

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE AGENTES CLAREADORES EM DENTES

Crisley de Souza Peixoto¹

Renedy Rosemberg Azevedo Schirmer¹

Libardo Andrés González Torres¹

Thiago Parente Lima¹

¹Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri (UFVJM), Instituto de Ciência e Tecnologia, Diamantina, MG.

Resumo: O clareamento dental é um tratamento estético que utiliza produtos à base de peróxido de hidrogênio (H_2O_2) ou peróxido de carbamida ($CH_4N_2O_3$). Esses compostos reagem com as manchas do dente causando sua degradação e, consequentemente, melhora na aparência dos dentes. Contudo, estudos tem demonstrado que a interação dessas substâncias com o tecido pulpar pode causar lesões irreversíveis nos dentes. Este trabalho tem o objetivo avaliar numericamente o processo de transporte do peróxido de hidrogênio durante o procedimento de clareamento dental. A simulação foi realizada a partir de um modelo de geometria tridimensional de um incisivo central direito do maxilar e da equação de conservação da massa em meios porosos acrescida de um termo sumidouro. Além disso, foram adotados parâmetros de simulação de maneira a representar as técnicas de clareamento realizadas em consultório. As análises realizadas mostram que o efeito da pressão na câmara pulpar não pode ser desconsiderado em estudos numéricos ou experimentais in vitro cujo objetivo seja avaliar o campo de concentrações no dente ou medir a massa de peróxido de hidrogênio que penetra na câmara pulpar. No tempo equivalente a uma sessão de clareamento dental, a massa de peróxido de hidrogênio que atinge a câmara pulpar é da ordem de micro gramas. O efeito do termo sumidouro no modelo, que representa a taxa com a qual o agente clareador é consumido durante a reação com as manchas, não deve ser ignorado ao avaliar a quantidade de massa que penetra na polpa. Quando desconsiderada a taxa de reação, a diferença na massa acumulada de peróxido de hidrogênio que penetra na câmara é de cerca de 8% para o tempo de 60 minutos. Esses resultados poderão ser utilizados no aprimoramento de produtos para clareamento de dentes e no auxílio à elaboração de protocolos do procedimento.

Palavras-chave: clareamento dental, peróxido de hidrogênio, OpenFOAM.

1. INTRODUÇÃO

O clareamento dental é um tratamento estético utilizado para melhorar a aparência dos dentes. Atualmente é um dos procedimentos odontológicos mais difundidos e realizados no mundo (Oliveira, 2014). Na literatura são descritos vários métodos e técnicas de clareamento de dentes. Os três principais métodos utilizados podem ser descritos como: clareamento caseiro supervisionado (prescrito e supervisionado por um profissional); clareamento em consultório (realizado pelo profissional); e clareamento caseiro com produtos de auto aplicação (sem supervisão de profissional) (Oliveira, 2014; Petersen, 2012). A principal diferença entre os métodos é a concentração do agente clareador, o tempo de aplicação e o número de sessões (Vaz, 2015).

O procedimento consiste na aplicação de um agente clareador, composto basicamente por peróxido de hidrogênio (H_2O_2) ou peróxido de carbamida ($CH_4N_2O_3$), na superfície da coroa dentária (Pasquali et al., 2014). O peróxido de carbamida, ao entrar em contato com água, se decompõe em peróxido de hidrogênio e ureia, sendo a concentração do H_2O_2 aproximadamente um terço da concentração inicial de $CH_4N_2O_3$ (Francci, 2010; Oliveira, 2014; Petersen, 2012). Portanto, a substância ativa de qualquer clareador dental é o peróxido de hidrogênio.

O mecanismo de clareamento dos dentes não é totalmente conhecido (Cavalli, 2017). Sabe-se que o H_2O_2 é um composto químico instável, com baixo peso molecular, alto poder oxidativo, além de grande capacidade de difusão no esmalte e na dentina (Ferrari, 2004; Gerlach, 2005; Oliveira, 2014). Ao ser aplicado à superfície da coroa dentária, o H_2O_2 se difunde e atua como agente oxidante, produzindo radicais livres que atacam as moléculas orgânicas que causam o escurecimento, degradando-as e criando a percepção de dentes mais brancos (Oliveira, 2014).

Entretanto, uma série de estudos verificaram efeitos adversos provenientes da interação do agente clareador com a estrutura dentária (esmalte e dentina) e também com o tecido biológico, tanto câmara pulpar quanto gengiva. O problema mais frequente e facilmente observado é o aumento da sensibilidade durante o tratamento, o que faz com que alguns pacientes até desistam do tratamento (Dahl; Pallesen, 2003; Oliveira, 2014; Petersen, 2012). Ao atingir a câmara pulpar, o peróxido de hidrogênio pode ocasionar estresse oxidativo desse tecido, gerando sensibilidade e alterações celulares tais como danos ao DNA das células, fragmentação de proteínas e peroxidação de lipídeos induzindo apoptose e necrose celular (Petersen, 2012; Sacono, 2010; Vaz, 2014).

