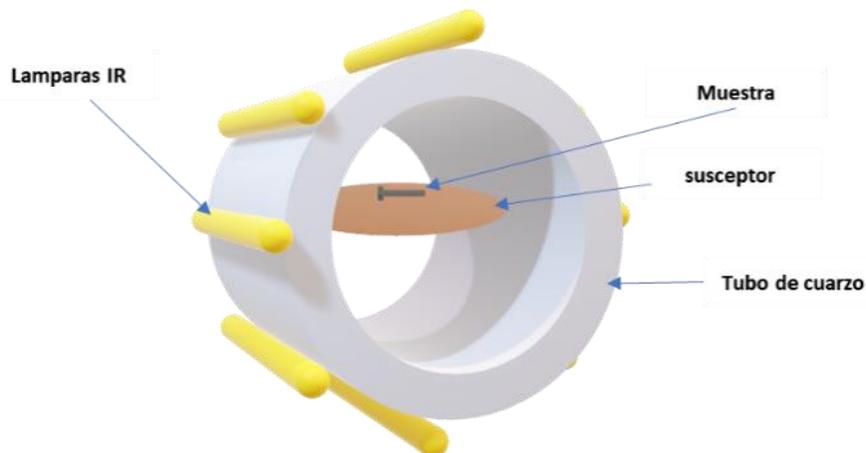


Figura 2.6.2. Diagrama esquemático del método de RTA [diagrama propio].

2.6.3 Polvo en aerosol (Powder spray):

Los gases inertes comprimidos (típicamente nitrógeno y helio) aceleran las partículas de polvo (típicamente partículas metálicas con diámetros que oscilan entre 10 y 100 μm) en una boquilla “De Laval” a velocidades supersónicas (hasta 1000 m / s) antes del impacto sobre el sustrato. Las partículas de pulverización se inyectan dentro de la boquilla para dirigirse hacia el sustrato a recubrir. Las eficiencias de deposición pueden alcanzar más del 90%, con los recubrimientos resultantes que muestran niveles de porosidad muy bajos. Las temperaturas del gas de proceso generalmente se mantienen en un rango en el que las partículas pulverizadas nunca se exponen a temperaturas cercanas a su punto de fusión (Armelle Vardelle, Christian Moreau. et al., 2016).

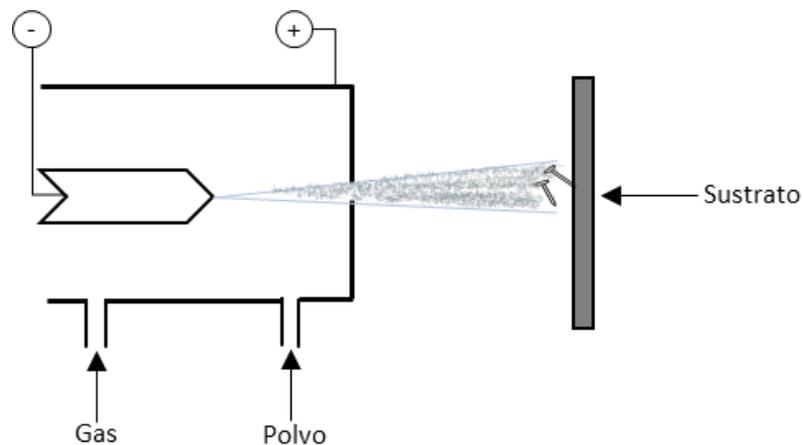


Figura 2.6.3 Diagrama esquemático del método de aerosol Recuperado [diagrama propio].

2.6.4 Deposición electroforética (EPD):

De acuerdo con Y. Y. Shi, M. Li. et al. (2016), la deposición electroforética (EPD) es una técnica de recubrimiento coloidal que utiliza un campo eléctrico para mover las partículas cargadas hacia el electrodo de trabajo y depositarlas. El interés en EPD no es solo por su alta versatilidad sino también por su rentabilidad. Es un proceso simple con capacidad de fabricar recubrimientos multicapa y graduados funcionalmente. Hoy en día, EPD está ganando cada vez más atención en películas delgadas para aplicaciones biomédicas. El

uso inicial de EPD en el campo de los biomateriales fue desarrollar recubrimientos de hidroxiapatita (HA) en implantes ortopédicos metálicos, donde los científicos tenían como objetivo mejorar la bioactividad de las superficies metálicas y, por lo tanto, promover la integración de los implantes con los tejidos circundantes. Es conveniente controlar la estequiometría y el espesor de HA depositados en un amplio rango a través de la EPD cambiando los parámetros de procesamiento, por ejemplo, el tiempo, el voltaje y la concentración. Pouya Amrollahia et al. (2015) nos menciona que la electrólisis del agua genera burbujas de gas que comprometen drásticamente la calidad de la capa depositada. M. S. H. Choudhury et al. (2018) concluye que la cantidad de deposición aumentó cuando el voltaje de deposición y el tiempo de deposición aumentaron. Por otro lado, la cantidad de deposición disminuyó cuando se aumentó la distancia de deposición. Se formaron grietas en la capa de deposición mientras que el voltaje y el tiempo de deposición excedieron los 40 V y 30 s respectivamente. De la investigación, está claro que para evitar las grietas y lograr una capa uniforme, la deposición estaría en condiciones optimizadas de $V = 40 \text{ V}$, $T = 30 \text{ seg}$ y $D = 1.5 \text{ cm}$.

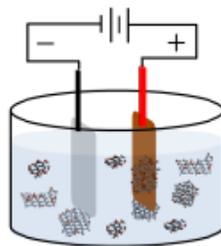


Figura 2.6.4 Deposición electroforética, por sus siglas en inglés (EPD). Md J. Nine, Martin A. et al. (2015). *Graphene: The multipurpose material for protective coatings*. Royal society of chemistry.

2.6.5 Recubrimiento por inmersión/capilaridad (Dip Coating):

El recubrimiento por inmersión es una técnica fácil y económica ampliamente utilizada en muchos campos industriales para depositar sobre cualquier sustrato, incluidos metálicos, cerámicos, películas de polímeros y materiales fibrosos. El proceso podría definirse como depositar soluciones de revestimiento en fase líquida de base acuosa

sobre la superficie de cualquier sustrato. Generalmente, los materiales objetivo se disuelven en soluciones que se recubren directamente sobre la superficie del sustrato, luego el revestimiento húmedo sedimentario se evapora para obtener una película seca (Tang, X., & Yan, X., 2017).

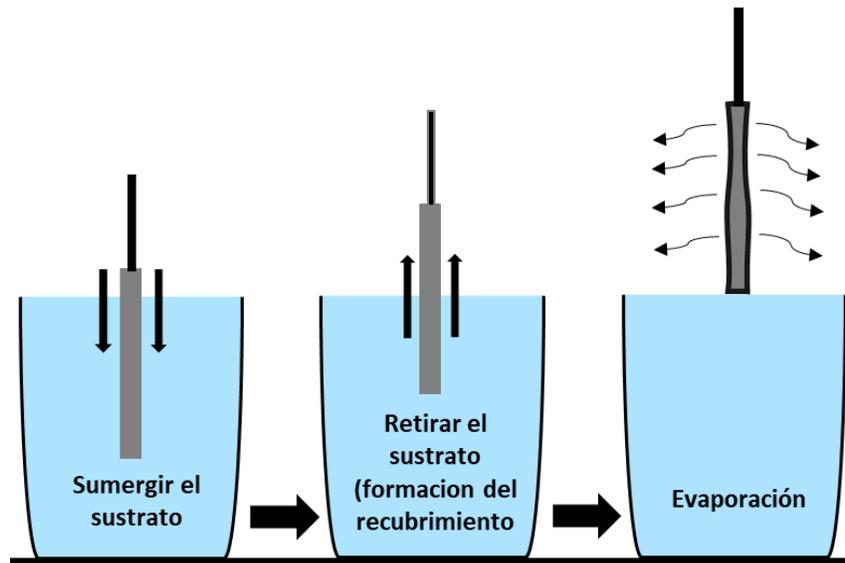


Figura 2.6.5 Diagrama esquemático del método de deposición por inmersión [Diagrama propio].

