

## ANÁLISE DE PARÂMETROS ESTRUTURAIS DE UMA LIGA TERNÁRIA DE TITÂNIO

YARA K. C. MELO<sup>1</sup>, JOSÉ R. S. MARTINS JR<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Graduanda em Engenharia Civil, Bolsista PIBIFSP, IFSP, Câmpus Caraguatatuba, y.carneiro@aluno.ifsp.edu.br.

<sup>2</sup> Professor EBTT, IFSP, Câmpus Caraguatatuba, jose.martins@ifsp.edu.br

Área de conhecimento (Tabela CNPq): Engenharia Biomédica – 3.13.00.00-6

**RESUMO:** Este trabalho investiga a liga Ti-50Nb-7Mo para aplicações biomédicas. Utilizando a técnica de difração de Raios X, para analisar sua estrutura, foram determinados o raio atômico e o parâmetro de rede, além de calculadas as densidades experimental e teórica. A análise revelou que a liga possui estrutura cúbica de corpo centrado (CCC). Essas propriedades são essenciais para garantir a biocompatibilidade do material, importante para a fabricação de dispositivos ortopédicos.

**PALAVRAS-CHAVE:** nióbio; biomaterial; difração de raios x; densidade; biocompatibilidade.

### 1 INTRODUÇÃO

Desde os primórdios da civilização, a evolução humana tem estado ligada ao conhecimento e à manipulação de materiais, refletida nas denominações das eras, como a “Idade da Pedra” e a “Idade do Ferro”. Atualmente, esses materiais são usados de forma sofisticada em várias áreas, incluindo a saúde, onde os biomateriais são projetados para substituir funções do organismo e se integrar ao tecido vivo de maneira biocompatível.

No passado, o primeiro biomaterial metálico utilizado foi o “Aço Vanádio Sherman”, atualmente, sabe-se que este apresenta citotoxicidade, assim como o alumínio, que pode liberar íons nocivos. Neste sentido, o titânio e suas ligas são exemplos de biomateriais com propriedades desejáveis, como baixo módulo de elasticidade e alta resistência à corrosão.

Além disso, ao falar-se em implantes ortopédicos, estes devem apresentar alta resistência mecânica à tração, compressão e cisalhamento bem como a resistência à fadiga dinâmica, que pode causar desgaste e falhas ao longo do tempo. Implantes, como placas ósseas, devem ter resistência mecânica, peso e densidade adequados, evitando degradação e corrosão que possam afetar a biocompatibilidade e provocar reações adversas.

O titânio e suas ligas, como a Ti-50Nb-7Mo, se destacam pela alta resistência, biocompatibilidade e menor peso, tornando-se alternativas vantajosas em relação ao aço inoxidável. Contudo, o titânio apresenta limitações, como a baixa resistência ao estresse e à reabsorção óssea, essenciais para suportar as tensões geradas pela movimentação. Por isso, a adição de ligas, como nióbio e molibdênio, é necessária para melhorar essas propriedades.

Neste sentido, pesquisas recentes buscam alternativas à liga Ti-6Al-4V, destacando elementos como nióbio, zircônio, molibdênio e tântalo, que podem melhorar as propriedades das ligas de titânio. A combinação de titânio, molibdênio e nióbio é uma alternativa promissora, e este estudo visa caracterizar essa nova liga em termos de estrutura e densidade, para possíveis aplicações em implantes ortopédicos.

## **2 TEORIA**

Segundo Wilson (2018), a implantação de biomateriais é uma das estratégias mais eficazes para salvar e prolongar vidas. As características desses materiais estão diretamente ligadas às suas funções. No caso de implantes ortopédicos, Park e Lakes (2007) enfatizam a importância da compatibilidade biomecânica, garantindo uma interface estável entre o tecido ósseo e o implante, que deve suportar as cargas aplicadas sem rigidez excessiva, além de ter alta resistência mecânica à tração, compressão e cisalhamento.

