Aus der Poliklinik für Kieferorthopädie der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf Direktor: Univ. - Prof. Dr. Dieter Drescher

# Digitales Design und digitale Fertigung verschiedener Transpalatinalbögen aus Polyetheretherketon (PEEK) und Bestimmung der Kräftesysteme

# **Dissertation**

zur Erlangung des Grades eines Doktors der Zahnmedizin der Medizinischen

Fakultät der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Cornelia Mieszala

2022

Als Inauguraldissertation gedruckt mit Genehmigung der Medizinischen Fakultät der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Gez.:

Dekan: Prof. Dr. med. Nikolaj Klöcker Erstgutachter: Univ. - Prof. Dr. Dieter Drescher Zweitgutachter: Prof. Dr. Dr. Jörg Handschel

Teile dieser Arbeit wurden veröffentlicht:

Mieszala, C., Schmidt, J.G., Becker, K., Willmann J.H., Drescher, D. (2022), Digital Design of Different Transpalatal Arches made of Polyether Ether Ketone (PEEK) and Determination of the Force Systems. Applied Sciences, (12) 1590

# I. Zusammenfassung (deutsch)

Das Ziel dieser Studie bestand darin zu untersuchen, ob sich das für (zahn-) medizinische Anwendungen zugelassene Polymer Polyetheretherketon (PEEK) auch für die Herstellung kieferorthopädischer Behandlungsgeräte eignet. Dies sollte am Beispiel einer Apparatur zur transversalen Erweiterung des Oberkieferzahnbogens überprüft werden.

Im Rahmen der Studie wurde ein vollständig digitaler Workflow entwickelt, eine elastostatische Analyse in Form einer Finite Elemente Analyse (FEA) sowie ein biomechanischer *in vitro*-Versuch durchgeführt.

Das verwendete Polymer PEEK ist ein biokompatibler Hochleistungskunststoff. PEEK kann subtraktiv gefräst oder - zurzeit noch mit Einschränkungen - 3D gedruckt werden. In der Zahnmedizin wird PEEK bereits für dentale Implantate und für herausnehmbaren und festsitzenden Zahnersatz verwendet. Allerdings sind bisher nur wenige Studien über die Anwendung von PEEK in der Kieferorthopädie bekannt.

Die Grundlage der Studie bildete ein digitales Oberkiefermodell in Form eines STL Datensatzes aus der Poliklinik für Kieferorthopädie der Universität Düsseldorf. Auf dieser Basis wurden mittels einer Open-Source Software im Computer Aided Design (CAD ) -Verfahren unterschiedliche Apparaturen zur transversalen Expansion des Zahnbogens, sogenannte Transpalatinalbögen (TPAs), konstruiert. Aus einer Vielzahl von Geometrien und Dimensionierungen wurden vier Apparaturen ausgewählt, die Kräfte und Drehmomente im zuvor definierten Bereich erzeugen konnten. Diese wurden anschließend in einem Dentallabor mittels einer Fünf-Achsen-Fräsmaschine im Computer Aided Manufacturing (CAM) -Verfahren aus PEEK gefertigt. Die FEA erfolgte mit der Open-Source-Software FEBio, und die biomechanische Analyse wurde mit dem robotergestützten Messsystem RMSBiomech durchgeführt.

Die Ergebnisse der Analysen zeigten, dass die digital konstruierten TPAs grundsätzlich therapeutisch günstige Kräfte und Drehmomente auf die ersten oberen Molaren übertragen konnten. Mithilfe der FEA war es zudem möglich, die von Mises-Spannungen und die Verformungen der jeweiligen Apparaturen in allen drei Raumebenen darzustellen.

Die durchgeführten Analysen und Versuche zeigten, dass sich PEEK prinzipiell als Material für die Herstellung von Apparatur zur transversalen Erweiterung des Oberkieferzahnbogens eignet.

# II. Zusammenfassung (englisch)

The present study aimed to investigate whether the polymer Polyether Ether Ketone (PEEK), which has been approved for medical and dental applications, is also suitable for the production of orthodontic treatment appliances.

For this purpose, a digital workflow was developed. Using a Computer Aided Design (CAD) – software, various appliances for maxillary arch expansion were designed and manufactured by a milling machine (CAM) out of PEEK. An elastostatic analysis was conducting employing the finite element method (FEM), and a biomechanical *in vitro* test were performed to investigate the forces and moments acting on the first upper molars.

PEEK is a high-performance polymer with excellent biocompatibility. It can be milled and is – with some limitations – also 3D-printable. In dentistry, PEEK is already used for dental implants as well as for removable and fixed dentures. However, only few studies investigated the use of PEEK in orthodontics.

For this study, a randomly selected plaster model from the archive of the Department of Orthodontics, University Clinics of Dusseldorf was scanned to gain a digital model. A set of digital appliances for maxillary arch expansion (TPAs) were designed using an open-source CAD software. Out of a number of possible designs, four TPAs were selected and manufactured by milling out of PEEK. The FEM was performed with the open-source software FEBio, and the biomechanical in vitro test was carried out by the measurement system RMSBiomech, which mainly comprised a robotic arm and a 3D-forcemoment sensor.

The FEM and the biomechanical tests showed appropriate forces and moments acting on the first upper molars. In addition, the FEM allowed the calculation of the von Mises stresses and the deformations of the respective appliances in all three dimensions.

Finally, with the help of the FEM and the in vitro testing it was possible to show that the CAD/CAM fabricated PEEK TPAs might be a promising alternative to conventional materials.

# III. Abkürzungsverzeichnis

CAD	Computer Aided Design
CAM	Computer Aided Manufacturing
FEA	Finite Elemente Analyse
GPa	Gigapascal
PEEK	Polyether Ether Ketone
SLM	Selective Laser Melting
TMA	Titan-Molybdän-Alloy
TPA	Transpalatinalbogen
WZ	Widerstandszentrum

# IV. Inhaltsverzeichnis

1.	Einl	EITUNG	1								
1	.1	Digitalisierung in der Kieferorthopädie	.1								
1	.2	Neue Materialien in der Kieferorthopädie									
1	.3	Der Transpalatinalbogen	.4								
1	.4	Analysemethoden	.5								
1	.5	Ethikvotum	.7								
1	.6	Ziele der Arbeit	.8								
2.	Рив	LIZIERTE ORGINALARBEIT:	8								
Digi	tal De	esign of Different Transpalatal Arches Made of Polyether Ether Ketone (PEEK) and									
Dete	RMIN	ation of the Force Systems, Cornelia Mieszala; Jens Georg Schmidt; Kathrin Becker; Jan Hinrich									
WILI	LLMANN; DIETER DRESCHER, APPLIED SCIENCES, VOLUME 12, ISSUE 3, 1590, (2022)										
3.	Disk	Diskussion9									
4.	Schlussfolgerung										
5.	LITERATUR- UND QUELLENVERZEICHNIS										
6.	Anhang15										
7.	Dan	KSAGUNG	16								

# 1. Einleitung

### 1.1 Digitalisierung in der Kieferorthopädie

Die Herstellung kieferorthopädischer Behandlungsapparaturen erfolgt heutzutage noch überwiegend auf dem klassischen analogen Weg. Hierbei werden die Apparaturen, durch den Zahntechniker händisch auf einem Gipsmodell des Patienten gefertigt.

Mit der weiteren Verbreitung von (intraoralen-) Scannern und anschließender Generierung virtueller Modelle, in Form von digitalen Modelldatensätzen, entwickeln sich digitale Prozessketten auch in der Kieferorthopädie.

Im Vergleich zur konventionellen Abformung, mit Abformlöffel und plastischer Abformmasse bietet die digitale Abformung mit anschließender Erzeugung eines digitalen Modelldatensatzes zahlreiche Vorteile.

Mehrere Studien belegen, dass die Abformung mittels intraoralem Scanner zeitsparender und in der Präzision mit der analogen Abformungen vergleichbar oder besser ist (1–5). Zudem empfinden die meisten Patienten (vor allem Kinder und Jugendliche) die digitale Abformung als angenehmer (6–9).

Ein elementarer Bestandteil der kieferorthopädischen Diagnostik und Therapieplanung ist die Analyse von Kiefermodellen. Diese erfolgt bisher konventionell mit Messzirkel und Schieblehre oder computergestützt anhand zweidimensionaler Scans. Durch die Digitalisierung entfällt das physische Modell, und die Modellanalyse kann am dreidimensionalen digitalen Modell durchgeführt werden. Hierzu stehen dem kieferorthopädischen Behandler heute verschiedene Softwaretools zur Verfügung, welche durch voreingestellte Analysen und automatische Ermittlung von Referenzpunkten eine schnelle und präzise Modelauswertung ermöglichen (10,11).