Experimentos *in vitro* mostram que sob condições de tratamento deve haver penetração do peróxido de hidrogênio na câmara pulpar (Bowles; Ugwuneri, 1987; Camargo et al., 2007; Gökay et al., 2000; Hannig et al., 2011; Sacono, 2010). Sabe-se ainda que fatores como concentração do agente clareador, tempo e número de aplicações, associação de fontes de luz e/ou calor e as diferenças morfológicas inerentes aos dentes humanos têm influência direta no transporte do agente clareador em direção à câmara pulpar (Sacono, 2010). Todavia, parâmetros clínicos como concentração, tempo de aplicação e número de aplicações do agente clareador permanecem empíricos devido à falta de estudos quantitativos do processo de transporte do agente clareador no dente (Petersen, 2012).

Existem várias dificuldades ao estudar os parâmetros do clareamento dental, tais como a grande quantidade de fatores que influenciam o fenômeno e a variabilidade de características dentárias dos indivíduos. Seria necessário, portanto, um grande número de experimentos para a compreensão satisfatória do fenômeno e a obtenção de resultados significativos. Assim sendo, faz-se necessário a utilização de métodos alternativos que possibilitem o estudo do problema como um todo e que permita obter resultados quantitativos. Dentre esses métodos destaca-se a simulação numérica de fenômenos biológicos.

Nas últimas décadas, o estudo de problemas biológicos através de métodos de engenharia criou um campo de trabalho interdisciplinar que se mantém em constante crescimento até o presente. Na bioengenharia, os métodos computacionais podem contribuir para a redução dos custos em pesquisa, sendo possível reduzir o número de experimentos e o consumo de materiais de insumo através da predição de resultados com base em simulações numéricas (Freitas Júnior et al., 2007). Por conseguinte, a simulação numérica pode ser empregada no estudo da influência de parâmetros quantitativos envolvidos no clareamento dental.

O objetivo deste trabalho é simular numericamente e analisar o processo de transporte do agente clareador no dente em geometria tridimensional (3D). Dessa maneira, observar, a partir de parâmetros que representam as técnicas de clareamento realizadas em consultório, a distribuição de peróxido de hidrogênio no dente e quantificar a massa dessa substância que penetra na câmara pulpar. Ademais, avaliar a influência de alguns efeitos levados em consideração no modelo.

2. PROCEDIMENTO COMPUTACIONAL

O processo de clareamento foi modelado pela equação de conservação da massa em um meio poroso acrescida de um termo sumidouro, que representa a taxa de reação do peróxido de hidrogênio com as manchas do dente, Eq. (1) (Nield; Bejan, 2006).

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} c) = D_m \nabla^2 c - kc, \quad (1)$$

onde ϕ é a porosidade do meio, c é a concentração do clareador, $\mathbf{v}$ é a velocidade de Darcy, $D_m = \phi D$ é a difusividade no meio poroso, sendo D a difusividade do peróxido de hidrogênio em água, e k é a constante de taxa de reação do peróxido de hidrogênio no dente. No termo sumidouro considera-se uma reação de primeira ordem. A Eq. (1) foi resolvida de forma numérica empregando-se o Método dos Volumes Finitos através do *software* OpenFOAM.

A Fig. 1 mostra o domínio do problema. A geometria foi construída para representar um dente incisivo central direito do maxilar, com base nas referências (Cadnav, 2018; Ferreira *et al.*, 2012; Nelson, 2010). A Fig. 1A representa uma vista isométrica do modelo tridimensional. Já nas Fig. 1B e 1C, estão representados cortes nas seções mesiodistal e labiolingual, respectivamente.