As propriedades mecânicas e químicas do titânio, presente na liga Ti-50Nb-7Mo, fazem dele uma alternativa vantajosa em relação ao aço inoxidável. Atualmente, aproximadamente 1000 toneladas de ligas de titânio são utilizadas anualmente em biomateriais, devido à sua alta resistência mecânica, biocompatibilidade e resistência à corrosão.

Entretanto, o titânio apresenta limitações, como a baixa proteção contra estresse e reabsorção óssea, essenciais para implantes que suportam tensões elevadas. Portanto, a adição de ligas é necessária para melhorar sua resistência e durabilidade. Park e Lakes (2007) ressaltam que metais como o nióbio, abundante no Brasil, são utilizados para aumentar a resistência ao desgaste das ligas de titânio.

O titânio é um material dimórfico que, a partir de 882,5°C, muda de fase alfa para beta, favorecendo características como hiperelasticidade e biocompatibilidade. Santos (2021) indica que a adição de nióbio e molibdênio estabiliza o titânio em temperatura ambiente. O nióbio é encontrado em rochas de silicato de carbono e o Brasil possui cerca de 98% dos depósitos mundiais (Vasconcelos e Chaves, 2019). As

ligas Ti-Nb estão em crescente uso na ortopedia, em parte devido à capacidade do nióbio de sofrer deformação plástica sem ruptura.

O molibdênio (Mo) possui alto ponto de fusão e dureza. Lide (2004) aponta que quase todos os aços de ultra-alta resistência contém molibdênio. As ligas Ti-Mo melhoram a conformabilidade e a resistência mecânica.

A biocompatibilidade do molibdênio é um campo em estudo. Toschka (2022) afirma que ele não induz citotoxicidade em fibroblastos humanos e se mantém estável em implantes reabsorvíveis por pelo menos 6 meses. Redlich (2020) mostra que o molibdênio não se acumula no organismo e é excretado pelo sistema renal, confirmando sua viabilidade para implantes ósseos. Jarabo (2024) também valida sua baixa citotoxicidade.

Portanto, a caracterização das ligas Ti-Mo-Nb em termos de estrutura cristalina e densidade é crucial para futuros usos como biomateriais.

### 3 MATERIAL E MÉTODOS

As amostras foram produzidas (2015) e fornecidas pelo Laboratório de Anelasticidade e Biomateriais da Faculdade de Ciências de Bauru da UNESP, sob a coordenação do Prof. Dr. Carlos Roberto Grandini. Ainda, as medições de raios X foram realizadas em um difratômetro Rigaku modelo D/Max 2100/PC, com radiação  $\text{Cu-K}\alpha = 1,544 \text{ \AA}$ , disponível na mesma faculdade e adquirido por meio do Programa Multiusuários da FAPESP.

Para calcular os parâmetros da estrutura cristalina da liga Ti-50Nb-7Mo, foram usados dados experimentais obtidos em laboratório. Para isso, foram calculados o parâmetro de rede e o raio atômico da liga estudada a partir do difratograma obtido e dos cálculos fundamentados por CALLISTER (1999), segundo as equações (1, 2 e 3).

$$d_{hkl} = \frac{\lambda}{2\text{sen}\theta} \quad (1)$$

em que:

$d_{hkl}$  - espaçamento interplanar;

$\lambda$  - comprimento da onda;

$2\theta$  - ângulo de difração.

$$d_{hkl} \times \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = a \quad (2)$$

em que:

$a$  - parâmetro de rede da amostra

$d_{hkl}$  - espaçamento interplanar;

h, k e l - dimensões do plano cristalográfico (h, k e l).

$$R = \frac{a\sqrt{3}}{4} \quad (3)$$

em que:

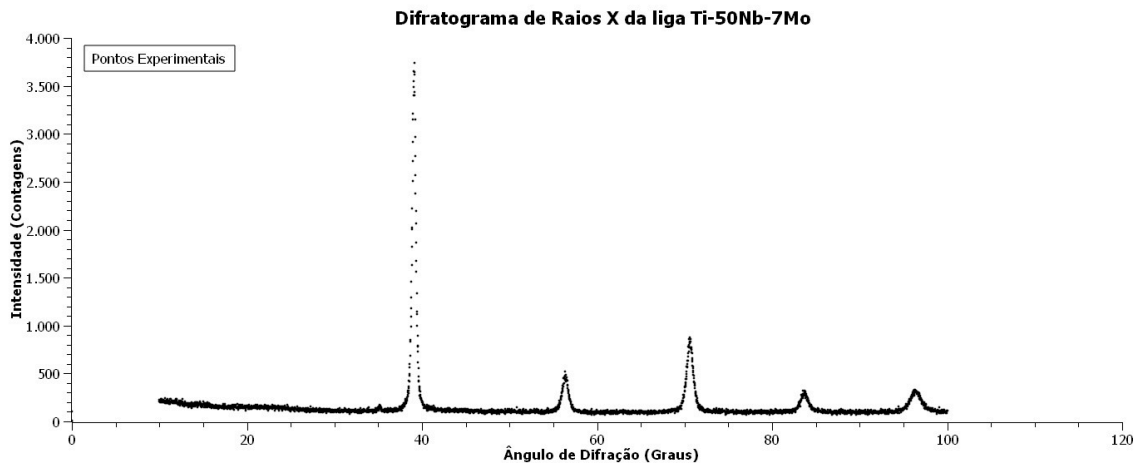
R - raio atômico;

a - parâmetro de rede da amostra;

#### 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com base nas amostras produzidas, foi gerado o gráfico do difratograma conforme a FIGURA 1 a seguir:

FIGURA 1. Gráfico do Difratograma liga Ti-50Nb-7Mo.



Fonte: Autor (2024)

Desta forma, os resultados correspondentes à aplicação das equações (1), (2) e (3), foram dispostos em uma tabela, como mostrado a seguir:

TABELA 1. Dados Cristalográficos.

Plano	$\sqrt{h^2 + k^2 + l}$	$\theta$ (graus)	$\text{sen}(\theta)$	$\lambda$ (nm)	$d_{hkl}$ (nm)	a(nm)	R(nm)
101	1,4142	19,55	0,3346	0,1544	0,2307	0,3270	0,1416
200	2,0000	28,32	0,4744	0,1544	0,1627	0,3277	0,1419
211	2,4495	35,31	0,5780	0,1544	0,1336	0,3278	0,1419
220	2,8284	41,76	0,6660	0,1544	0,1159	0,3272	0,1417
310	3,1623	48,13	0,7446	0,1544	0,1037	0,3282	0,1421

Após os cálculos, foram determinados os valores médios, desvios padrões e erros padrões do parâmetro de rede e do raio atômico da amostra, conforme Tabela 2 a seguir:

TABELA 2. Dados Cristalográficos.

Medida	$a$ (nm)	$R$ (nm)
Valor Médio	0,3276	0,1418
Desvio Padrão	0,0005	0,0002
Erro Padrão	0,0002	0,0001

Assim, análise através do difratômetro revelou que a liga possui uma estrutura cúbica de corpo centrado (CCC), que é associada a boas propriedades mecânicas, como ductilidade e resistência à fadiga, características essenciais para materiais destinados a suportar cargas dinâmicas e tensões repetidas em ambientes biológicos.