Die physische Archivierung der Gipsmodelle erfordert in der Praxis erheblichen Lagerraum. Die digitalen Modelldatensätze hingegen können auf dem Server oder in der Cloud platzsparend gespeichert werden. Dies reduziert einerseits die Lagerkapazität und hat den weiteren Vorteil, dass die Patientendaten einfach wieder aufgerufen und, wenn nötig, an Gutachter, Kollegen oder Labore weitergeleitet werden können.

Zudem können die virtuellen Modelle zur direkten Patientenberatung und zur Simulation der kieferorthopädischen Behandlung genutzt werden.

Über die diagnostische Anwendung hinaus bilden virtuelle Modelle von Ober- und Unterkiefer die Basis zur Herstellung kieferorthopädischer Behandlungsapparaturen im Computer Aided Design/ Computer Aided Manufacturing (CAD/CAM) -Verfahren. 2012 und 2015 veröffentlichten Al Mortali et al zwei Studien, in denen sie erstmalig rein virtuelle konstruierte und vollständig digital gefertigte - im additiven 3D-Druck Verfahren hergestellte - kieferorthopädische Behandlungsapparaturen vorstellten. Diese "Prototypen" eigneten sich noch nicht zum dauerhaften intraoralen Verbleib. Hierbei fehlte die Biokompatibilität des Basismaterials (Acryl-Kunststoffe) und die Federelastizität der gedruckten Halteelemente (12,13).

Eine weitere Pilotstudie zur CAD/CAM-Herstellung herausnehmbarer orthodontischer Apparaturen veröffentlichten van der Meer et al 2016. Sie zeigten einen volldigitalen Workflow ohne physische Modelle zur Herstellung einer aktiven Platte mit Dehnschraube, sowie eine Retentionsapparatur. Die Halteelemente wurden digital entworfen und per Biegeroboter gebogen. Die Basisplatten fertigten sie aus einem Kunststoff mittels 3D-Druck an. Die Apparaturen wiesen eine sehr gute Passform auf (14).

Graf et al zeigten 2017 und 2018 anhand von Gaumennahterweiterungsapparaturen, sowie 2019 anhand einer auf Mini-Implantaten verankerten Molarendistalisierungs-Apparatur die Möglichkeit, kieferorthopädische Apparaturen aus Metall im CAD/CAM-Verfahren herzustellen. Nach der Digitalisierung der intraoralen Situation mittels Intraoralscanner wurden diese Geräte mithilfe einer speziellen Software virtuell designt und anschließend im 3D-Laser-Schmelz-Verfahren additiv gefertigt. Die Dehn- bzw. Distalisierungsschrauben wurde nach dem Druck manuell durch Laserschweißen in die Basis eingefügt (15,16). Dieser Workflow wird heute zur Herstellung von Transpalatinal- oder Lingualbögen, für Herbst-Scharniere und für komplexe Konstruktionen auf skelettaler Verankerung angewendet (17–20).

Weitere Ansätze zur CAD/CAM-Herstellung in der Kieferorthopädie finden sich im Bereich der Retention. 2015 veröffentlichten Wolf et al eine Studie über einen neuen CAD/CAM-gefertigten Lingualretainer. Dieser hochpräzise, individuell computerunterstützt konstruierte Retainer wird maschinell aus einem Nickel-Titan-Blech per Hochdruck-Wasserstrahl (zweidimensionales Verfahren) herausgelöst (21).

Frey et al und Cole et al beschrieben 2018/ 2019 einen vollständigen digitalen Workflow von 3Dgedruckten Kunststoffretainern. Diese schienen allerdings nicht langfristig geeignet zu sein, da sie innerhalb einiger Monate aufgrund von Brüchen wieder entfernt werden mussten (22,23).

Mit dem Fortschritt der additiven und subtraktiven CAM-Verfahren werden stetig neue Materialien für den dentalen Bereich angeboten.

In dieser Studie sollte untersucht werden, ob sich das für (zahn-) medizinische Anwendungen zugelassene Polymer Polyetheretherketon (PEEK) für die Herstellung kieferorthopädischer Behandlungsgeräte eignet.

# 1.2 Neue Materialien in der Kieferorthopädie

Mit dem Fortschritt der computergestützten Fertigungstechniken, sowohl additiver als auch subtraktiver Methoden, werden neue Materialien für den Dentalmarkt entwickelt, welche auch für die Kieferorthopädie von Bedeutung sind.

Bei der additiven Technik werden die Apparaturen im 3D-Druck hergestellt. Dieses Verfahren ist sowohl für Kunststoffe, als auch für Metalle anwendbar. Die aktuell auf dem Dentalmarkt angebotenen druckbaren Kunststoffe sind noch größtenteils nur zum temporären Verbleib im Mund geeignet und werden in der Kieferorthopädie zur Herstellung von Insertionsschablonen für Mini-Implantate und OP-Splints für die Orthognathe Chirurgie verwendet (24–26).

Beim Metall-3D-Druck hat sich das selektive Laserschmelzen (Selective Laser Melting, SLM) als geeignetes Verfahren erwiesen (27) und wird bereits zur Herstellung von Mini-Implantat- oder zahngetragene Apparaturen bzw. Herbst-Scharnieren genutzt (28,29).

Beim subtraktiven Verfahren werden die Apparaturen aus einem Metall- oder einem Kunststoffblock (Ronde) herausgefräst. In der Kieferorthopädie werden hier zum Beispiel aus einer Nickel-Titan-Legierung individuell gefräste Retainer angeboten (30).

Diese Studie untersucht das Polymer Polyetheretherketon (PEEK), ein hochtemperaturbeständiger, thermoplastischer und biokompatibler Kunststoff, der für die Anwendung in der Medizin und Zahnmedizin zugelassen ist. Unbehandeltes PEEK ist nahezu röntgentransluzent und verursacht somit keine Artefakte bei sämtlichen bildgebenden Verfahren. Durch verschiedene Zusätze kann die Röntgenopazität und auch das Osseointegrationsverhalten erhöht werden (31). PEEK ist leicht fräsbar und - mit Einschränkungen - auch 3D druckbar (32).

In der Zahnmedizin ist das Material wegen seines knochenähnlichen Elastizitätsmoduls von 3-5 GPa vor allem als Alternative zu Titan und Keramik für dentale Implantate interessant (33). Neben Zahnimplantaten eignet sich PEEK auch als Material für festsitzenden und herausnehmbaren Zahnersatz (34,35). Naturbelassenes PEEK hat eine hellbeige Farbe und kann durch Zugabe von Metalloxidpigmenten heller (zahnfarben) eingefärbt werden. Das Material ist metallfrei, geschmacksneutral, und derzeit sind keinerlei Unverträglichkeiten oder Allergenität bekannt. Zudem ist die Oberfläche gut polierbar, wodurch es einen angenehmen Tragekomfort bietet und eine geringe Plaqueaffinität besitzt (36).

In der Kieferorthopädie könnte PEEK eine metallfreie, ästhetische Alternative für kieferorthopädische Behandlungsapparaturen darstellen. In der Literatur finden sich bereits einige Anwendungen für den kieferorthopädischen Bereich. Ierardo et al beschrieben 2017 die Herstellung herausnehmbarer und festsitzender Platzhalter aus PEEK (37). In weiteren Studien wurde die Verwendung von PEEK als Bogenmaterial für die feste Behandlungsapparatur, entweder als Vollbogenmaterial oder als Ummantelung eines Metalldrahtes, beschrieben (38,39).

In dieser Studie sollte analysiert werden, ob sich PEEK grundsätzlich auch für die Herstellung aktiver orthodontischer Behandlungsgeräte eignen könnte. Dies sollte am Beispiel verschiedener digital entworfenen Transpalatinalbögen (TPAs) untersucht werden.

### 1.3 Der Transpalatinalbogen

Transpalatinalbögen (TPAs) werden in der Kieferorthopädie aktiv zumeist zur Einstellung der Molaren und als Verankerungseinheit eingesetzt. Bei der dreidimensionalen Bewegung von Molaren geht es um die Veränderung der transversalen Oberkieferbreite, um die Rotation gedrehter Molaren oder um die Einstellung des Torques bzw. Kombinationen daraus.

Der klassische TPA besteht aus einem runden Stahldraht der Stärke 0,8 - 0,9 mm und verbindet die beiden ersten oberen Molaren miteinander. Durch einen mittig eingebogenen Loop ist der Bogen transversal komprimier- bzw. expandierbar, und über die palatinalen Molarenschlösser können Rotation und Torque eingebogen werden.