2.6.6 Recubrimiento por centrifugación (Spin Coating):

El control del grosor de la película podría realizarse ajustando la velocidad de rotación del plato donde se encuentra el sustrato a recubrir, la concentración de la solución y el peso molecular del polímero utilizado. Se usa para preparar una película delgada porque es rápida, de bajo costo y produce una capa delgada uniforme grande (Voo, R., Mariatti, M., & Sim, L., 2011).

El proceso de recubrimiento por rotación consiste en un paso de dispensación en el que la resina se deposita sobre la superficie del sustrato (en nuestros experimentos se usaron películas de retroproyector como sustrato), un paso de giro de alta velocidad para recubrir la resina y un paso de secado para eliminar exceso de solventes (Ehmann, H. M., Baumgartner, R. et al., 2014).

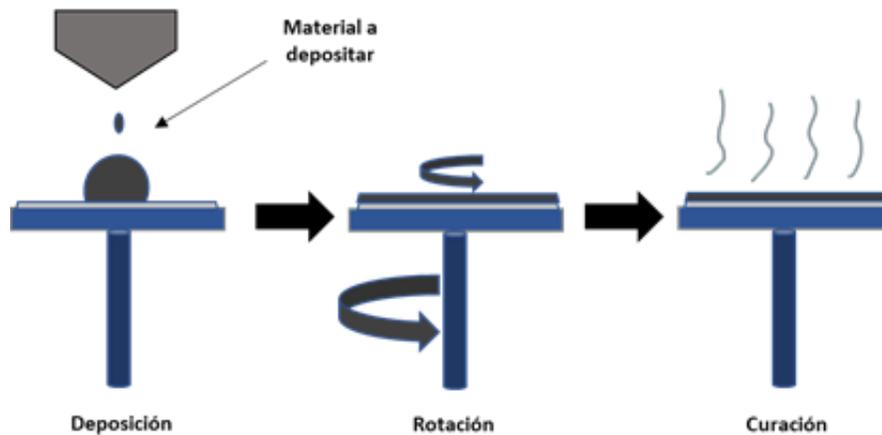


Figura 2.6.6 Diagrama esquemático del método de rotación [Diagrama propio].

2.6.7 Deposición por goteo (Drop casting):

El moldeo por caída es una técnica simple para la cual se coloca una gota, típicamente, en una superficie sólida, seguida de evaporación del solvente. Este método requiere costos mínimos de material y procesamiento y también juega un papel importante en la superficie básica y la química de interfaz del producto (Ehmann, H. M., Baumgartner, R. et al., 2014). Esta técnica es similar al recubrimiento por rotación, pero la principal diferencia es que no se requiere la rotación del sustrato. Además, el espesor y las propiedades de la película dependen del volumen de dispersión y concentración. Otras variables que afectan la estructura de la película son la humectación del sustrato, la velocidad de evaporación y el proceso de secado (Kajal, P., Ghosh, K., & Powar, S., 2018).

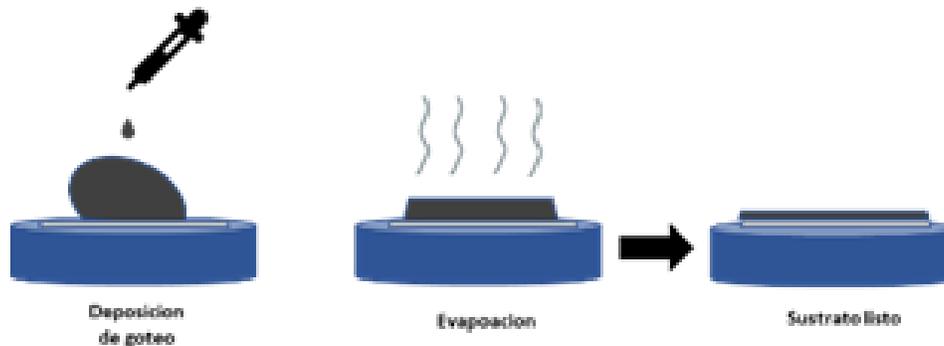


Figura 2.6.7 Diagrama esquemático del método de deposición por goteo [Diagrama propio].

2.6.8 Deposición por cepillado (Brushing):

La pintura con pincel es uno de los métodos más simples para la fabricación. Es una técnica de fabricación de alta velocidad con baja pérdida de material. Es una técnica más rápida ya que no hay proceso de recocido involucrado en este proceso. Además, los dispositivos pintados con pincel muestran una mejora en la eficiencia en comparación con la técnica de recubrimiento por rotación, ya que no se requiere recocido térmico. La desventaja de la pintura con pincel puede ser controlar el grosor uniforme. Procedimientos (Kajal, P., Ghosh, K., & Powar, S., 2018).

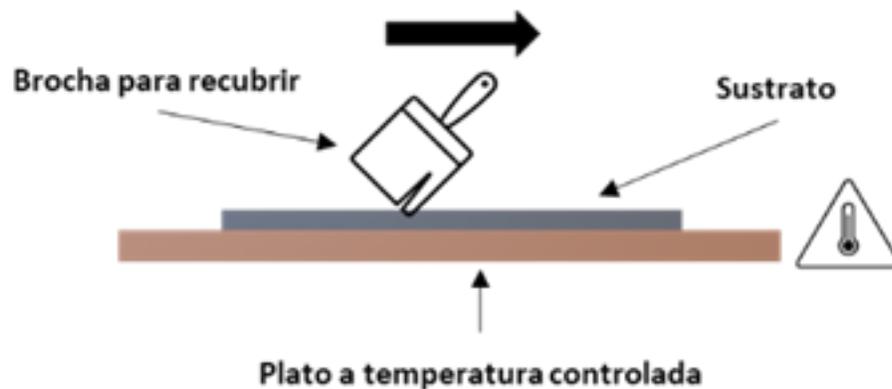


Figura 2.6.8 Diagrama esquemático del método de deposición por cepillado [Diagrama propio].

2.7 Análisis de elementos finitos.

El modelo de elementos finitos (FEM) es un método informático para el análisis de distribución de tensiones. El efecto de las fuerzas de carga sobre los elementos del implante dental y el hueso periimplantario se puede registrar aplicando el estrés equivalente (estrés de von Mises), expresado en megapascales (MPa). La diferencia de distribución de la tensión generalmente se presenta en diferentes colores y el rojo muestra el esfuerzo máximo (Cervino, G., Romeo, U., Lauritano, et al., 2018).

De acuerdo con Vignarajah Muthulingam (2017) en el análisis de elementos finitos, la solución se obtiene para las cantidades nodales, es decir, los desplazamientos. Los nodos pueden tener un máximo de seis grados de libertad (DOF) asociados a ellos. Las conexiones de los nodos generan el cuerpo de la estructura. La comprensión adecuada del estado del DOF nodal es crucial para que el modelo estructural se comporte tan cerca como el modelo físico.