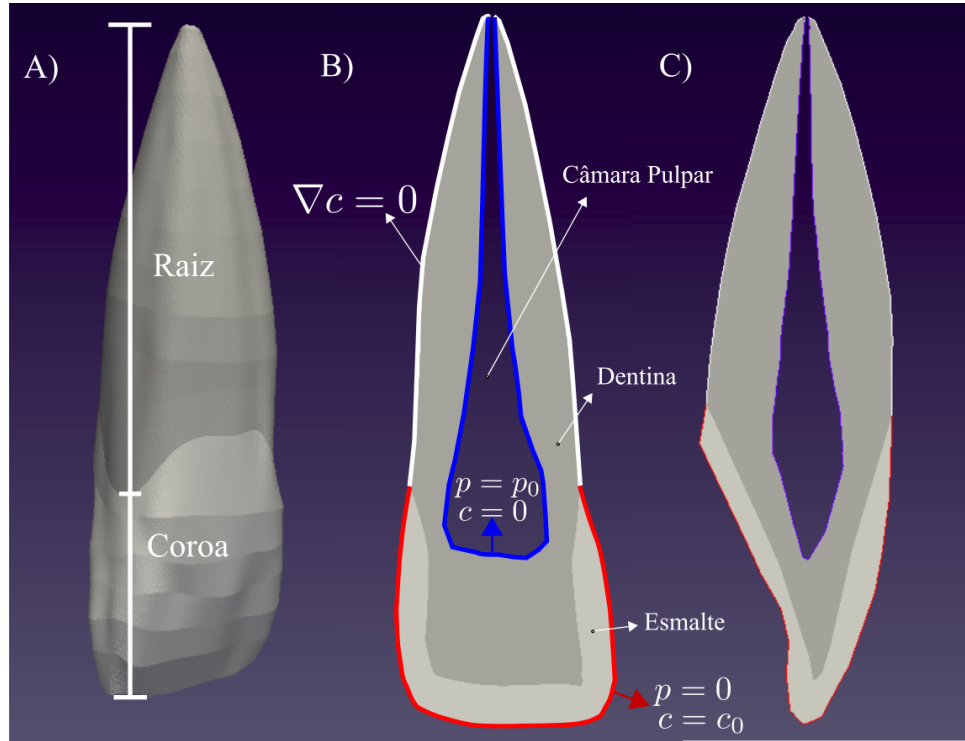


Figura 1: Representação do domínio e condições de contorno

A Eq. (1) está submetida às condições iniciais e de contorno mostradas na Fig. 1, onde p é a pressão. Como condição inicial foi considerado que todo o domínio encontra-se com concentração nula de peróxido de hidrogênio. Como condição de contorno foi atribuída uma concentração constante em toda a superfície externa da dentina e concentração nula no interior da câmara pulpar, o restante da fronteira do domínio foi considerado como impermeável. O fluxo convectivo no meio, modelado pela lei de Darcy, Eq. (2), é gerado a partir do gradiente de pressão existente entre a câmara pulpar e a face exposta do dente. A diferenciação entre as regiões do esmalte e da dentina foi feita atribuindo-se diferentes porosidades para cada região.

$$\mathbf{v} = \frac{K}{\mu} \nabla p \quad (2)$$

As principais propriedades físicas utilizadas na simulação podem ser sintetizadas na Tabela 1:

Tabela 1. Propriedades físicas utilizadas na simulação

Propriedade	Valor	Unidade	referências
Permeabilidade específica (K)	$2,06 \cdot 10^{-7}$	m^2	Camps <i>et al.</i> (1997) ¹
Pressão manométrica na câmara pulpar (p_0)	$3,33 \cdot 10^3$	Pa	Borges <i>et al.</i> (2014)
Porosidade no esmalte (ϕ_e)	$2,60 \cdot 10^{-3}$	-	Dibdin (1969)
Porosidade na dentina (ϕ_d)	$3,08 \cdot 10^{-2}$	-	Magalhães <i>et al.</i> (2008)

Constante de taxa de reação (k)	$1,00 \cdot 10^{-4}$	s^{-1}	Petersen (2012)
Coefficiente de difusão do peróxido de hidrogênio em água (D)	$1,16 \cdot 10^{-9}$	m^2/s	USP Technologies (2017)

¹A permeabilidade específica foi determinada indiretamente, a partir da lei de Darcy, com base nos experimentos realizados pela referência.

A validação numérica do código computacional foi realizada através da comparação com a solução analítica unidimensional da Eq. (1), sem o termo sumidouro, obtida em Mohsen e Paluch (1983) e da comparação com a solução analítica unidimensional da mesma equação, porém, com o termo sumidouro, mas sem o termo convectivo, obtida em Petersen (2012). Ambos os resultados numéricos encontrados concordam com os analíticos.

Em todas as simulações foi utilizado o passo de tempo de 0,1 s com o objetivo de manter o número de Courant inferior a um. A geometria e as malhas foram geradas através do *software* SALOME. Foram construídas três malhas utilizando o algoritmo Netgen 1D-2D-3D. A quantidade de volumes de cada malha foi alterada com base na dimensão linear máxima das células da malha. Construiu-se malhas com as seguintes características: 32.097, 310.929 e 2.786.814 volumes e dimensões lineares máximas de 0,4 mm, 0,2 mm e 0,1 mm, respectivamente.

No estudo de independência da malha foi realizada a comparação entre as malhas a partir do fluxo mássico que penetra na câmara pulpar ao longo do tempo, Fig. 2. Em seguida, calculou-se a diferença percentual dos fluxos das malhas, ou seja, a diferença entre os valores de fluxo de duas malhas dividido pelo fluxo de uma delas, em ordem crescente de volume. O critério utilizado consistiu em selecionar a malha que apresentasse diferença percentual de fluxo menor do que 1%. A malha selecionada foi a de 310.929 volumes com diferença percentual média de 0,6% com relação à malha de maior quantidade de volumes.

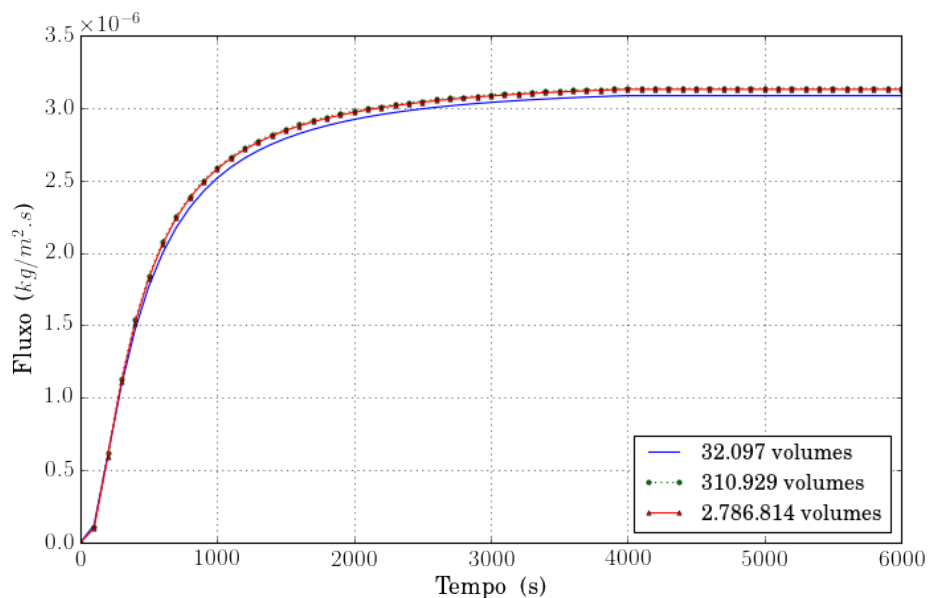


Figura 2. fluxo mássico que penetra a câmara pulpar ao longo do tempo para as três malhas construídas