Mehrere Studien konnten nachweisen, dass der Transpalatinalbogen nach Goshgarian aufgrund seiner Materialeigenschaften, wie große Last-Biege-Rate und hohe Steifigkeit, weniger für die aktive Bewegung von Einzelzähnen, sondern mehr für die Verankerung geeignet ist (40–44). Diese Untersuchungen zeigen, dass bereits eine geringe Aktivierung des Goshgarian-TPAs von 3 mm transversale Kräfte von mehr als 4 Newton erzeugt. Somit überschreiten die transversal auf die Molaren einwirkenden Kräfte schon bei geringer Expansion den physiologischen Bereich. Dieser geringe Aktivierungsspielraum von 1-2 mm stellt klinisch ein Problem dar und hat in der Vergangenheit dazu geführt, dass der Goshgarian-Palatinalbogen mehrfach modifiziert wurde.

Der 1980 von Burstone vorgestellte TPA aus Titan-Molybdän-Alloy (TMA) hat einen halb so großen Elastizitätsmodul wie Stahl, was zu einer deutlich Reduktion der Kraftübertragung führt (44, 45). Im Vergleich mit dem Goshgarian-TPA (Edelstahl, Ø 0,8 - 0,9 mm) reduzieren sich die gemessenen expandierenden Kräfte beim Burstone-TPA (TMA, 0,81 x 0,81mm) um 60% (42,45,46). Demzufolge erzeugt eine Aktivierung des TMA-TPAs von 5 - 6 mm transversale Expansionskräfte von circa 2 Newton (40,46). Bei größerer Aktivierung von 9 - 10 mm erhöhen sich die gemessenen expandierenden Kräfte beim Burstone-TPA auf über 4 Newton (46).

Wichelhaus und Sander stellten 2004 einen neu entwickelten Compound-Palatinalbogen vor. Dieser besteht aus einer Kombination von Stahl mit Niti-Elementen. Durch den Einbau der weitaus elastischeren Niti-Elemente (Elastizitätsmodul: Niti 30.000 MPa, Stahl 160.000 MPa) reduzieren sich die Expansionskräfte, so dass eine transversale Aktivierung des Compound-Bogens von maximal 4 mm empfohlen wird (43).

In der Literatur finden sich weitere TPA-Varianten, wie zum Beispiel ein TPA aus einer Cobalt-Chrom-Nickel-Legierung (Elgiloy) (47). Dieser TPA ist eine Abwandlung des klassischen Goshgarian-TPAs und enthält neben dem geänderten Material ein größeres mittleres Loopdesign, das für eine Verlängerung des Bogens sorgt und somit zur Reduktion der Kräftesysteme führt.

Ähnlich verhält es sich bei dem 2016 von Ambrositsch entwickelten S-Garian-TPA, der aus Edelstahl gebogen wird und ein S-förmiges mittleres Loopdesign besitzt. Durch das S-förmige Loopdesign können asymmetrische Bewegungen und Rotationen der Molaren durchgeführt werden. Außerdem führt die Verlängerung des Bogens wiederum zu einer Reduktion der Kräftesysteme (48).

Nikkerdar beschrieb 2013 einen sogenannten Butterfly-Arch. Dieser aus einem runden Edelstahldraht der Stärke 0,9 mm gebogen, schmetterlingsförmige TPA mit einer großen palatinalen Auflagefläche wird mit vier Bändern an den ersten und zweiten Molaren verschweißt und erhält damit eine rigide Geometrie, die vorwiegend der passiven Verankerung der oberen Molaren dient (49).

Die digitale Konstruktion von TPAs bietet, in Abhängigkeit der anatomischen Strukturen, die Möglichkeit der Entwicklung von individuellen und zielgerichteten Behandlungsapparaturen. Dies sollte im Rahmen dieser Studie erarbeitet und untersucht werden.

## 1.4 Analysemethoden

### 1.4.1 Die Finite Elemente Analyse - elastostatische Analyse

Zur Analyse von Festkörpern mit komplexen Formen bietet sich die Methode der Finite Elemente Analyse (FEA) an. Sie stellt ein allgemeines, bei unterschiedlichen physikalischen Aufgabenstellungen angewendetes numerisches Berechnungsverfahren dar. Der Grundgedanke der FEA besteht darin, die zu untersuchende Geometrie in eine größere Anzahl kleiner Teileinheiten, die finiten Elemente, zu zerlegen. Das Aufteilen der Struktur in eine bestimmte Anzahl von Elementen mit finiter Größe gab der Methode den Namen. Dieser Prozess wird in der FEA auch Vernetzung genannt. Die Anzahl der dabei gewählten Elemente ist grundsätzlich beliebig, allerdings ist zu beachten, dass der Rechenaufwand mit zunehmend feiner werdenden Vernetzungen (meshes) überproportional steigt. Die Entwicklung der FEA war abhängig von der Entwicklung leistungsfähiger Computer und geht im Wesentlichen auf den Mathematiker Olgierd Cecil Zienkiewicz zurück, welcher 1967 "The Finite Element Method in Structural Mechaniks" veröffentlichte und damit für die schnelle Verbreitung der FEA sorgte. Die Methode wurde bereits vor der computerunterstützten Konstruktion (CAD), welche Anfang der 1980er Jahre ihren Einzug hielt, eingesetzt. Heute wird die FEA bei vielen physikalischen Problemstellungen, u.a. in der Medizintechnik, verwendet.

Programme der FEA arbeiten nach dem EVA-Prinzip (Eingabe - Verarbeitung - Ausgabe): Der Anwender erstellt in einem CAD-Programm eine Geometrie. Anschließend führt er im sogenannten

"FE-Präprozessor" die Vernetzung durch. Der FE-Gleichungslöser führt die eigentliche Rechnung durch, und der Benutzer erhält die berechneten Ergebnisse, die er dann im sogenannten "FE-Postprozessor" in Form grafischer Darstellungen auswerten kann. Heutzutage gibt es CAD Programme mit integrierter FEA Applikation, sowie FE Programme mit integrierter CAD Applikation.

Für die virtuelle Konstruktion der verschiedenen Geometrien wurde in dieser Studie das Open-Source CAD-Programm Blender (Version 2.81) (50) verwendet. Als Grundlage diente ein digitales Oberkiefermodell (in Form eines STL-Datensatzes) aus dem Archiv der Poliklinik für Kieferorthopädie. Nach dem Import des **STL-Datensatzes** wurden verschiedene Expansionsapparaturen in Abhängigkeit der anatomischen Strukturen designt. Aus einer Vielzahl von unterschiedlichen Geometrien wurden vier zur weiteren Analyse ausgewählt. Diese bestanden zunächst aus einem dreidimensionalen Oberflächennetz, das für die folgende FEA vorbereitet werden musste. Dies erfolgte mit dem Programm Meshmixer (Autodesk Meshmixer RRID:SCR\_015736), mit dessen Hilfe ein trianguliertes und vollständig geschlossenes Netz generiert wurde. Zur weiteren Netzoptimierung bot das Programm MeshLab (Version 2016.12) (51) eine Reihe von Werkzeugen zum Bearbeiten, Prüfen und, falls notwendig, Reparieren der Netze an (Anhang).

Die FEA wurde in Zusammenarbeit mit der Hochschule Koblenz, mit der Open-Source Software FEBio (developed by Maas SA, Ellis BJ, Ateshian GA, Weiss JA) (52) durchgeführt. Hierfür wurden die im CAD Programm konstruierten Geometrien im PLY-Dateiformat in den FE-Präprozessor (FEBio-PreView, Version 2.13) importiert und durch die Auswahl von Netzparametern, wie Elementgröße und Elementart, die Finiten-Elemente-Strukturen erzeugt. Für die Analyse des Materialverhaltens, sowie zur Berechnung von Spannung und Dehnung werden der Elastizitätsmodul und die Poissonzahl (Querkontraktionszahl) benötigt. Für den hier verwendeten Werkstoff PEEK BioSolution White (Merz Dental, Lütjenburg, Deutschland) wurde ein lineares Elastizitätswerhalten bei einem Elastizitätsmodul von 5 GPa und einer Poissonzahl von 0,42 zugrunde gelegt. Als Randbedingung (boundary conditions) eine eindimensionale Bewegung (displacement) an den Zahnkontaktflächen der jeweiligen Apparaturen vorgegeben (Anhang).

Die Ergebnisse des FE-Gleichungslösers (FEBio-Run), wie von Mises-Spanung und Deformation, konnten im Postprozessor (FEBio-PostView, Version 2.4.4) anhand einer farblich kodierten Darstellung ausgewertet werden (Anhang).