En el método de elementos finitos, el límite y el interior de la región se subdividen por líneas (o superficies) en un número finito de subregiones o elementos finitos de tamaño discreto. Se establecen varios puntos nodales con la malla. La asignación de los números nodales y los números de elementos tendrá un efecto significativo en el tiempo de solución y los requisitos de almacenamiento. El analista asigna un número de grados de libertad generalizados a cada nodo. Estos son los parámetros nodales desconocidos que el analista ha elegido para gobernar la formulación del problema de interés (Akin, J. E., 2005).

En el análisis de elementos finitos, la precisión del resultado obtenido está determinada por el tamaño de la malla. De acuerdo con la teoría del análisis de elementos finitos, el modal finito con un tamaño de elemento pequeño produce una alta precisión en comparación con el modal con un tamaño de elemento grande. el tamaño del elemento es grande, entonces aumenta la complejidad del modal (Dutt, A., 2015).

La información más comúnmente necesaria en un análisis de ingeniería es el estado de las temperaturas, o los desplazamientos y las tensiones. Por lo tanto, casi todos los sistemas ofrecen capacidades de análisis de tensión estática lineal y capacidades de análisis térmico lineal para conducción y convección que a menudo se necesitan para proporcionar distribuciones de temperatura para el análisis de tensión térmica.

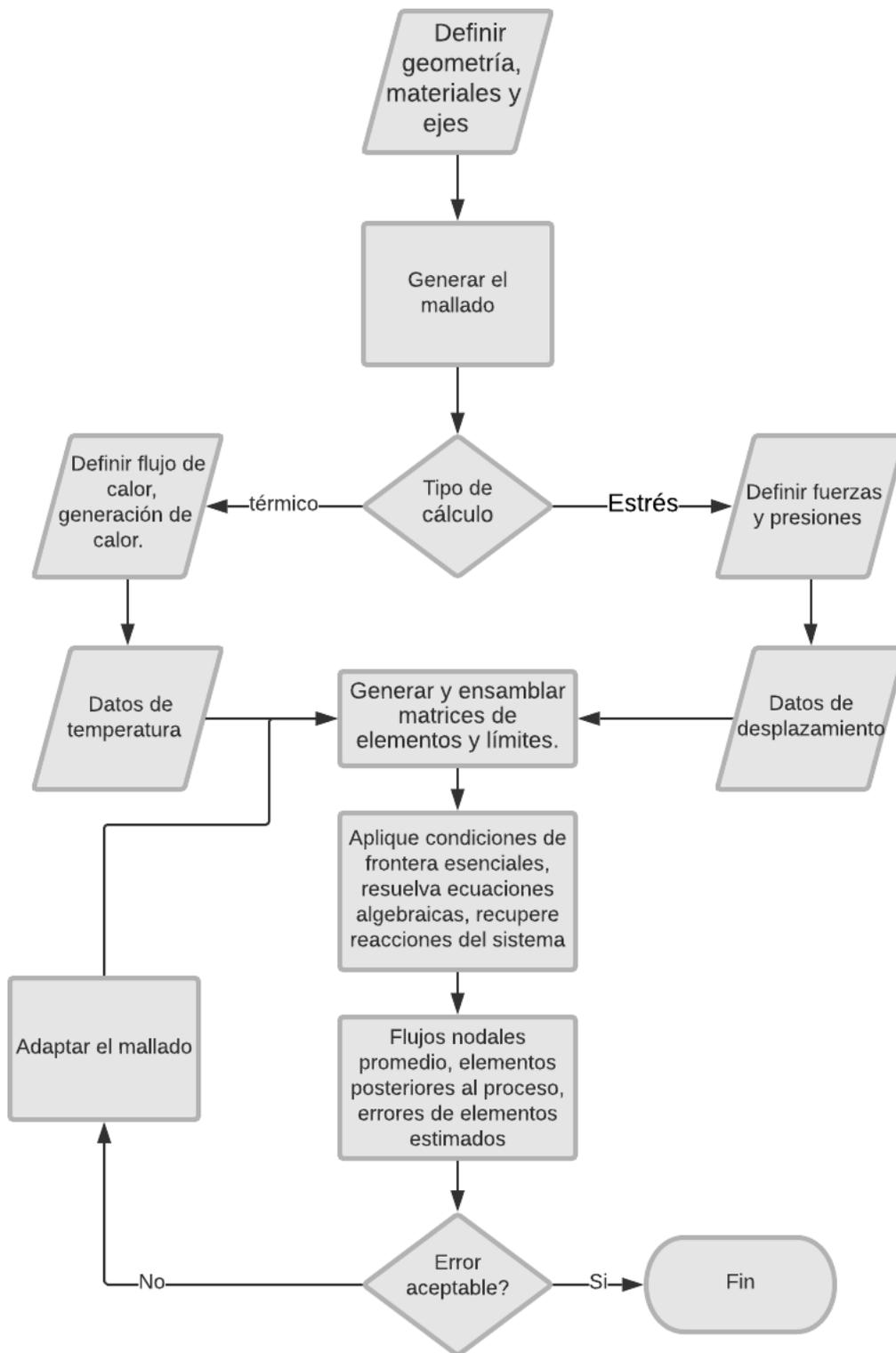


Figura 2.7.1 Etapas típicas del análisis de elementos finitos. Akin, J. E. (2005) . *Finite Element Analysis With Error Estimators An Introduction to the FEM and Adaptive Error Analysis for Engineering Students*

Capítulo 3: Metodología

A continuación, se presentan las etapas que se llevaron a cabo durante esta investigación transeccional de análisis computacional, de elementos finitos en un modelo 3D, de implante dental de titanio, en el cual se simulara el recubrimiento de tal implante, pero con el material de grafeno.



Figura 3.1 Representación conceptual del proceso metodológico de la presente investigación [Diagrama propio].

Etapa 1 – Modelado 3D del implante:

En esta etapa, mediante el uso del programa de SolidWorks (Dassault Systèmes, 2018), se crea el modelo 3D del implante dental. Este primer modelo 3D del implante, servirá para posteriormente realizar la simulación de elementos finitos.

Una vez obtenido el modelo principal del implante dental, lo siguiente a realizar es crear el modelo que fungirá como el recubrimiento del implante principal, este modelo de recubrimiento se asignará el material propuesto, es decir, el grafeno. Para poder realizar este modelo de recubrimiento se realiza el siguiente procedimiento:

1. Seleccionar todas las superficies.
2. Ir a herramientas de superficie, y seleccionar la opción de “Offset Surface”.
3. Seleccionar todas las superficies, y darle medida de 0mm, para que coincida con los límites del sólido.
4. Se le da color azul a la superficie creada. Es posible observar ambos sólidos con una visualización de corte y haciendo zoom.