O tempo de simulação e as concentrações de peróxido de hidrogênio utilizadas na produção dos resultados baseiam-se nas técnicas atuais de clareamento em consultório encontradas em Petersen (2012) e Franci et al. (2010).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O campo de concentrações exibe a distribuição espacial do peróxido de hidrogênio, nos tempos de simulação, portanto auxilia na avaliação qualitativa do fenômeno em estudo. É possível identificar o avanço do agente clareador, sua aproximação da câmara pulpar, e visualizar as concentrações médias nas diversas regiões.

A Fig. 3 mostra as concentrações de peróxido de hidrogênio nas seções mesiodistais (A e C) e labiolinguais (B e D) do domínio computacional. O tempo total das simulações é de 60 minutos e as concentrações de peróxido de hidrogênio na superfície externa são de 35 % v/v ou $507 \text{ kg}_{\text{H}_2\text{O}_2}/\text{m}^3_{\text{solução}}$. Nas Fig. 3A e 3B a simulação foi realizada incluindo todos os termos da Eq. (1). Já nas Fig. 3C e 3D retirou-se apenas o termo de transporte advectivo do modelo, eliminando-se a diferença de pressão entre o ambiente externo e a câmara pulpar. Na ausência do termo advectivo, Fig. 3A e 3B, a distribuição de peróxido de hidrogênio apresenta diferenças expressivas quando comparadas às Fig. 3C e 3D. Frentes de concentração de cerca de $100 \text{ kg}_{\text{H}_2\text{O}_2}/\text{m}^3_{\text{solução}}$ chegam próximas à câmara pulpar, até 0,5 mm, mostrando que o composto se difunde de maneira bem mais acentuada com a ausência do termo de advecção. Na situação *in vivo*, a pressão na

câmara pulpar é superior à pressão externa resultando em um escoamento no sentido oposto ao deslocamento do peróxido de hidrogênio, o que reduz significativamente o avanço das frentes de concentração. Esse escoamento auxilia na proteção do conteúdo pulpar contra potenciais substâncias prejudiciais e bactérias conforme Pashley (1994). A diferença entre os resultados apresentados na Fig. 3 mostra que o efeito da pressão da câmara pulpar não pode ser desconsiderado em estudos numéricos ou experimentos *in vitro* que objetivem medir a massa de peróxido de hidrogênio que penetra na câmara pulpar, bem como a distribuição do peróxido de hidrogênio no dente.

Uma série de estudos apontam os efeitos citotóxicos, ou seja, tóxicos às células, do peróxido de hidrogênio. Em seus experimentos, Hanks (1993) observou que o contato do agente clareador, encontrado em produtos do mercado, com culturas celulares, especificamente fibroblastos, reduzem significativamente a atividade do succinato desidrogenase, complexo enzimático que participa da atividade metabólica de células, sugerindo que o peróxido de hidrogênio é citotóxico. Ribeiro et al. (2009), em estudo realizado com incisivos bovinos em um dispositivo que simula a câmara pulpar, observou efeitos tóxicos, caracterizados por danos em odontoblastos do tipo MDPC-23, quando utilizado peróxido de hidrogênio a 35%. Com base nas evidências de toxicidade do agente clareador, conhecer a massa dessa substância que atinge a câmara pulpar é fundamental para avaliar e propor parâmetros para o procedimento clínico.