Die resultierenden Kräfte der verschiedenden TPA-Geometrien wurden mit der freien Software Octave (GNU Octave, Version 6.2.0) (53) berechnet und anschließend mit den gemessenen Werten aus dem biomechanischen in vitro-Versuch verglichen.

### 1.4.2 Die biomechanische Analyse - in vitro Analyse

Die biomechanische Analyse wurde mit dem robotergestützten Messsystem RMSBiomech im Labor der Poliklinik für Kieferorthopädie Düsseldorf durchgeführt. Der Versuchsaufbau bestand aus einem computergesteuerten Roboterarm mit sechs Freiheitsgraden (MELFA Industrieroboter RV-2FR, Mitsubishi Electric, Ratingen, Deutschland), einem Kraft-Moment-Sensor (FT Nano17, Schunk, Lauffen/Neckar, Deutschland), der über eine magnetische Befestigung mit dem Roboterarm verbunden war und einem justierbaren Positionierungstisch (Anhang).

Die ausgewählten TPA-Geometrien wurden in einem Dentallabor (Dentes, Fräszentrum, Neuss, Deutschland) subtraktiv mittels einer Fünf-Achsen-Fräsmaschine (CORiTEC 350i Loader (Firma imes-icore GmbH, Eiterfeld, Deutschland) hergestellt (Anhang). Als Ausgangsmaterial diente eine PEEK-Ronde (PEEK BioSolution White) der Firma Merz Dental.

Zur Befestigung der im CAD/CAM gefertigten TPAs zwischen Sensor und Positionierungstisch wurde eine spezielle Halterung im 3D-Druck Verfahren (PROTIQ, Blomberg, Deutschland) gefertigt. Mithilfe dieser speziellen Halterung konnten die TPAs einzeln und nacheinander im Versuchsaufbau fixiert werden.

Die simultane Erfassung der von den TPAs erzeugten Kräften (Fx, Fy, Fz) und Drehmomenten (Mx, My, Mz) erfolgte mittels des Kraft-Moment-Sensors, der über den Roboterarm in sechs Achsen bewegt werden konnte. Mit der zugehörigen Software RMSBiomech konnten die gemessenen Werte gespeichert und grafisch dargestellt werden.

Im Versuchsaufbau wurden die TPAs aus PEEK, entsprechend der FEA, ebenfalls in transversaler (horizontaler) Richtung um bis zu 8 mm komprimiert.

Da der Messpunkt des Sensors nicht mit dem Widerstandszentrum (WZ) der Molaren koinzidierte (im WZ der Molaren wurden die Drehmomente in der FEA berechnet), mussten die ermittelten FM-Vektoren zum exakten Vergleich mit denen aus der FEA transformiert werden.

### 1.5 Ethikvotum

Die vorliegende Studie wurde am 04.09.2019 von der Ethikkommision der Medizinischen Fakultät der Heinrich-Heine-Universität genehmigt.

#### Studiennummer: 2019-643

Vorläufiger Titel: Digitales Design verschiedener palatinaler Behandlungsapparaturen mit numerischer Berechnung und strukturmechanischer Analyse in einer Finite Elemente Simulation

## 1.6 Ziele der Arbeit

Diese Studie sollte zeigen, ob sich das für (zahn-) medizinische Anwendungen zugelassene Polymer Polyetheretherketon (PEEK) grundsätzlich auch für die Herstellung kieferorthopädischer Behandlungsgeräte eignen könnte. Dies sollte am Beispiel einer Apparatur zur transversalen Expansion des Oberkieferzahnbogens überprüft werden. Hierzu wurde eine vollständig digitale Prozesskette entwickelt und sowohl eine virtuelle, als auch eine biomechanische Analyse der Kräftesysteme durchgeführt.

# 2. Publizierte Orginalarbeit:

**Digital Design of Different Transpalatal Arches Made of Polyether Ether Ketone (PEEK) and Determination of the Force Systems,** Cornelia Mieszala; Jens Georg Schmidt; Kathrin Becker; Jan Hinrich Willmann; Dieter Drescher, Applied Sciences, Volume 12, Issue 3, 1590, (2022)



Article



# Digital Design of Different Transpalatal Arches Made of Polyether Ether Ketone (PEEK) and Determination of the Force Systems

Cornelia Mieszala<sup>1</sup>, Jens Georg Schmidt<sup>2</sup>, Kathrin Becker<sup>1,\*</sup>, Jan Hinrich Willmann<sup>1</sup> and Dieter Drescher<sup>1</sup>

- <sup>1</sup> Department of Orthodontics, University of Dusseldorf, 40225 Dusseldorf, Germany; cm@mieszala.de (C.M.); praxis@dr-wilhelmy.de (J.H.W.); d.drescher@uni-duesseldorf.de (D.D.)
- <sup>2</sup> Department of Mathematics and Technology, University of Applied Sciences Koblenz, 53424 Remagen,
- Germany; schmidt@rheinahrcampus.de
- \* Correspondence: kathrin.becker@med.uni-duesseldorf.de; Tel.: +49(0)211-811-8160; Fax: +49(0)211-811-9510

Abstract: The aim of this study was to investigate whether the polymer polyether ether ketone (PEEK), which is approved for (dental) medical appliances, is suitable for the production of orthodontic treatment appliances. Different geometries of transpalatal arches (TPAs) were designed by Computer Aided Design (CAD). Out of a number of different designs and dimensions, four devices were selected and manufactured by milling out of PEEK. A finite element analysis (FEA) and a mechanical in vitro testing were performed to analyze the force systems acting on the first upper molars. Up to an activation (transversal compression) of 4 mm per side (total 8 mm), the PEEK TPAs generated forces between 1.3 and 3.1 Newton (N) in the FEA and between 0.7 and 3.2 N in the mechanical testing. The moments in the oro-vestibular direction were measured between 2.1 and 6.6 Nmm in the FEA and between 1.1 and 6.0 Nmm in the mechanical testing, depending on the individual TPA geometry. With the help of the FEA, it was possible to calculate the von Mises stresses and the deformation patterns of the different TPAs. In some areas, local von Mises stresses exceeded 154-165 MPa, which could lead to a permanent deformation of the respective appliances. In the in vitro testing, however, none of the TPAs showed any visible deformation or fractures. With the help of the FEA and the mechanical testing, it could be shown that PEEK might be suitable as a material for the production of orthodontic TPAs.

Keywords: digital orthodontic appliance; CAD/CAM; polyether ether ketone (PEEK); finite element analysis (FEA); mechanical analysis

#### 1. Introduction

The transpalatal arch (TPA) is used in orthodontics for three-dimensional adjustment of the molars. The TPA is often used as a passive device to stabilize the molars. However, it can also be employed as an active appliance to expand or compress the dental arch, or to derotate the molars, or to apply differential torque. Usually, the traditional transpalatal arch, according to Goshgarian, is made of 0.9 mm stainless steel wire, which provides a high load-deflection rate [1]. The Goshgarian arch has been modified several times with regard to its material properties and shape. In 1980, Burstone et al. introduced the so-called precision transpalatal arch made of titanium–molybdenum alloy (TMA) [2–4]. The 50% lower Young's modulus of the TMA wire lead to significantly lower force and moments acting on the molars [5] and allowed a wider range of activation [6]. The compound palatal arch developed by Wichelhaus et al. in 2004 was composed of a combination of stainless steel and nickel–titanium elements. The incorporation of the more elastic nickel–titanium elements also reduced the expansion forces and torques [7]. By including superelastic nickel–titanium elements, an expansion up to 4 mm and a derotation of the molars up to 10° could be achieved. Further variants of the classic Goshgarian, as described in the



Citation: Mieszala, C.; Schmidt, J.G.; Becker, K.; Willmann, J.H.; Drescher, D. Digital Design of Different Transpalatal Arches Made of Polyether Ether Ketone (PEEK) and Determination of the Force Systems. *Appl. Sci.* 2022, *12*, 1590. https:// doi.org/10.3390/app12031590

Academic Editor: Dorina Lauritanc

Received: 22 December 2021 Accepted: 28 January 2022 Published: 2 February 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



**Copyright:** © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/). literature [8–10], were designed to create more precise tooth movements and a reduction in the force and moment magnitudes.