5. En el área de trabajo, en la carpeta de cuerpos solidos se esconde el sólido inicial rojo.
6. Se selecciona la opción de superficie offset, generada del árbol de diseño (dentro de la carpeta de superficies) y en herramientas de superficie, se le da grosor a la superficie para convertir a solido con la herramienta "Thicken".
7. Hay que asignar el grosor, en este caso solo se puede por restricciones del programa un mínimo de 0.0003mm hacia afuera.
8. Con esto se obtiene un sólido delgado, este nuevo solido delgado se guarda como una pieza aparte del tornillo principal, para tener dos archivos de solidos individuales, uno del tornillo, y otro de la capa exterior que se acaba de formar.
9. Se genera un ensamble de SolidWorks y se agregan ambos sólidos, el tornillo sólido y la capa solida delgada exterior.
10. Se hace una vista de corte transversal, para observar que uno es un sólido delgado hueco y el otro un sólido.
11. Se generan relaciones geométricas de posición (constraints).
 - a. Concentricidad de tornillos.
 - b. Paralelismo entre los planos de caras del hexágono del tornillo coincidente, de modo que el giro concéntrico relativo de las piezas este restringido.
 - c. Con ayuda de vista de corte auxiliar, se hace coincidencia de planos de caras de tornillo interna (de la pieza azul)-externa (de la pieza roja) para lograr que un sólido "envuelva a otro".
12. Se guarda el formato en los siguientes formatos, para posteriormente ser procesado en un software de análisis de elementos finitos.
 - .sldasm (nativo de solidworks).
 - .step203 (formato de guardado de geometrías solidas 3D estándar).
 - .step214 (formato de guardado de geometrías solidas 3D estándar).

Etapa 2 – Mallado:

En esta etapa de la metodología, se usa el software en versión estudiante de hypermesh (Altair Engineering Inc., 2019), para realizar el análisis de elementos finitos. Se sigue el siguiente procedimiento:

1. Importar el modelo 3D anteriormente generado en el formato .step.
2. Seleccionar uno de los dos modelos importador a la vez.
3. Seleccionar todas las superficies del modelo seleccionado, y el tipo de mallado.
4. Ingresar el valor de la medida de los elementos. El valor mínimo que se pudo ingresar en versión estudiante es de $2.0e-4$, para ambos modelos de implantes, puesto que, al tratar de ingresar un valor más pequeño, se sobrepasaba los límites de nodos permitidos que son 100,000.
5. Rellenar ambas figuras con elementos 3D, con la función de “tetramesh”
6. Eliminar los elementos 2D (tria3, quad4), que existan en las superficies de los modelos.

Etapa 3 – Asignar materiales y propiedades físicas:

En esta etapa, el objetivo es crear los nombres de los materiales a utilizar, así como la asignación de sus propiedades físicas, para este caso propiedades mecánicas enfocadas en la elasticidad. Una vez creado los materiales, se asignan correspondientemente a los modelos 3D.

Etapa 4 – Crear las condiciones de frontera:

Para empezar a crear las condiciones de frontera, primero se necesita declarar las áreas de superficie de contacto, entre ambos implantes, es decir, que superficies del implante de titanio que interactuara con el implante de grafeno, y especificar qué modelo es el “Master” y el “Slave” para indicar cuál será el modelo que está recubierto y cual no.

Lo siguiente es definir las restricciones de los modelos, para este análisis, se define que el implante estaría incrustado en el hueso maxilar del paciente, por lo que las

restricciones se asignan alrededor de las cuerdas del implante, simulando esta incrustación.

Etapas 5 – Crear las condiciones de carga:

Para crear las condiciones de carga, se hace la investigación sobre que fuerza utilizar, y a que ángulo. Por lo que, de acuerdo con Curiqueo, A., Salamanca et al., (2015), el promedio de la fuerza masticatoria en hombres es de 439.17 N, y para este análisis, usamos una fuerza de 450 N, y el ángulo asignado de acuerdo con de la Rosa Castolo, G., Perez, S. et al., (2018), es de 30 grados del eje principal del implante según ISO 14801.

Capítulo 4: Resultados.

En este capítulo se hace referencia a los resultados de la preparación de los modelos en 3D de los implantes dentales, y del análisis de elementos finitos, descrito en el capítulo anterior. Se empieza por mostrar el resultado del modelo original que funge como el implante de titanio, ver la Fig. 4.1.1

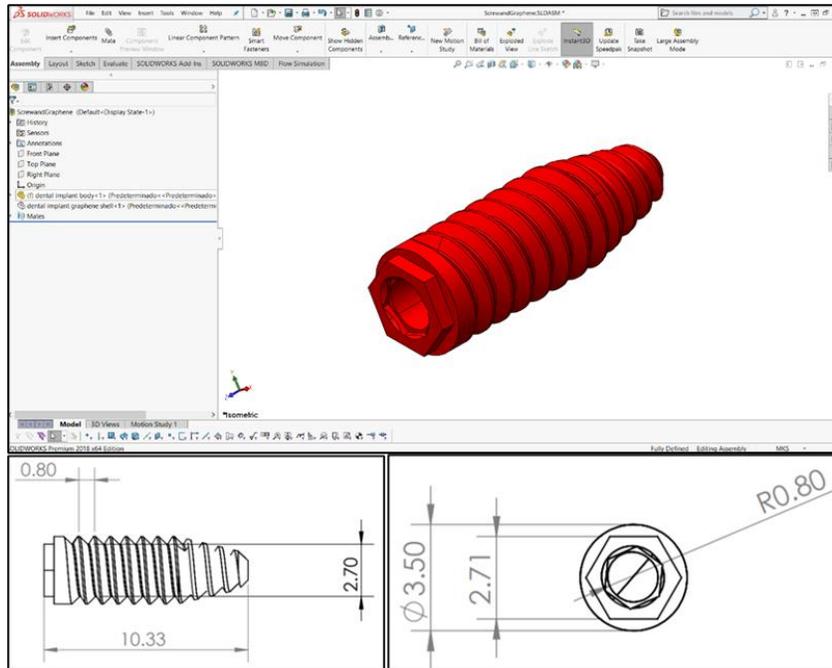


Figura 4.1.1 Modelo 3D de implante original [imagen propia].

A partir de este resultado, se obtuvo el siguiente modelo, el cual su función es el modelo que recubrirá al original, y se le asignó colores para diferenciarlos, siendo el azul el implante de titanio y el rojo el implante de grafeno, ver figura 4.2.1.

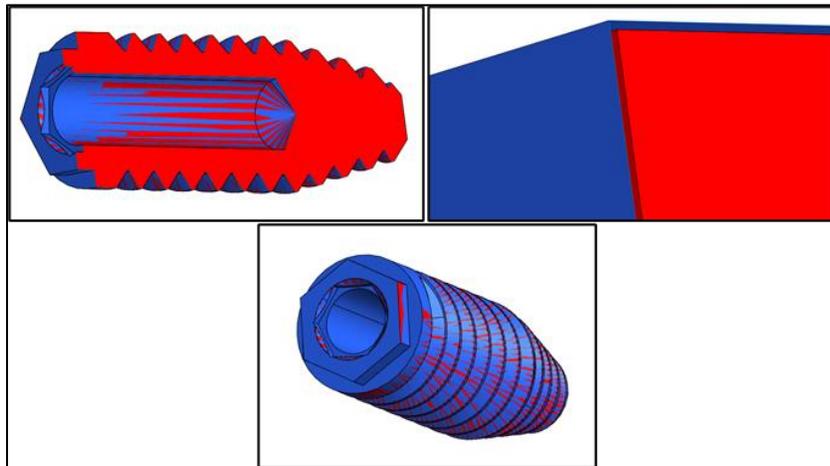


Figura 4.2.1 Dar color azul al nuevo modelo de recubrimiento y visualización [imagen propia].