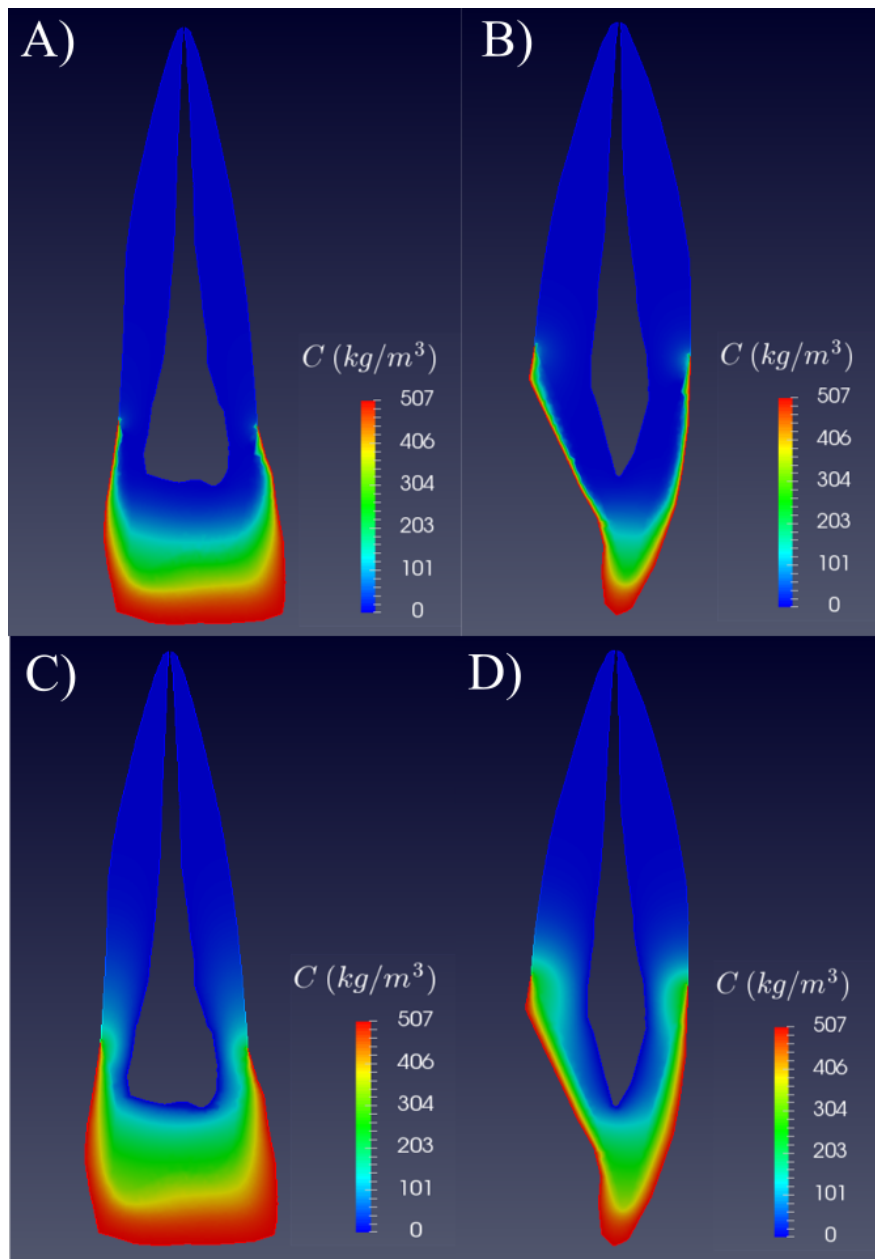


Figura 3. Campos de concentração simulados no tempo de 60 minutos a concentrações de 35 % v/v, 507 kg/m³, na superfície externa. Seções mesiodistais (A e C). Seções labiolinguais (B e D).

A Fig. 4 mostra a massa acumulada de peróxido de hidrogênio que penetra a câmara pulpar ao longo de 60 minutos para concentrações de 20%, 30% e 35% v/v de peróxido de hidrogênio. Em 60 minutos as massas acumuladas na câmara pulpar foram de 16,76, 25,13 e 29,32 μg para concentrações de 20%, 30% e 35%, respectivamente. Quanto

maior a concentração do agente clareador, maior a quantidade de massa acumulada, como previsto pela lei de Fick, visto que um maior gradiente induz um maior fluxo mássico. A diferença entre a massa acumulada se torna mais acentuada em tempos maiores, o que pode ser observado a partir da inclinação das curvas. No tempo de 60 minutos é possível notar que existe uma quantidade significativa de massa de peróxido de hidrogênio que chega até a câmara pulpar. Isso está de acordo com os resultados encontrados na literatura, no sentido de que é esperado que peróxido de hidrogênio atinja a polpa em intervalos de tempo dessa magnitude. Em uma discussão sobre permeabilidade da dentina, Pashley (1994) afirma que o tempo necessário para que moléculas atravessassem uma dentina de 1 a 2 mm está entre 30 e 120 minutos, dependendo do tamanho da molécula. Torres et al. (2013) desenvolveu um estudo mais específico, simulando uma câmara pulpar para avaliar o tempo gasto pelo peróxido de hidrogênio até atingir a polpa. Foram avaliados discos de dentes bovinos de 2 mm de espessura, contendo 1 mm de esmalte e 1 mm de dentina. Nas concentrações de 20% e 35% os tempos de difusão médios foram de 121 minutos e 88 minutos, respectivamente.

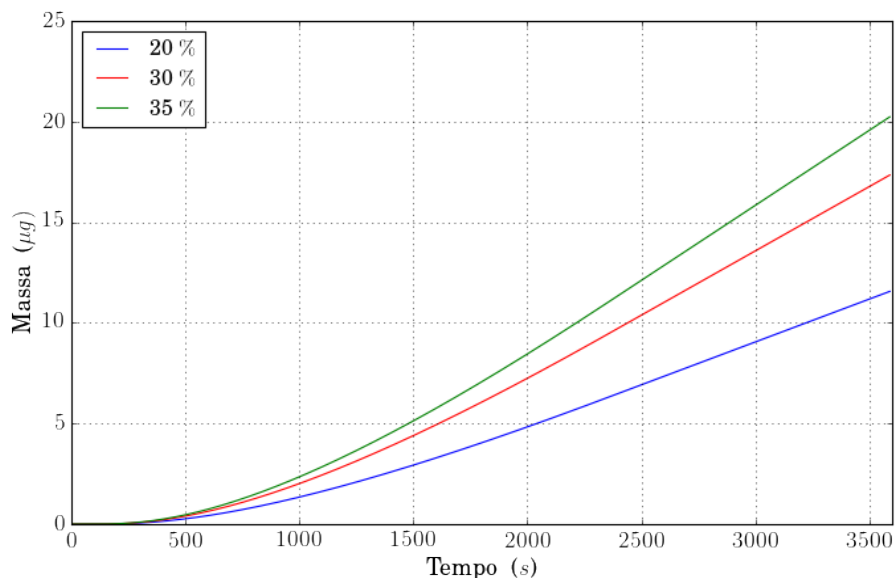


Figura 4. Massa acumulada na câmara pulpar ao longo do tempo.