Computer Aided Design/ Computer Aided Manufacturing (CAD/CAM) technologies have gained an increasing importance in orthodontics and offer new design and manufacturing possibilities. Whereas metal printing is already established [11–13], only a few studies have investigated the applicability of polyether ether ketone (PEEK) in digital workflows. PEEK is a high-performance polymer with dimensional stability, temperature resistance and excellent biocompatibility [14,15]. The material can be milled and is—with some limitations—also 3D printable [16,17]. Due to its excellent biocompatibility, PEEK was also chosen for dental implants as well as for removable and fixed dentures [18–20]. With its small Young's modulus of 3–5 GPa, PEEK may also be a good candidate for metal-free, aesthetic orthodontic appliances.

Several applications of PEEK in orthodontics have already been reported in the literature. These are mainly passive appliances, such as space maintainers [21] and removable orthodontic retainers [22]. In addition, applications for fixed appliances were proposed [23–26]. However, there is very scarce information as to what extent PEEK is eligible to deliver constant forces and may be used as a replacement for conventional wires or transpalatal arches (TPA) in orthodontics.

Biomechanical properties can be assessed using mechanical testing of 3D-printed specimen, or mathematically by means of finite element analysis (FEA). FEA offers the possibility to simulate and visualize the behavior of complex shapes under mechanical loading. Since FEA can be conducted much faster than mechanical tests, it allows for the assessment of a high number of samples with different shapes. However, since FEA is a numerical approach, it highly depends on material parameters, boundary conditions and the way of modelling. To adjust the underlying parameters and the numerical model, mechanical testing of real samples appears to be mandatory.

The aim of the present study was to investigate whether PEEK is suitable for orthodontic active appliances by assessing the biomechanical properties of a TPA made from PEEK by means of FEA and mechanical testing.

#### 2. Materials and Methods

2.1. Computer-Aided Design (CAD)

A set of digital TPAs with various geometries were designed using the software Blender (version. 2.81) [27]. A randomly selected plaster model was taken from the archive of Department of Orthodontics, University Clinics of Dusseldorf. The plaster model was scanned to gain a digital model. On the first molars, partial shells covering the palatal aspect of the teeth were designed. These shells served to connect the TPAs with the molars. The arches of the TPAs had a horizontal width of 34 mm (from molar to molar), a height of about 14 mm and a distance to the palatal surface of 2 mm on average (Figure 1).



Figure 1. Computer-Aided Design (CAD) of one TPA Geometry.

Out of a number of possible designs, four TPAs were selected that fulfilled common clinical requirements such as patient comfort and mechanical design criteria:

The *Double-arch TPA* consisted of two arches, each having a diameter of 1 mm (Figure 2a). The *Triple-loop-arch TPA* and the *S-bow TPA* were constructed with one connecting element and a diameter of 1.2 mm and 1.5 mm (Figure 2b,c) and the *Omega-loop TPA* showed an oval profile of  $1 \times 2$  mm (Figure 2d). All dimensions are listed in Table 1.



Figure 2. Four different designs of digital TPA Geometries (a) Double-arch TPA, (b) Triple-loop-arch TPA, (c) S-bow TPA, (d) Omega-loop TPA.

 Table 1. Dimensions of the four different designs: horizontal (x-axis), sagittal (y-axis), vertical (z-axis), arch diameter and number of the elements in the FEA.

Dimensions (mm)	Double-Arch TPA	Triple-Loop-Arch TPA	S-Bow TPA	Omega-Loop TPA
Horizontal	34	34	34	34
Sagittal	13	11	14	20
Vertical	14	14	14.5	10
Cross section	1 each	1.5	1.2	$1 \times 2$
Number of elements in the FEA	155,578	136,341	167,257	151,933

2.2. Creating of High-Quality Meshes

For the FEA, the meshes of the digital TPAs (Figure 3a), were triangulated and converted into meshes with high element quality using the Meshmixer program (version 3.4.35, 2017, Autodesk Meshmixer RRID:SCR\_015736) (Figure 3b) and the MeshLab software (version 2016.12, https://www.meshlab.net, last accessed on 1 November 2021) for mesh corrections and optimizations (Figure 3c).



Figure 3. Mesh creation and optimization (a) Blender, (b) Meshmixer, (c) MeshLab.

2.3. Finite Element Analysis (FEA)

The FEA was performed using the software FEBio (developed by SA Maas, BJ Ellis, GA Ateshian, JA Weiss) [28]. The pre-processor (FEBio-PreView, version 2.13) was used to build the finite element model and to define the boundary conditions. In order to guarantee an acceptable mesh quality, we bounded—for every tetrahedron—the ratio of the diameter of the circumsphere R and the length of the shortest edge L by the ratio R/L < 1.4. The number of the elements for each appliance are listed in Table 1.

The FE solver (FEBio-Run) was used to perform the calculations, and the post-processor (FEBio-PostView, version 2.4.4) was employed for visualization.

For the present study, the material parameters of the PEEK material were set to a Young's modulus of 5.1 GPa and a Poisson's ratio of 0.42, according to the parameters provided by the manufacturer of the material used for fabrication [29].

As boundary conditions, an activation in the horizontal plane between the two molar shells from 1 mm up to an expansion of 8 mm (4 mm per site) was defined, and computed in steps of 1 mm displacement each. The forces and moments acting at the point of force application (PF) on the inner surfaces of the shells (at the first upper molars), were determined. In addition, resulting moments at the centers of resistance (CR) were assessed. Moments around the vertical axis were considered to be *rotatory*, around the oro-vestibular axis to be *angulatory* and around the mesio-distal axis to account for *tipping* movements.

#### 2.4. Computer-Aided Manufacturing (CAM)

The manufacturing of the four different PEEK TPAs were carried out by the dental laboratory "Dentes" (Dentes Fräszentrum GmbH, Neuss, Germany). The files were prepared for milling with the dental CAM system ZYKLONcam (KON-AN- TEC, Münster, Germany) and milled out of a PEEK disc from Merz Dental (PEEK BioSolution white, Merz Dental GmbH, Lütjeburg, Germany) with a 5-axis milling machine CORiTEC 350i Loader (Imes-icore GmbH, Eiterfeld, Germany). The support structures, which were necessary for fixation of the TPAs while milling, were carefully removed. No further finishing was required.

#### 2.5. Set-Up of the Mechanical Testing

The mechanical in vitro test was performed by measurement system RMSBiomech, which consisted of a robotic arm, a force-moment sensor and an adjustable table (Figure 4a). Each of the TPAs was glued (Pattex, epoxy resin 2-component adhesive, Henkel, Germany) to custom designed and 3D printed fixation device (Figure 4b) made of a polyamide, printed by PROTIQ (Blomberg, Germany) and representing the original molars. The fixation devices were screwed to the sensor to allow measurement of the 3D forces and moments. The setup was constructed such that only the upper right first molar was movable, whereas the contralateral molar stayed attached to the table.



**Figure 4.** Experimental setup of the mechanical in vitro testing; (a) Robotic arm with supersensitive force–moment sensor and position table; (b) 3D printed polyamide fixation device with one TPA, milled out of PEEK.

The measurement of the forces and the moments was carried out by a 6-axis forcemoment sensor (FT Nano17, Schunk, Lauffen/Neckar, Germany), which was connected to the robotic arm via a magnetic attachment. The computer controlled robotic arm (Mitsubishi Electric, MELFA, RV-2FR, Ratingen, Germany) was capable of movements using all six spatial degrees of freedom.

#### 2.6. Mechanical Testing

The software RMSBiomech controlling the robot stored the activation distance as well as the measured force Fx, Fy, Fz and moment components Mx, My, Mz. Each TPA was activated identical to the previous FEA in compression mode (8 mm in total, 4 mm per side) perpendicular to the mid-sagittal plane. Forces and moments were recorded in 0.1 mm steps from 1 to 8 mm of activation. This procedure was repeated ten times to calculate the mean values. The measured forces and moments represented those acting at the inner surfaces of the shells (PF) or the molars, respectively. The moments acting on the center of resistance (CR) were computed, assuming the CR to be positioned at 7 mm apically to the

point of force application (PF), i.e., approximately 1–2 mm below the tri-furcation of the upper right molar [30,31].

#### 3. Results

The results of the Finite Element Analysis and the mechanical testing were measured in all three dimensions and are reported in Table 2.

**Table 2.** a–d Measurements of the finite element analysis and the mechanical testing; Forces: Fx (transversal), Fy (sagittal), Fz (vertical); Moments: Mx (angulation), My (buccal tipping), Mz (rotation); von Mises stresses; (a) Double-arch TPA, (b) Triple-loop-arch TPA, (c) S-bow TPA, (d) Omega-loop TPA.