Desta forma, a partir dos cálculos dos parâmetros cristalográficos, foram obtidos valores médios para o parâmetro de rede ( $0,3276 \pm 0,0002$  nm) e para o raio atômico ( $0,1418 \pm 0,00009$  nm), que estão dentro das expectativas para ligas de titânio e corroboram a hipótese de que a combinação de titânio, nióbio e molibdênio pode melhorar tanto as propriedades mecânicas quanto a biocompatibilidade dos implantes

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Com o estudo apresentado, observa-se que o nióbio, material abundante no Brasil, melhora a resistência ao desgaste e a biocompatibilidade do titânio, tornando a liga Ti-50Nb-7Mo uma alternativa mais sustentável e economicamente viável em comparação com ligas tradicionais como o Ti-6Al-4V. O molibdênio, embora ainda em estudos, mostra-se promissor pela baixa citotoxicidade e estabilidade química, sugerindo que sua adição pode aumentar a durabilidade do material sem comprometer a saúde do paciente.

Além disso, a estrutura CCC da liga favorece a deformação plástica, permitindo melhor adaptação às exigências biomecânicas de implantes. Contudo, este trabalho abre caminho para o desenvolvimento de biomateriais ortopédicos que combinem titânio, nióbio e molibdênio, oferecendo vantagens como redução da rigidez e melhora na integração óssea, além de benefícios econômicos e sustentáveis devido à abundância de nióbio no Brasil.

## REFERÊNCIAS

- CALLISTER JR, William D. **Ciência e Engenharia de Materiais: Uma introdução**. 5. ed. Salt Lake City: LTC, 1999. 623 p.
- WILSON, Dr J. **Metallic Biomaterials: State of the Art and New Challenges**. Department of Bioelectronics and Biosensors, Alagappa University, Karaikudi, Tamilnadu, Índia.
- PARK, Joon; LAKES, R. S. **Biomaterials: An Introduction**. 3. ed. New York, NY, USA: Springer, 2007. 561 p. ISBN 978-0-387-37879-4.
- Toschka, A.; Pöhle, G.; Quadbeck, P.; Suschek, C.V.; Strauß, A.; Redlich, C.; Rana, M. **Molybdenum as a Potential Biocompatible and Resorbable Material for Osteosynthesis in Craniomaxillofacial Surgery—An In Vitro Study**. *Int. J. Mol. Sci.* 2022, 23, 15710. <https://doi.org/10.3390/ijms232415710>
- REDLICH, Christian; QUADBECKA, Peter; THIEME, Michael; KIEBACK, Bernd. **Molybdenum: A biodegradable implant material for structural applications?**. Elsevier: *Acta Biomaterialia*, Germany, v. 104 (2020) 241–251, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2019.12.031>
- JARABO, Maria-Elisa Prieto; REDLICH, Christian; SCHAUER, Antje; ALVES, Paula Ketilly Nascimento; GUDER, Celine; POEHLE, Georg; WEISSGAERBER, Thomas; ADAMS, Volker; KAPPERTF, Utz; EL-ARMOUCHE, Ali; LINKE, Axel; WAGNER, Michael. **Bioresorbable molybdenum temporary epicardial pacing wires**. Elsevier: *Acta Biomaterialia*, Germany, v. 21:12, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2024.02.039>
- SANTOS, Guilherme Hernandes de Oliveira; BATISTA, Cauan Ferrara; OIKAWA, Lucas Satoshi Cipriano; MARTINS JR, José Roberto Severino. **Determinação da Densidade Experimental de uma Liga de Titânio para Aplicações Biomédicas**. *Rev. Bras. de Iniciação Científica (RBIC)*. Orientador: Prof. Dr. José Roberto Severino Martins Junior. 2020. Artigo (Curso Técnico de Eletrônica Integrado ao Ensino Médio) - Instituto Federal de São Paulo, Campus Avançado Tupã, Itapetininga, v. 8, ed. 021007, p. 1-18, 2021.
- LIDE, D. R. **CRC Handbook of chemistry and physics: a ready-reference book of chemical and physical dat.** 85 ed. CRC Press, 2004, p. 2712.
- VASCONCELOS, Yuri; CHAVES, Léo Ramos. **O polêmico nióbio**. *Pesquisa FAPESP: tecnologia mineração*, Araxá, ed. 277, p. 64-69, Mar 2019.