Em se tratando da quantidade de massa de peróxido de hidrogênio que penetra a câmara pulpar, a ordem de grandeza dos resultados mostrados na Fig. 4 concorda com os experimentos. Em geral, a massa que atinge a polpa está na ordem de micro gramas. Cooper et al. (1992) avaliou a difusão do agente clareador em seções de dentes anteriores humanos, simulando uma câmara pulpar. Os dentes foram cortados de 2 a 3 mm apicais à junção dentina-esmalte. Para uma concentração equivalente a 30% de peróxido de hidrogênio cerca de 40,4 µg de agente atingiu a câmara pulpar em cerca de 15 minutos. Em um trabalho mais recente Omrani et al. (2016) realizou um experimento semelhante ao simular uma câmara pulpar e avaliar a difusão do peróxido de hidrogênio em dentes incisivos humanos do maxilar, com cortes de 2 mm apicais à junção dentina-esmalte. Observou-se uma massa acumulada de cerca de 2,23 µg em um tempo de 20 minutos, aplicando o clareador Opalescence Boost PF (40% H₂O₂ - Ultradent Products Inc., South Jordan, UT, USA).

Estudos numéricos associados ao transporte de agente clareador através do dente são bastante escassos, como notado em Petersen (2012). Ademais, os estudos experimentais já realizados são de difícil reprodutibilidade, seja experimental ou numérica, o que dificulta a validação de modelos computacionais.

No modelo proposto, o termo sumidouro representa a taxa reação do peróxido de hidrogênio com as manchas do dente. A Fig. 5 mostra as curvas de massa acumulada na câmara pulpar ao longo de 60 minutos para concentrações de 35 % v/v. Uma das curvas foi produzida utilizando o modelo da Eq. (1) e a outra foi gerada eliminando-se dessa equação o efeito do termo sumidouro. A massa que penetra na polpa nos instantes iniciais parece ser pouco influenciada pelo termo sumidouro, região onde as curvas quase se sobrepõem. A diferença entre as duas curvas é inferior a 3% até os primeiros 10 minutos. Contudo, essa diferença aumenta para intervalos de tempo maiores. A massa de peróxido de hidrogênio acumulada após 60 minutos com o efeito de reação é cerca de 8 % menor em comparação com a massa sem o termo sumidouro. Como a reação reduz a massa de peróxido de hidrogênio era esperado um valor menor para o modelo com o termo sumidouro presente, como encontrado. Esse resultado sugere que, mantendo-se a mesma concentração de peróxido de hidrogênio, ao longo das seções de tratamento, na medida em que as manchas no dente vão se reduzindo, existe uma maior chance do agente clareador atingir a câmara pulpar.

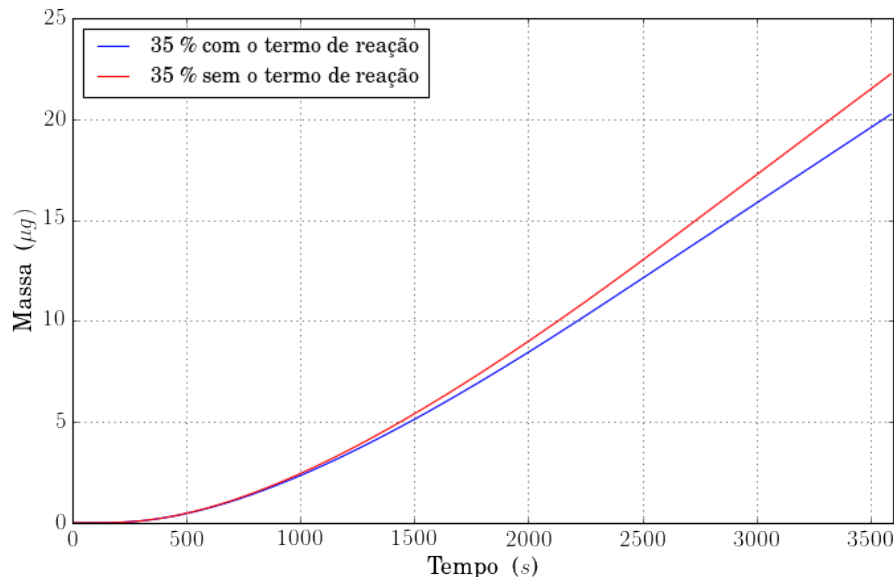


Figura 5. Massa acumulada na câmara pulpar ao longo do tempo.

4. CONCLUSÕES

A diferença expressiva observada nas simulações do transporte de peróxido de hidrogênio com a presença e ausência do termo advectivo na Eq. (1), mostra que a pressão na câmara pulpar não pode ser desconsiderada tanto em análises numéricas quanto em experimentos *in vitro* cujo objetivo seja avaliar a distribuição de concentração de peróxido de hidrogênio no dente ou medir a massa de peróxido de hidrogênio que atinge a câmara pulpar.

Os resultados indicam que massas da ordem de micro gramas devem atingir a câmara pulpar durante o procedimento de clareamento dental no tempo de 60 minutos. Além disso, quanto maior for o tempo ou a concentração maior será a massa acumulada na câmara pulpar.