Una vez asignado el espesor del resultado del implante de azul, se guarda como una pieza aparte del tornillo principal, para tener dos archivos de sólidos individuales, se hace un corte transversal para mirar el sólido azul, ver figura 4.3.1

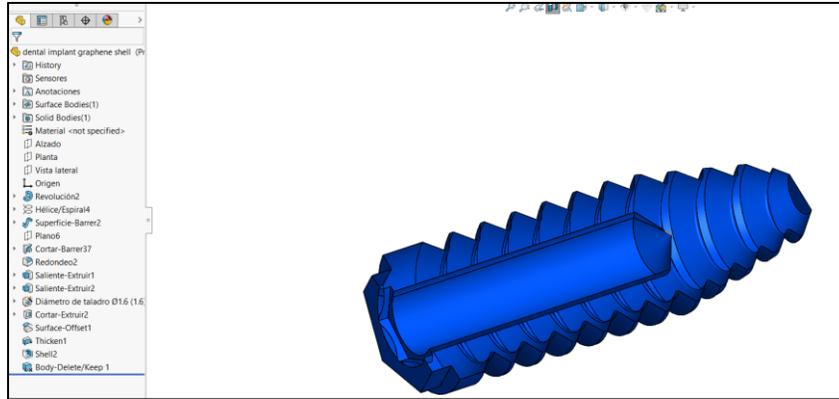


Figura 4.3.1 Guardado del nuevo modelo de recubrimiento [imagen propia].

El siguiente resultado muestra cómo se logra la concetricidad de ambos modelos de implante, ver figura 4.4.1.

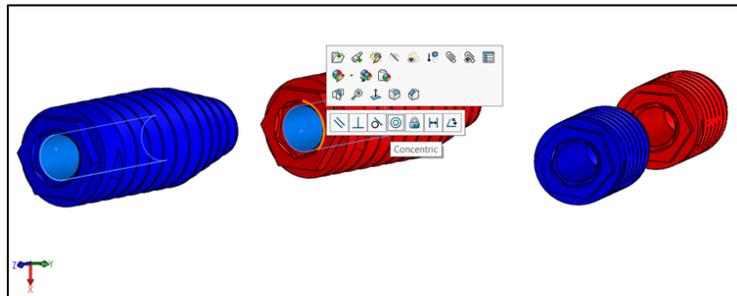


Figura 4.4.1 Concentricidad entre ambos modelos [imagen propia].

A continuación, se muestra el resultado en la figura 4.5.1 del mallado en el modelo del recubrimiento, es decir, el grafeno.

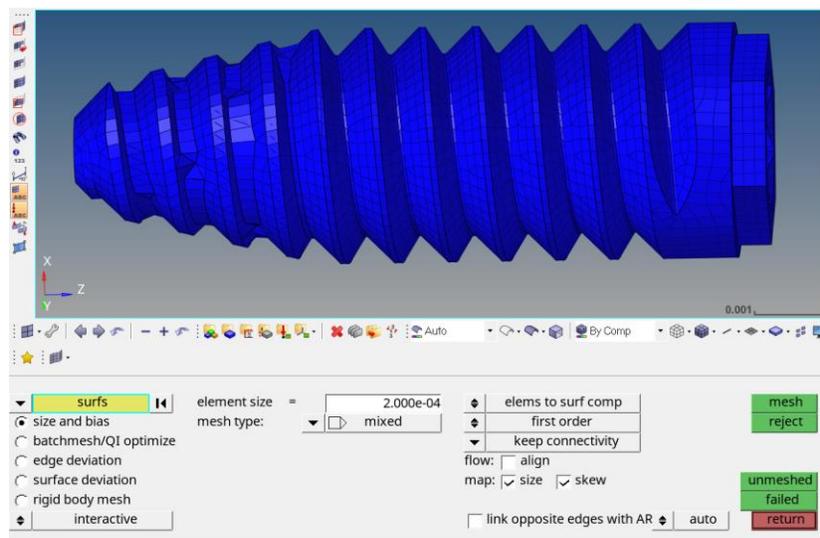


Figura 4.5.1 Mallado del modelo del recubrimiento [imagen propia].

En la tabla 4.1.1, se muestran los valores de las propiedades de los materiales que se utilizaron en la simulación. La carga aplicada en ambos modelos 3D, fue de 450N.

Material	Módulo de Young	Relación de Poisson	Módulo de cizalladura	Densidad
Titanio grado 4	104 Gpa	0.30	40 Gpa	4.51 g/cm3
Grafeno	207.6 Gpa	0.165	280 Gpa	2.26 g/cm3

Tabla 4.1.1 Propiedades mecánicas de los materiales simulado. De la Rosa Castolo, G., Perez, S. et al., (2018). Mechanical strength and fracture point of a dental implant under certification conditions: A numerical approach by finite element analysis., Suk, J. W., Piner, R, et al., (2010). Mechanical properties of monolayer graphene oxide.

El resultado de las restricciones asignadas lo podemos observar en la figura 4.6.1. Recordando que la idea es que el implante simule que esta injertado en el hueso maxilar del paciente.

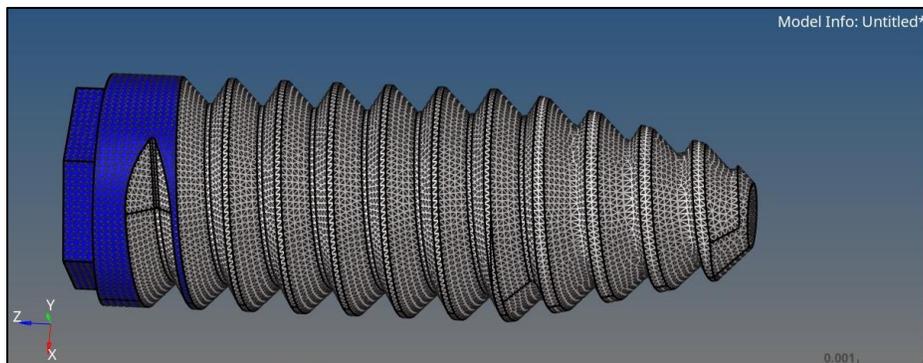


Figura 4.6.1 Restricciones del modelo final imagen propia].

Al compilar el programa de análisis finito, se obtienen los siguientes resultados de desplazamiento observados en las figuras 4.7.1 y 4.8.1.

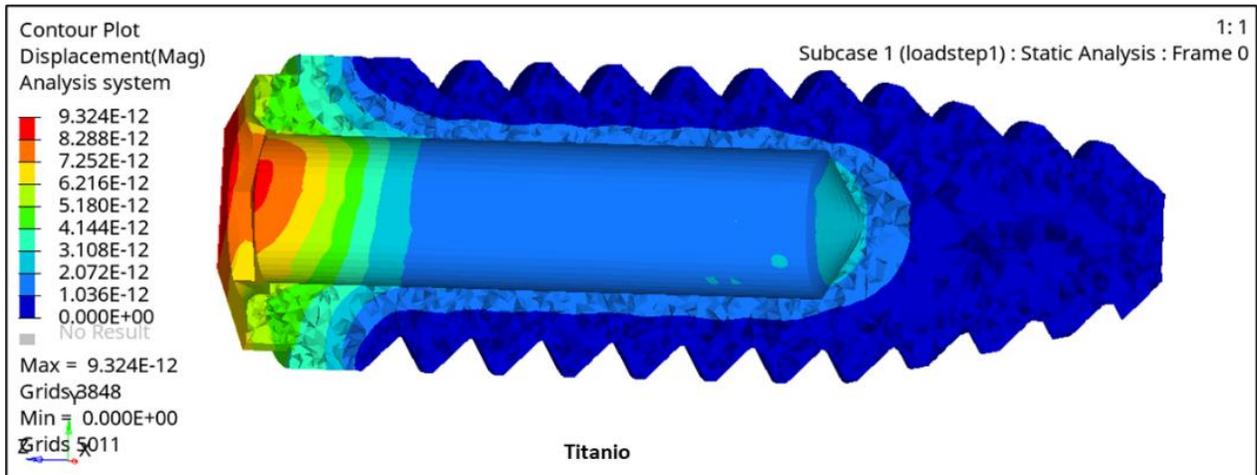


Figura 4.7.1 Gráfica de desplazamiento del implante de titanio [Imagen propia].