	Finite Element Analysis									Mechanical Testing						
Activation		Forces		Mome: Force	nts at the l Applicatio	Point of on (PF)	Mome of R	nts at the esistance	Center (CR)	von Mises	Forces Moments at the Ce of Resistance (C			Center (CR)		
(mm)	Fx (N) FEA	Fy(N) FEA	Fz (N) FEA	Mx Nmm FEA.	My Nmm FEA	Mz Nmm FEA	Mx Nmm FEA	My Nmm FEA	Mz Nmm FEA	Stress [MPa]	Fx (N) test	Fy(N) test	Fz (N) test	Mx Nmm test	My Nmm test	Mz Nmm test
$\frown$								(a) Double	e-arch TPA							
0.5	0.5	0	0	0	-3	-0.5	0	0.9	0.3		0.4	0	0	-0.1	0.5	0.1
1	0.9	0	0	-0.1	-7	-1.3	0	1.6	0.5	46	0.7	0	0.1	-0.1	0.8	0.2
1.5	1.3	0	0	-0.2	-10	-2	0	2	0.7		1.1	0	0.1	-0.1	1.1	0.4
2	1.7	0	0.1	-0.2	-13	-2.5	0	2.3	0.8	89	1.4	0	0.1	-0.1	1.3	0.5
2.5	2.1	0	0.1	-0.3	-16	-3	-0.1	2.4	0.9		1.6	0	0.1	-0.1	1.3	0.7
3	2.5	0.1	0.1	-0.3	-20	-3.8	-0.1	2.4	1.0	128	1.9	0	0.2	-0.1	1.3	0.9
3.5	2.8	0.1	0.1	-0.4	-23	-4.5	-0.1	2.3	1.0		2.1	0	0.2	-0.1	1.2	1.1
4	3.2	0.1	0.1	-0.5	-26	$^{-5}$	-0.1	2.1	1.0	165	2.3	0.1	0.2	-0.2	1.1	1.3
$\sim \sim \sim$							(	b) Triple-lo	op-arch TP.	4						
0.5	0.4	0	0	-0.1	-4	0.1	0	-0.5	0.8		0.5	0	0	0	-0.5	-0.7
1	0.7	0	0	-0.1	$^{-8}$	0.2	-0.1	-1.1	1.7	43	1.0	0	0	0	-1.1	-1.3
1.5	1.1	0	0.1	-0.2	-11	0.3	-0.1	-1.8	2.4		1.4	0	0.1	0	-1.7	-1.9
2	1.4	0	0.1	-0.2	-15	0.5	-0.2	-2.7	3.2	83	1.8	0	0.1	0.1	-2.5	-2.5
2.5	1.7	0	0.1	-0.3	-18	0.5	-0.2	-3.5	3.9		2.2	0	0.1	0.1	-3.3	-3.1
3	2.0	0	0.1	-0.3	-21	0.7	-0.3	-4.5	4.6	120	2.6	0	0.1	0.2	-4.2	-3.7
3.5	2.3	0	0.1	-0.4	-25	0.9	-0.4	-5.5	5.3		2.9	0	0.1	0.2	-5.1	-4.2
4	2.5	0	0.1	-0.4	-29	1	-0.4	-6.5	6.0	154	3.2	0	0.1	0.2	-6.0	-4.7
101								(c) S-be	w TPA							
0.5	0.3	0	0	-0.1	-3	0.2	0	-0.4	0.7		0.2	0	0	0.0	-0.2	-0.3
1	0.5	0	0	-0.1	-5.5	0.3	0	-1.0	1.3	42	0.3	0	0	0.0	-0.5	-0.6
1.5	0.8	0	0	-0.1	-8	0.4	0	-1.7	1.8		0.5	0	0	0.0	-0.8	-0.8
2	1.0	0	0	-0.2	-11	0.5	0	-2.5	2.3	81	0.6	0	0	-0.1	-1.1	-1.1
2.5	1.2	0	0	-0.2	-14	0.5	0.1	-3.4	2.8		0.8	0	0	-0.1	-1.6	-1.3
3	1.4	0.1	0.1	-0.2	-17	0.5	0.2	-4.4	3.2	119	0.9	0	0	-0.2	-2.1	-1.4
3.5	1.6	0.1	0.1	-0.3	-19	0.5	0.2	-5.5	3.5		1.0	0	0	-0.3	-2.6	-1.5
4	1.7	0.1	0.1	-0.3	-22	0.5	0.3	-6.6	3.7	154	1.1	0	0	-0.3	-3.2	-1.7

	Finite Element Analysis									Mechanical Testing						
Activation	Forces			Moments at the Point of Force Application (PF)		Moments at the Center of Resistance (CR)		von Mises	Forces			Moments at the Center of Resistance (CR)				
(mm)	Fx (N) FEA	Fy(N) FEA	Fz (N) FEA	Mx Nmm FEA.	My Nmm FEA	Mz Nmm FEA	Mx Nmm FEA	My Nmm FEA	Mz Nmm FEA	Stress [MPa]	Fx (N) test	Fy(N) test	Fz (N) test	Mx Nmm test	My Nmm test	Mz Nmm test
22								(d) Omega	-loop TPA							
0.5	0.2	0	0	0	$^{-1}$	-0.7	0	0.4	-0.4		0.1	0	0	0.0	0.1	0.3
1	0.3	0	0	0	-2	-1.4	0	0.8	-0.7	17	0.2	0	0	0.0	0.3	0.6
1.5	0.5	0	0	0	-3	-2	0	1.2	-1.1		0.3	0	0	0.0	0.5	0.9
2	0.7	0	0	0	-4	-2.7	0	1.5	-1.5	35	0.4	0	0	0.0	0.6	1.1
2.5	0.8	0	0	0	-5	-3.4	0	1.8	-1.8		0.5	0	0	0.1	0.8	1.4
3	1.0	0	0	-0.1	-7	-4	0	2.0	-2.2	51	0.6	0	0	0.1	0.9	1.7
3.5	1.1	0	0	-0.1	-8	-4.7	0.1	2.2	-2.6		0.6	0	0	0.1	1.0	2.0
4	1.3	0	0	-0.1	-9	-5.4	0.1	2.4	-2.9	68	0.7	0	0	0.1	1.1	2.3

Table 2. Cont.

#### 3.1. Finite Element Analysis

At a maximum activation of 4 mm per side in the transversal axis, the *Double-arch TPA* with two arches of 1 mm diameter each, generated the highest forces (3.1 Newton (N) per side). The *Triple-loop-arch TPA* and the *S-bow TPA*, both with a round diameter of 1.2 mm and 1.5 mm, generated 2.5 and 1.7 N per side. The *Omega-loop TPA* with an oval diameter of  $1 \times 2$  mm and a big loop generated 1.3 N per side, the lowest force. In the sagittal and vertical direction, negligible forces less than 0.01 N were found.

The applied and resulting moments were assessed at CR and PF at the inner surface of the shell, palatal to the dental crown of the upper right molar. Overall, the highest moments were found around the mesio-distal axis representing a buccal *tipping*.

At the maximum activation of 4 mm per side, at CR, moments ranged from 2.1 Nmm (*Double-arch TPA*) to -6.6 Nmm (*S-bow TPA*), and, at PF, the moments ranged from -9 Nmm (*Omega-loop TPA*) to -29 Nmm (*Triple-loop-arch TPA*). The *rotatory* moments around the vertical axis reached a maximum of 6 Nmm (*Triple-loop-arch TPA*) at CR and -5.4 Nmm (*Omega-loop TPA*) at PF. The *angulation*, i.e., moments around the oro-vestibular axis, were very small for all treatment appliance with absolute values less than 0.5 Nmm. Figure 5a, b summarizes the *buccal tipping* at PF and CR for the investigated TPAs.

The FEA enabled calculation of the von Mises stresses for each TPA variant. Up to an activation of 3 mm per side, the local von Mises stresses ranged from 51 to 128 MPa and sometimes slightly exceeded the yield point from PEEK of 120 MPa. Upon further activation of the TPAs up to 4 mm, three appliances produced local von Mises stress clearly above the yield point (*S-bow TPA* and *Triple-loop-arch TPA*: 154 MPa and *Double-arch TPA*: 165 MPa). The von Mises stresses for the different TPA variants are visualized in Figure 6 for a bilateral activation of 4 mm. It can be seen that the highest material stresses occurred at the interface between the TPA and the shells (marked in red-orange).



**Figure 5.** (**a**,**b**) FEA, resulting moments in Newton millimeter (Nmm) for buccal tipping per molar 16 (dashed line) and 26 (continuous line) measured by transversal activation of 0.5 to 4 mm per side; (**a**) at the point of force application; (**b**) at the center of resistance.



**Figure 6.** FEA, graphical illustration of the von Mises stress at a maximum of 4 mm bilateral activation per side. The side scale indicates the corresponding numerical data (here: megapascals) to the color gradient, blue shows the lowest stress and red the highest stress (areas marked in red-orange).