Embora o termo sumidouro apresente pouca diferença visual no campo de concentrações e na massa acumulada na polpa nos instantes iniciais, para o tempo de 60 minutos a diferença chega a aproximadamente 8%, o que sugere que este termo não pode ser desconsiderado na avaliação do transporte do agente clareador.

O método de análise realizado tem se mostrado promissor no estudo do fenômeno. O processo de simulação tornou possível analisar o fenômeno em geometria tridimensional, variar condições de aplicação do clareador, avaliar o efeito de termos de transporte do modelo e obter resultados quantitativos. Uma vez que o modelo seja validado de maneira adequada será possível utilizá-lo como referência no aprimoramento de produtos para clareamento de dentes e no auxílio à elaboração de protocolos do procedimento.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa de Minas de Gerais (FAPEMIG) pelo apoio financeiro através do Programa de Bolsas de Iniciação Científica e Tecnológica (PIBIC).

6. REFERÊNCIAS

- Borges, A. B., Batista, G. R., Arantes, P. T., Attin, A. W. T., Torres, C. R. G., 2014, "Influence of Simulated Pulpal Pressure on Efficacy of Bleaching Gels", The Journal of Contemporary Dental Practice, v. 15, n. 4, p. 407-412.
- Bowles, W. H., Ugwuneri, Z., 1987, "Pulp chamber penetration by hydrogen peroxide following vital bleaching procedures", Journal of Endodontics, v. 13, n. 8, p. 375-377.
- Camargo, S. E. A., Valera, M. C., Camargos, C. H. R., Mancini, N. G., Menezes, M. M., 2007, "Penetration of 38% hydrogen peroxide into the pulp chamber in bovine and human teeth submitted to office bleach technique. Journal of Endodontics, v. 33, n. 9, p. 1074-1077.
- Cadnav, 2018, "Tooth root resorption 3d model", Disponível em: <<http://www.cadnav.com/3d-models/model-23871.html>>.
- Camps, J., Giustiniani, S., Dejou, J., Franquin, J. C., 1997, "Low versus high pressure for *in vitro* determination of hydraulic conductance of human dentine", Elsevier Science, Archives of Oral Biology, v. 42, n. 4, p. 293-298.
- Cavalli, V., Silva, B. G., Berger, S. B., Abun, G., Marson, F. C., Tabchoury, C. P. M., Giannini, M., 2017, "Effect of Adhesive Restoration and Bleaching Technique on the Concentration of Hydrogen Peroxide In the Pulp Chamber", Operative dentistry, v. 42, n. 2, p. E44-E54.