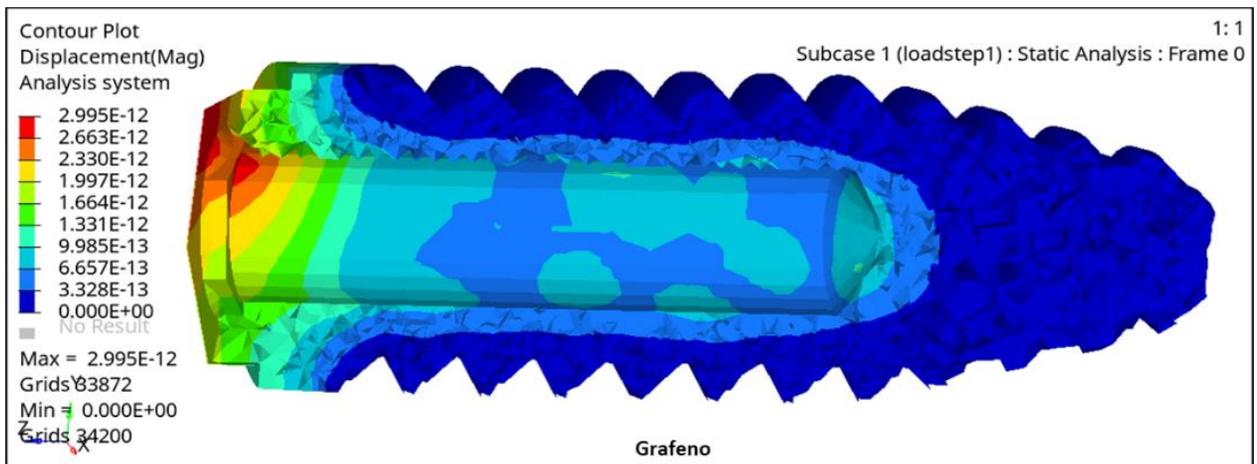


Figura 4.8.1 Gráfica de desplazamiento del implante recubierto con grafeno [Imagen propia].

Graficando los resultados obtenidos de desplazamiento, en la figura 4.9.1 se puede ver que se obtiene un porcentaje de diferencia favorable para el grafeno del 32.12%.

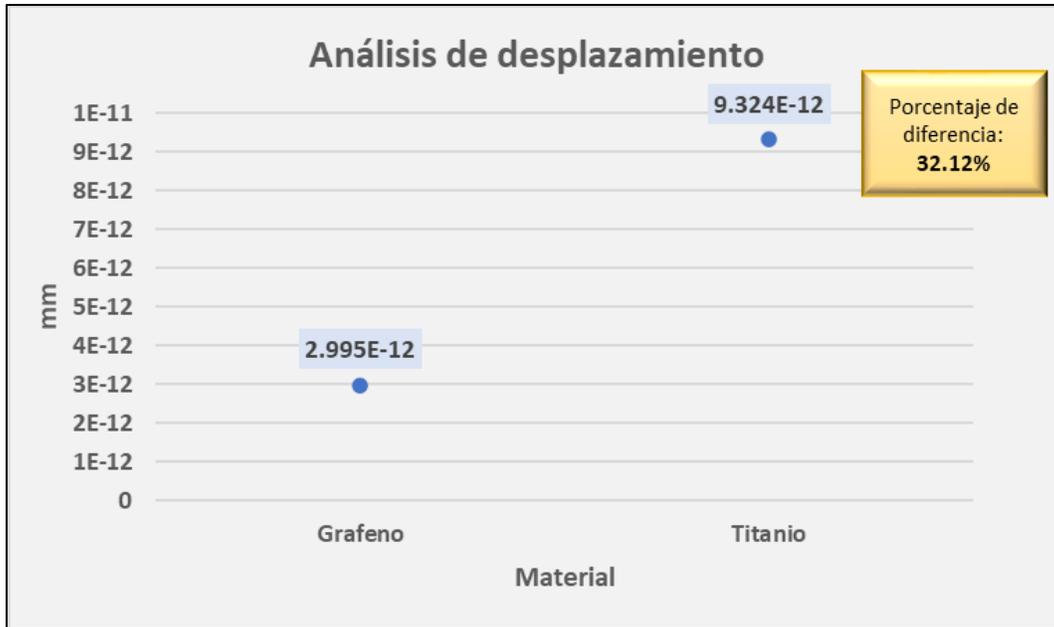


Figura 4.9.1 Gráfica con los valores máximos y mínimos del análisis de desplazamiento [Imagen propia].

Para finalizar esta sección de resultados, se muestran en las figuras 4.10.1 y 4.11.1 el análisis de estrés calculado por el método de Von mises. Y en la figura 4.12.1, se grafican los valores máximos y mínimos, obteniendo un valor del 56.88% menor usando el recubrimiento del grafeno.

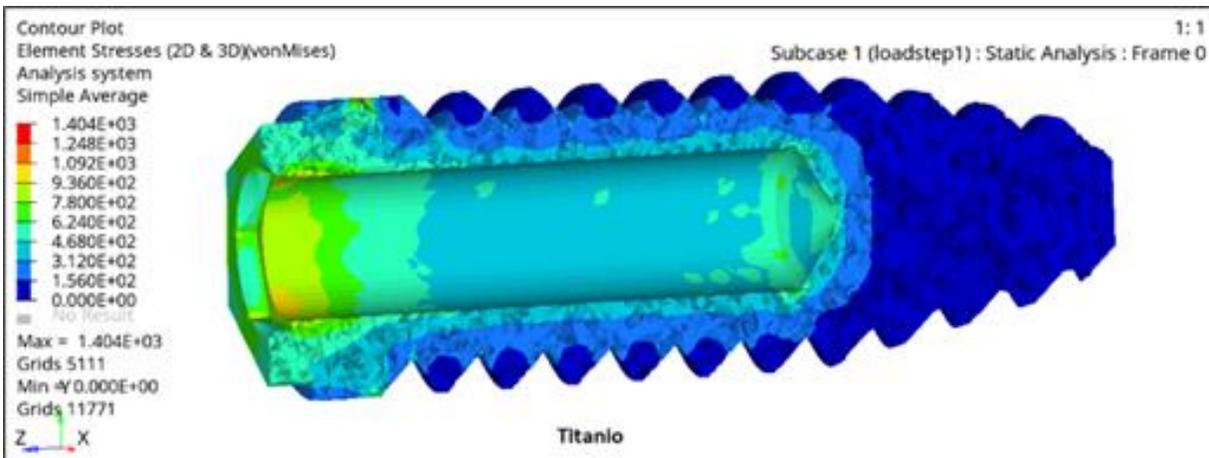


Figura 4.10.1 Gráfica de estrés por distribución de Von Mises del titanio [Imagen propia].