The displacement in the sagittal direction differed depending on the TPA geometry: Anterior movement was seen for the *Double-arch TPA* and the *Omega-loop TPA* (1.3 mm and 0.5 mm), whereas distal displacement was seen for the *Triple-loop-arch TPA* (-0.5 mm). A

different pattern was seen for the *S*-bow *TPA* where one side moved to the anterior, and the other in a distal direction (1.5 mm and -2 mm). In the apical direction, movements ranged from -1.5 mm (*Omega-loop TPA*) to -3.9 mm (*S*-bow *TPA*).

Figure 7 summarizes the deformation pattern of the four TPAs in all three dimensions. It can be seen that apical displacement was most pronounced for the *S-bow TPA* and the *Double-arch TPA*, reaching 3.9 mm and 2.7 mm, respectively.



**Figure 7.** FEA, graphical visualization of the deformation pattern at a maximum of 4 mm bilateral activation per side. The side scale indicates the corresponding numerical values (here: millimeters) to the color gradient, blue indicates the smallest movement and red the largest.

#### 3.2. Mechanical Testing

The resulting forces and moments of the mechanical testing were measured in all three dimensions and are shown in Table 2. In contrast to the FEA, the *Triple-loop-arch TPA* showed the highest forces (3.2 N per side) and the *Double-arch TPA* the second highest forces (2,3 N per side) at an activation of 4 mm per side. Likewise, to the FEA, the *S-bow TPA* and the *Omega-loop TPA* generated lower forces per side (1.1 N per side and 0.7 N). Figure 8 compares the resulting forces from the FEA with the mechanical tests of the investigated TPAs. In the sagittal and apical direction, negligible forces smaller than 0.2 N were identified.



Figure 8. Mechanical test (dashed line) vs. FEA (continuous line): resulting forces in Newton (N) in oro-vestibular direction per molar by transversal activation of 0.5 to 4 mm per side.

For the mechanical testing, resulting moments were assessed only at the CR. Similar to the FEA, the highest moments occurred around the mesio-distal axis representing a

*buccal tipping* ranging from 1.1 Nmm (*Double-arch TPA*) to -6 Nmm (*Triple-loop-arch TPA*). The *rotatory* moments around the vertical axis ranged from 1.3 Nmm (*Double-arch TPA*) to -4.7 Nmm (*Triple-loop-arch TPA*). The *angulation*, around the oro-vestibular axis, was lowest and ranged from 0.1 to -0.3 Nmm for all appliances.

#### 4. Discussion

Digital workflows and computer-aided design (CAD) are transforming the daily work in all dental disciplines. In orthodontics, they enable the provision of individualized appliances designed specifically to the patient's needs.

Owing to the advancement of computer-aided manufacturing (CAM), new materials for 3D printing or 5-axis milling are becoming available [32]. Most of the printable polymers currently available on the dental market are limited to temporary use in the mouth. In orthodontics, they are utilized for insertion guides of orthodontic mini-implants [33,34] or surgical splints for orthoganthic surgery [35]. Fully digitally planned and CAM-fabricated appliances made of printed or milled materials have been described in the literature. They are utilized for active treatment and retention purposes [11–13,36–38].

The biocompatible high-performance polymer polyether ether ketone (PEEK) that was analyzed in the present study has been used in dentistry for dental implants [18–20] as well as for permanent and removable dentures [14,15]. In the orthodontic field, PEEK has been tested for the manufacturing of removable and fixed space maintainers. Owing to the low modulus of elasticity, it has also been tested for orthodontic wires made of or covered by PEEK [23–25]. Therefore, the present study investigated whether PEEK could also be suitable for the CAM fabrication of transpalatal arches.

In contrast to the traditional transpalatal arch made of stainless steel or TMA wire, the use of digital design programs enables the user to create customized and precise treatment appliances for specific needs. The TPA geometries presented in this article reflect the wide range of design possibilities.

PEEK, in contrast to stainless steel (160 GPa) or TMA (80 GPa), has a significantly lower Young's modulus of only 3 to 5 GPa. When employed as a material for orthodontic purposes, forces and moments of much smaller magnitudes can be expected. Accordingly, the activation range of the TPAs made out of PEEK that were measured in the present study was considerably higher compared to values previously reported for TPAs made of stainless steel (maximum activation < 3 mm) or TMA (maximum activation < 5–6 mm).

Up to an activation of 6 mm, none of the TPA geometries presented in this study exceeded the recommended force limit of 2.5 N [5]. The *S-bow TPA* and the *Omega-loop TPA* generated expansion forces below 1.5 N up to an activation of 8 mm, implicating that a further activation would be conceivable for the respective geometries.

Out of the TPAs tested in this study, the *Double-arch TPA* and the *Triple-loop-arch TPA* generated the highest forces, which were in the range of 2.5 to 3.0 N and appeared appropriate for orthodontic purposes. Among the two, the *Double-arch TPA* showed rather low moments and could thus be well suited for expansion or—possibly with an enlarged or modified cross section—also as an anchorage unit. The *Triple-loop-arch TPA* generated similar forces but higher moments (rotation –6.6 Nmm) and may therefore also be suited for molar derotation. The *S-bow TPA* generated lower forces and higher moments (rotation 3 to 6 Nmm), which may in principle be eligible for orthodontic treatment. However, the FEA revealed that the two "S" arches might end up in direct contact upon higher activation, which has to be considered in the case of clinical application. The *Omega-loop-arch TPA*, with its large spring, generated very low forces (about 1.0 N) and may therefore not be useful for expansion or for anchorage.

The traditional TPA made of stainless steel or TMA is usually connected to the molars via palatal attachments. This plug-in connection has the advantage that the palatal arch can be easily removed and re-inserted for activation. However, a limitation of this approach is related to the slot play leading to undesirable side effects, such as the unwanted reduction

in torque moments [5,7] Another limitation of conventional TPAs is related to the fact that their frequent re-activation is required.

The CAD/CAM-fabricated TPAs consist of one piece and should be directly bonded to the palatal surface of the molars. Due to the high dimensional stability of the palatal connection from the arch to the tooth, side effects can be reduced and three-dimensional tooth movements can be achieved in a more precise manner. Due to the large activation range, regularly re-activating of the TPAs might not be necessary.

Comparable to the activation of TPAs made of stainless steel [8], three out of four TPAs made of PEEK exceeded the yield point at a bilateral activation of 4 mm in the FEA, whereas this did not occur for a bilateral activation of 3 mm. Accordingly, we can expect that higher activations may lead to an irreversible deformation during insertion. In this case, the TPAs made out of PEEK might not recover completely. Consequently, the intended tooth movement might not be carried out to the full extent. In the mechanical in vitro analysis, however, none of the PEEK TPAs investigated in this study showed any visible deformation. Hence, for the geometries investigated, the maximum activation ranges of the PEEK TPAs are most likely to be in a range slightly below 4 mm per side.

On average, the values measured in the mechanical in vitro testing for the force systems were lower than the values calculated in the FEA. Only one appliance (*Triple-loop-arch TPA*) showed higher values in the test than in the FEA. Possibly, this could be related to the fact that a linear elasticity of the PEEK material was assumed for the FEA. However, the PEEK material—as with most polymers—shows a non-linear behavior above a certain load. Therefore, a change in the material structure of the PEEK polymer during activation (horizontal compression) and an incomplete recovery of the material in the mechanical testing may occur. It may be speculated that this could be the reason for the lower forces in the in vitro testing, and future studies are required to further investigate this aspect.

The FEA revealed that the highest material stresses occurred at the junction of the connecting elements to the shells. Using CAD-supported planning at this point, the user has the possibility to strengthen the TPAs in the areas with the highest material stress. This might lead to a reduction in the material stress when subjected to similar force systems.

Finally, with the help of the FEA, it was possible to obtain information on the deformation of each treatment appliance in all three dimensions. It was observed that greater transversal activation leads to significant apical movement of the treatment appliance from 1.5 up to almost 4 mm, depending on the TPA geometry. A palatal distance of about 2 mm, as described in this study, of the TPAs would result in contact with the palatal mucosa during insertion. This fact should be kept in mind in the virtual planning of the TPAs designed by CAD.

#### 5. Conclusions

The present study showed that CAD–CAM-manufactured transpalatal arches (TPA) made of PEEK might be a promising alternative to conventional materials.