- Cooper, J. S., Bokmeyer, T. J., Bowles, W. H., 1992, "Penetration of the Pulp Chamber by Carbamide Peroxide Bleaching Agents", *Journal of Endodontics*, v. 18, n. 7, p. 315-317.
- Dahl, J. E., Pallesen, U., 2003, "Tooth bleaching—a critical review of the biological aspects", *Critical Reviews in Oral Biology & Medicine*, v. 14, n. 4, p. 292-304.
- Dibdin, G. H., 1969, "The Internal Surface and Pore Structure of Enamel", *Journal of Dental Research*, v. 48, n. 5, p. 771-776.
- Ferrari, C. K. B., 2004, "Functional foods, herbs and nutraceuticals: towards biochemical mechanisms of healthy aging", *Biogerontology*, v. 5, n. 5, p. 275-289.
- Ferreira, F. V., Ferreira, A. C., Ribeiro, J. A., Santos, R. I. F., 2012, "Mapping of proximal enamel thickness in permanent teeth", *Brazilian Journal of Oral Sciences*, v. 11, n. 4, p. 481-485.
- Franci, C., Marson, F. C., Briso, A. L. F., Gomes, M. N., 2010, "Clareamento dental – Técnicas e conceitos atuais", *Revista da associação paulista cirurgiões dentistas*, ed. Especial, n. 1, p. 78-89.
- Freitas Junior, A. C., Santos, P. H., Assunção, W. G., Rocha, E. P., 2007, "Bioengenharia aplicada á odontologia: método dos elementos finitos versus fotoelasticidade", *ImplantNews*, p. 469-476.
- Gerlach, R. W., Tucker, H. L., Anastasia, M. K., Barker, M. L., 2005, "Clinical trial comparing two hydrogen peroxide tooth whitening systems: strips vs pre-rinse", *Compendium of continuing education in dentistry (Jamesburg, NJ)*, v. 26, n. 12, p. 874-878.
- Gökay, O., Yilmaz, F., Akin, S., Tunçbilek, M., Ertan, R., 2000, "Penetration of the pulp chamber by bleaching agents in teeth restored with various restorative materials", *Journal of Endodontics*, v. 26, n. 2, p. 92-94.
- Hanks, C. T., FAT, J. C., Wataha, J. C., Corcoran, J.F., 1993, "Cytotoxicity and Dentin Permeability of Carbamide Peroxide and Hydrogen Peroxide Vital Bleaching Materials, *in vitro*", *Journal of Dental Research*, v. 72, n. 5, p. 931-938.
- Hannig, C., Weinhold, H. C., Becker, K., Attin, T., 2011, "Diffusion of peroxides through dentine in vitro with and without prior use of a desensitizing varnish. Clinical oral investigations", v. 15, n. 6, p. 863-868.
- Magalhães, M. F., Ferreira, R. A. N., Grossi, P. A., Andrade, R. M., 2008, "Measurement of thermophysical properties of human dentin: Effect of open porosity", *Elsevier, Journal of Dentistry*, v. 36, p. 588-594.
- Mohsen, M. F. N., Baluch, M. H., 1983, "An analytical solution of the diffusion-convection equation over a finite domain", *Applied mathematical modelling*, v. 7, n. 4, p. 285-287.
- Nelson, S. J., 2010, "Wheeler's Dental Anatomy, Physiology and Occlusion", Elsevier Health Sciences.
- Nield, D. A., Bejan, A., 2006, "Convection in porous media", New York: Springer, 2006.
- Oliveira, M. C. S., 2014, "Estudo da rugosidade superficial do esmalte e do sistema antioxidante pulpar em dentes humanos submetidos ao clareamento dental com um pincel de auto-aplicação", Tese (Doutorado) - Universidade Cruzeiro do Sul, São Paulo.
- Omrani, L. R., Taher, A., Albujeer, A., Parvin, M., Daryakenari, G., Firuzjaee, S. G., Kermanshah, H., Chiniforush, N., 2016, "Penetration of hydrogen peroxide into the pulp chamber after conventional and laser-assisted bleaching", v. 71, n. 2, p. 58-61.
- Pasquali, E. L., Bertazzo, C. A., Anziliero, L., 2014, "Estudo dos efeitos do clareamento dental sobre o esmalte: uma revisão das evidências para a indicação clínica", *PERSPECTIVA*, Erechim. v. 38, n.141, p. 99-108.
- Pashley, D. H., 1994, "Dentine permeability and its role in the pathobiology of dentine sensitivity", Elsevier Science, *Archives of Oral Biology*, v. 39, p. 75S-80S.
- Petersen, B. K., 2012, "Quantitative analysis of the diffusion of hydrogen peroxide through teeth", *Dissertação (Mestrado) - University of California, Los Angeles*.
- Ribeiro, A. P. D., Sacono, N. T., Lessa, F. C. R., Nogueira, I., Coldebella, C. R., Hebling, J., Costa, C. A. S., 2009, "Cytotoxic effect of a 35% hydrogen peroxide bleaching gel on odontoblast-like MDPC-23 cells", *Oral Surgery, Oral Medicine, Oral Pathology, Oral Radiology, and Endodontics*, v. 108, n. 3, p. 458-464.
- Sacono, N. T., Coldebella, C. R., Ribeiro, A. P. D., Soares, D. G. S., Trindade, F. Z., Hebling, J., Costa, C. A. S., 2010, "Efeito citotóxico de agentes clareadores a base de peróxido de hidrogênio a 20% e 38% sobre células odontoblastóides", *Revista Odontológica do Brasil Central*, v. 19, n. 48.
- Torres, C. R. G., Souza, C. S., Borges, B. A., Huhtala, M. F. R. L., Caneppele, T. M. F., 2013, "Influence of Concentration and Activation on Hydrogen Peroxide Diffusion through Dental Tissues In Vitro", *The Scientific World Journal*, v. 2013, p. 1-5.
- Vaz, M. M., 2015, "Avaliação da resposta pulpar humana diante de diferentes técnicas de clareamento", *Dissertação (Mestrado em Odontologia) - Universidade Federal de Goiás, Goiânia*.
- USP technologies, 2017, "Coefficient of H₂O₂ Diffusion", Disponível em: <http://www.h2o2.com/technical-library/physical-chemical-properties/physical-properties/default.aspx?pid=21&name=Coefficient-of-Diffusion>.

7. RESPONSABILIDADE AUTORAL

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo deste trabalho.

NUMERICAL SIMULATION OF THE TRANSPORT OF BLEACHING AGENTS IN TEETH

Crisley de Souza Peixoto¹

Renedy Rosemberg Azevedo Schirmer¹

Libardo Andrés González Torres¹

Thiago Parente Lima¹

¹Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri (UFVJM), Instituto de Ciência e Tecnologia, Diamantina, MG.

Abstract. *Tooth bleaching is an aesthetic treatment that uses hydrogen peroxide (H_2O_2) or carbamide peroxide ($CH_4N_2O_3$) based products. These compounds react with the tooth stains causing its degradation and consequently improves the appearance of the teeth. However, studies have shown that interactions of these compounds with pulp tissue can cause irreversible injuries in the teeth. The objective of this work is to analyze numerically the process of transport of hydrogen peroxide during the dental bleaching procedure. The simulation was performed using a three-dimensional geometry model of a maxillary right central incisor and the mass conservation equation in porous media with a sink term. Furthermore, the simulation parameters were selected in order to represent the bleaching techniques performed in office. The analyzes performed have shown that the effect of pressure in the pulp cavity can not be disregarded in numerical or experimental in vitro studies whose objective is to evaluate the field of concentrations in the tooth or to measure the mass of hydrogen peroxide that penetrates the pulp cavity. The mass of hydrogen peroxide that reaches the pulp chamber is of the order of micrograms. The effect of the sink term on the model, which represents the rate at which the bleaching agent is consumed during the reaction with the stains, should not be ignored in assessing the amount of mass entering the pulp. When ignored the reaction rate is ignored, the difference in the accumulated mass which penetrates the pulp chamber is of 8% for the time of 60 minutes. These results may be used to improve tooth whitening products and to assist in the elaboration of procedure protocols.*

Keywords: tooth bleaching, hydrogen peroxide, OpenFOAM.