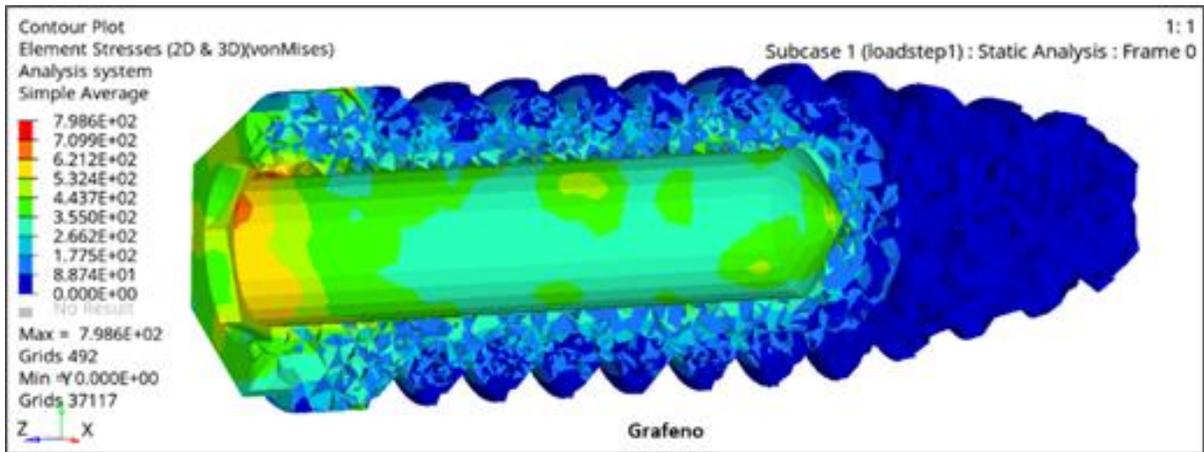


Figura 4.11.1 Gráfica de estrés por distribución de Von Mises del grafeno [Imagen propia].



Figura 4.12.1 Gráfica de máximos y mínimos del análisis de estrés mecánico por el método de Von Mises [Imagen propia].

Capítulo 5: Conclusión y recomendaciones.

Llegar a un dictamen final, de que el grafeno en definitiva es exitoso para recubrir al implante dental es todo un reto, ya que en esta investigación solo se puede observar que la simulación computacional por el método de elementos finitos nos muestra un favorable uso del grafeno, esto al reducir la deformación elástica y desplazamiento mecánico que soporta el implante dental comercial de titanio por las distintas cargas masticatorias, debió al incremento de la resistencia mecánica. Por otro lado, este trabajo se suma en el cúmulo de las tendenciales investigaciones científicas acerca del grafeno y sus usos. Cabe mencionar que posterior a esta investigación, está abierta oportunidad de la de experimentación, del recubrimiento de grafeno en implantes dentales de titanio, así como la experimentación en seres vivos, en donde se podrá obtener resultados trascendentes. Como recomendación para llegar a tener una buena osteointegración, se sugiere tener en cuenta los siguientes seis factores: la biocompatibilidad del implante, el diseño del implante, la condición de la superficie, la ubicación, los métodos quirúrgicos y el control de peso postoperatorio. Bajo estas condiciones, muchos clínicos dentales han reportado resultados estéticos satisfactorios, con la restauración en poco tiempo.

Referencias

- Akin, J. E. (2005). Finite element analysis with error estimators: An introduction to the FEM and adaptive error analysis for engineering students. Elsevier.
- Altair Engineering Inc (2019). Altair HyperMesh (2019 Student edition). Estados Unidos: Altair Engineering Inc.
- Anandan, S., Narasinga Rao, T., Sathish, M., Rangappa, D., Honma, I., & Miyauchi, M. (2013). Superhydrophilic graphene-loaded TiO₂ thin film for self-cleaning applications. *ACS applied materials & interfaces*, 5(1), 207-212.
- Asensio, G., Vázquez-Lasa, B., & Rojo, L. (2019). Achievements in the Topographic Design of Commercial Titanium Dental Implants: Towards Anti-Peri-Implantitis Surfaces. *Journal of clinical medicine*, 8(11), 1982.
- Basáñez E. Rivera, Liliana F. De la torre Ortega (2009). Implantes una revolución en estomatología. *Implantología actual*, 06, 52-54.
- Cervino, G., Romeo, U., Lauritano, F., Bramanti, E., Fiorillo, L., D'Amico, C., ... & Cicciù, M. (2018). Fem and von mises analysis of OSSTEM® dental implant structural components: Evaluation of different direction dynamic loads. *The open dentistry journal*, 12, 219. <https://doi.org/10.2174/1874210601812010219>.
- Corona Carpio, M. H., Hernández Espinosa, Y., Mondelo López, I., Castro Sánchez, Y. E., & Díaz del Mazo, L. (2015). Principales factores causales del fracaso de los implantes dentales. *MediSan*, 19(11), 1325-1329. <http://www.medisan.sld.cu/index.php/san/article/view/523>.
- Curiqueo, A., Salamanca, C., Borie, E., Navarro, P., & Fuentes, R. (2015). Evaluación de la fuerza masticatoria máxima funcional en adultos jóvenes chilenos. *International journal of odontostomatology*, 9(3), 443-447.
- Dassault Systèmes (2018). Solidworks premium 2018 (26). Estados Unidos: Dassault Systèmes.

- David, L., Feldman, A., Mansfield, E., Lehman, J., & Singh, G. (2014). Evaluating the thermal damage resistance of graphene/carbon nanotube hybrid composite coatings. *Scientific reports*, 4, 4311.
- De la Rosa Castolo, G., Perez, S. V. G., Arnoux, P. J., Badih, L., Bonnet, F., & Behr, M. (2018). Mechanical strength and fracture point of a dental implant under certification conditions: A numerical approach by finite element analysis. *The Journal of prosthetic dentistry*, 119(4), 611-619.
- Delsing, P., & Bergstrom, L. (2010). Nobel Prize in Physics-2010. Recuperado de <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/press-release/>.
- Di Carlo, S., Brauner, E., Di Carlo, F., Visca, A., Piccoli, L., & De Angelis, F. (2019). Graphene Applications in Dentistry. *Journal of International Dental and Medical Research*, 12(2), 748-754.
- Dutt, A. (2015). Effect of mesh size on finite element analysis of beam. *International Journal of Mechanical Engineering*, 2(12), 8-10.
- Ehmann, H. M., Baumgartner, R., Kunert, B., Zimmer, A., Roblegg, E., & Werzer, O. (2014). Morphologies of phenytoin crystals at silica model surfaces: vapor annealing versus drop casting. *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(24), 12855-12861.
- Gu, M., Lv, L., Du, F., Niu, T., Chen, T., Xia, D., ... & Xiong, C. (2018). Effects of thermal treatment on the adhesion strength and osteoinductive activity of single-layer graphene sheets on titanium substrates. *Scientific reports*, 8(1), 1-15.
- Guo, F., Silverberg, G., Bowers, S., Kim, S. P., Datta, D., Shenoy, V., & Hurt, R. H. (2012). Graphene-based environmental barriers. *Environmental science & technology*, 46(14), 7717-7724.
- He, W., Zhu, L., Chen, H., Nan, H., Li, W., Liu, H., & Wang, Y. (2013). Electrophoretic deposition of graphene oxide as a corrosion inhibitor for sintered NdFeB. *Applied Surface Science*, 279, 416-423.

- ISO, I. (2016). 14801: 2016 (en), Dentistry—Implants—Dynamic loading test for endosseous dental implants.
- Jae-Hoon Huh, Seung Hyun Kim, Jae Hwan Chu, Sung Youb Kim, Ji Hyun Kim and Soon-Yong Kwon. (2014). Enhancement of seawater corrosion resistance in copper using acetone-derived graphene coating. *Nanoscale*, 6, 4379-4386.
- JS. Chen, L. Brown, M. Levendorf, W. Cai, S.-Y. Ju, J. Edgeworth, X. Li, C. W. Magnuson, A. Velamakanni, R. D. Piner, J. Kang, J. Park and R. S. Ruoff, *ACS Nano*, 2011, 5, 1321-1327.
- Kajal, P., Ghosh, K., & Powar, S. (2018). Manufacturing techniques of perovskite solar cells. In *Applications of Solar Energy* (pp. 341-364). Springer, Singapore.
- Keun Oh Park, Jong Ho Lee, Ji Hoon Park, Yong Cheol Shin, Jung Bo Huh, Ji-Hyeon Bae, Seok Hee Kang, Suck Won Hong, Bongju Kim, Dong Jun Yang, Dong-Wook Han & Jeong Hyun Yeum (2016) Graphene oxide-coated guided bone regeneration membranes with enhanced osteogenesis: Spectroscopic analysis and animal study, *Applied Spectroscopy Reviews*, 51:7-9, 540-551, DOI: 10.1080/05704928.2016.1165687.
- Leal-Fonseca, A. P., & Hernández-Molinar, Y. (2018). Evolución de la odontología. *Oral*, 17(55), 1418-1426.
- Li, K., Wang, C., Yan, J., Zhang, Q., Dang, B., Wang, Z., ... & Han, Y. (2018). Evaluation of the osteogenesis and osseointegration of titanium alloys coated with graphene: an in vivo study. *Scientific reports*, 8(1), 1-10.
- Liao, C., Li, Y., & Tjong, S. C. (2018). Graphene nanomaterials: synthesis, biocompatibility, and cytotoxicity. *International journal of molecular sciences*, 19(11), 3564.
- Magaña, J. B., Vera, L. M. D. C. A., Vargas, V. H. O., De la Rosa Rubalcava, S., Diaz, E. Z., Torres, A. D. C. C., ... & Zamora, A. E. B. (2005). Implantes una revolución en estomatología. *Implantes una revolución en estomatología* 4, 23, 16-18.

- Mayavan, S., Siva, T., & Sathiyarayanan, S. (2013). Graphene ink as a corrosion inhibiting blanket for iron in an aggressive chloride environment. *RSC Advances*, 3(47), 24868-24871.
- Muthulingam, Vignarajah. (2017). Practical Finite Element Analysis Linear Static and Dynamic Analysis. Researchgate. 1-25. Recuperado de https://www.researchgate.net/publication/323026605_Practical_Finite_Element_Analysis_Linear_Static_and_Dynamic_Analysis.
- Navarro G. B. (2020). Representación del injerto de implantes. En clínica Navarro, recuperado de www.dentalnavarro.com.
- Nine, M. J., Cole, M. A., Tran, D. N., & Losic, D. (2015). Graphene: a multipurpose material for protective coatings. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(24), 12580-12602.
- OpenLearn (2018). Thermal spraying (Hardfacing). Recuperado de: <https://www.open.edu/openlearn/science-maths-technology/engineering-technology/manupedia/thermal-spraying-hardfacing>.
- Organización Mundial de la Salud (2020). Salud bucodental. Recuperado de <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/oral-health>.
- P. F. Li, H. Zhou and X. Cheng, *Surface and Coatings Technology*, 2014, 254, 298-304.
- Park, C., Park, S., Lee, D., Choi, K. S., Lim, H. P., & Kim, J. (2017). Graphene as an enabling strategy for dental implant and tissue regeneration. *Tissue engineering and regenerative medicine*, 14(5), 481-493.
- Pinto, A. D. M. (2017). Advances in graphene-based materials and their composites with focus on biomedical applications. *Faculdade de engenharia, universdade do porto*. Recuperado de: <https://repositorio-aberto.up.pt/bitstream/10216/103515/2/187467.pdf>.
- Pruna, A., Pullini, D., & Soanca, A. (2017). Graphene-Based Coatings for Dental Implant Surface Modification. In *Carbon-related Materials in Recognition of Nobel Lectures by Prof. Akira Suzuki in ICCE* (pp. 103-116). Springer, Cham.

- Radunovic, M., De Colli, M., De Marco, P., Di Nisio, C., Fontana, A., Piattelli, A., ... & Zara, S. (2017). Graphene oxide enrichment of collagen membranes improves DPSCs differentiation and controls inflammation occurrence. *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, 105(8), 2312-2320.
- Representación de la osteointegración. Dr. Jose L. Molina. (2018). Carga Inmediata Sobre Implantes Dentales. Recuperado de www.maxilofacialeimplantes.com.
- Ríos, J. O., Ventura, R., Mendívil, J. M., & Villegas, A. Complicaciones en implantología bucal. Complicaciones en implantología bucal Reposición dentaria con implante dental/corona metalcerámica Tiempos en el abordaje protésico de tejidos blandos en implantología.
- Rony Joubert (2016). Reposición dentaria con implante dental/ corona metal cerámica. *Implantología actual*, 25, 10-13.
- Shi, Y. Y., Li, M., Liu, Q., Jia, Z. J., Xu, X. C., Cheng, Y., & Zheng, Y. F. (2016). Electrophoretic deposition of graphene oxide reinforced chitosan–hydroxyapatite nanocomposite coatings on Ti substrate. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 27(3), 48.
- Tahir, N. A. M., Abdollah, M. F. B., Tamaldin, N., Zin, M. R. B. M., & Amiruddin, H. (2020). Optimisation of graphene grown from solid waste using CVD method. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 106(1-2), 211-218.
- Tang, X., & Yan, X. (2017). Dip-coating for fibrous materials: mechanism, methods and applications. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 81(2), 378-404.
- Vardelle, A., Moreau, C., Akedo, J., Ashrafizadeh, H., Berndt, C. C., Berghaus, J. O., ... & Dorfman, M. (2016). The 2016 thermal spray roadmap. *Journal of thermal spray technology*, 25(8), 1376-1440.
- Voo, R., Mariatti, M., & Sim, L. C. (2011). Properties of epoxy nanocomposite thin films prepared by spin coating technique. *Journal of Plastic Film & Sheeting*, 27(4), 331-346. <https://doi.org/10.1177/8756087911419745>.

- Wang, X. Y., Narita, A., & Müllen, K. (2017). Precision synthesis versus bulk-scale fabrication of graphenes. *Nature Reviews Chemistry*, 2(1), 1-10.
- Wang, X., Estradé, S., Lin, Y., Yu, F., Lopez-Conesa, L., Zhou, H., ... & Schaefer, L. (2017). Enhanced photoelectrochemical behavior of H-TiO₂ nanorods hydrogenated by controlled and local rapid thermal annealing. *Nanoscale research letters*, 12(1), 336. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2105-x>.
- Xie, Y., Li, H., Zhang, C., Gu, X., Zheng, X., & Huang, L. (2014). Graphene-reinforced calcium silicate coatings for load-bearing implants. *Biomedical Materials*, 9(2), 025009.