The FEA was found to be suitable to investigate the mechanical behavior of different CAD/CAM-fabricated TPA geometries. The mechanical in vitro analysis supplemented the FEA by enabling measurement of the forces and moments acting on both molars simultaneously. In combination with the FEA, predictions about the force systems acting on the molars by CAD/CAM-fabricated PEEK TPAs could be obtained in all three dimensions.

The TPA geometries presented in this study showed clinically appropriate expansion forces up to 3 N per side. Due to the low load-deflection rate of the flexible PEEK material, the activation ranges are much higher in comparison to conventional TPAs. The four different geometries utilized in the study reflect the wide variability in design options. The *Triple-loop-arch TPA* with a force system ranging from 2.5 to about 3 N appeared to be most appropriate for the application of moments, whereas the *Double-arch TPA*, which delivered force systems of comparable magnitude, seemed to be most appropriate for the expansion as well as anchorage of the molars. In the future, the development of customized TPAs for specific patients' needs might become possible using CAD.

The practical benefits of CAD/CAM-fabricated appliances are currently advancing owing to the development of novel 3D-printable materials and improvements in CAD software. However, their introduction to clinical settings requires validation of their eligibility by means of simulated and biomechanical testing, and analysis of biocompatibility. Whereas PEEK has already demonstrated its suitability for permanent use in the mouth, only a few studies have assessed its applicability as a retention device in orthodontics. This study presented that PEEK may also be effective as a CAD–CAM-fabricated active orthodontic appliance and might offer a metal-free, aesthetic alternative to conventional approaches. As the 5-axis milling out of a PEEK disc is associated with a high material loss, improvements in additive 3D printing technology will most likely reduce costs in the future.

The behavior of PEEK under in vivo (intraoral) conditions should be evaluated in future experimental studies.

Author Contributions: C.M.: Conceptualization, methodology, formal analysis, investigation, writing original draft preparation. D.D.: Conceptualization, methodology, formal analysis, investigation, writing—review and editing. J.G.S.: methodology, software, visualization, formal analysis. J.H.W.: Conceptualization, methodology, project administration. K.B.: Conceptualization, writing—original draft preparation, writing—review and editing. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

**Institutional Review Board Statement:** The present study was approved by the ethical committee of the University of Dusseldorf (Ref. no. 2019-643, date of approval: 4 September 2019).

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: Data will be provided upon reasonable request.

Acknowledgments: The authors thank the dental laboratory "Dentes" (Fräszentrum GmbH, Neuss, Germany) for their kind support in the manufacturing of the different TPAs.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

#### References

- Baldini, G.; Luder, H.U. Influence of Arch Shape on the Transverse Effects of Transpalatal Arches of the Goshgarian Type during Application of Buccal Root Torque. Am. J. Orthod. 1982, 81, 202–208. [CrossRef]
- Burstone, C.J.; Koenig, H.A. Precision Adjustment of the Transpalatal Lingual Arch: Computer Arch Form Predetermination. Am. J. Orthod. 1981, 79, 115–133. [CrossRef]
- 3. Burstone, C.J.; Manhartsberger, C. Precision Lingual Arches. Passive Applications. Am. J. Orthod. 1981, 80, 1–16. [CrossRef]
- 4. Burstone, C.J. Precision Lingual Arches. Active Applications. J. Clin. Orthod. JCO 1989, 23, 101–109.
- Hoederath, H.; Bourauel, C.; Drescher, D. Differences between Two Transpalatal Arch Systems upon First-, Second-, and Third-Order Bending Activation. J. Orofac. Orthop. Fortschr. Kieferorthopädie 2001, 62, 58–73. [CrossRef]
- Tsetsilas, M.; Konermann, A.-C.; Keilig, L.; Reimann, S.; Jäger, A.; Bourauel, C. Symmetric and Asymmetric Expansion of Molars Using a Burstone-Type Transpalatal Arch. J. Orofac. Orthop. Fortschritte Kieferorthopädie 2015, 76, 377–390. [CrossRef]
- Wichelhaus, A.; Sander, C.; Sander, F.G. Development and Biomechanical Investigation of a New Compound Palatal Arch. J. Orofac. Orthop. Kieferorthopädie 2004, 65, 104–122. [CrossRef]
- Gündüz, E.; Crismani, A.G.; Bantleon, H.P.; Hönigl, K.D.; Zachrisson, B.U. An Improved Transpalatal Bar Design. Part II. Clinical Upper Molar Derotation—Case Report. Angle Orthod. 2003, 73, 244–248. [CrossRef]
- Ambrositsch, P.; Bantleon, H.-P. Der S-Garian TPA—Einsatzmöglichkeiten und Vorteile des Transpalatinalbogendesigns. Informationen Aus Orthod. Kieferorthopädie 2016, 48, 7–10. [CrossRef]
- 10. Nikkerdar, A. Butterfly Arch: A Device for Precise Controlling of the Upper Molars in Three Planes of Space. J. Dent. Tehran Iran. 2013, 10, 221–226.
- Graf, S.; Vasudavan, S.; Wilmes, B. CAD/CAM Metallic Printing of a Skeletally Anchored Upper Molar Distalizer. J. Clin. Orthod. JCO 2020, 54, 140–150.
- 12. Graf, S.; Cornelis, M.A.; Hauber Gameiro, G.; Cattaneo, P.M. Computer-Aided Design and Manufacture of Hyrax Devices: Can We Really Go Digital? *Am. J. Orthod. Dentofac. Orthop.* 2017, 152, 870–874. [CrossRef]
- Graf, S.; Vasudavan, S.; Wilmes, B. CAD-CAM Design and 3-Dimensional Printing of Mini-Implant Retained Orthodontic Appliances. Am. J. Orthod. Dentofac. Orthop. 2018, 154, 877–882. [CrossRef]

- 14. Skirbutis, G. PEEK Polymer's Properties and Its Use in Prosthodontics. A Review. Stomatol. Balt. Dent. Maxillofac. J. 2018, 20, 54–58.
- Alexakou, E. PEEK High Performance Polymers: A Review of Properties and Clinical Applications in Prosthodontics and Restorative Dentistry. Eur. J. Prosthodont. Restor. Dent. 2019, 27, 113–121. [CrossRef]
- Jockusch, J.; Özcan, M. Additive Manufacturing of Dental Polymers: An Overview on Processes, Materials and Applications. Dent. Mater. J. 2020, 39, 345–354. [CrossRef]
- Wang, Y.; Müller, W.-D.; Rumjahn, A.; Schwitalla, A. Parameters Influencing the Outcome of Additive Manufacturing of Tiny Medical Devices Based on PEEK. *Mater. Basel Switz.* 2020, 13, 466. [CrossRef]
- Schwitalla, A.; Müller, W.-D. PEEK Dental Implants: A Review of the Literature. J. Oral Implantol. 2013, 39, 743–749. [CrossRef]
   Whitty, T. PEEK—A New Material for CAD/CAM Dentistry. eLABORATE 2014, 32–36. Available online: https://panadent.co.
- uk/wp-content/uploads/2014/11/PEEK-A-new-material-for-CADCAM-dentistry.pdf (accessed on 21 November 2021).
  20. Mendes, J.M.; Botelho, P.C.; Mendes, J.; Barreiros, P.; Aroso, C.; Silva, A.S. Comparison of Fracture Strengths of Three Provisional Prosthodontic CAD/CAM Materials: Laboratory Fatigue Tests. *Appl. Sci.* 2021, *11*, 9589. [CrossRef]
- Ierardo, G.; Luzzi, V.; Lesti, M.; Vozza, I.; Brugnoletti, O.; Polimeni, A.; Bossu, M. Peek Polymer in Orthodontics: A Pilot Study on Children. J. Clin. Exp. Dent. 2017, 9, e1271–e1275. [CrossRef]
- Xepapadeas, A.B.; Weise, C.; Frank, K.; Spintzyk, S.; Poets, C.F.; Wiechers, C.; Arand, J.; Koos, B. Technical Note on Introducing a Digital Workflow for Newborns with Craniofacial Anomalies Based on Intraoral Scans—Part I: 3D Printed and Milled Palatal Stimulation Plate for Trisomy 21. BMC Oral Health 2020, 20, 20. [CrossRef] [PubMed]
- Shirakawa, N.; Iwata, T.; Miyake, S.; Otuka, T.; Koizumi, S.; Kawata, T. Mechanical Properties of Orthodontic Wires Covered with a Polyether Ether Ketone Tube. Angle Orthod. 2018, 88, 442–449. [CrossRef] [PubMed]
- Tada, Y.; Hayakawa, T.; Nakamura, Y. Load-Deflection and Friction Properties of PEEK Wires as Alternative Orthodontic Wires. Materials 2017, 10, 914. [CrossRef] [PubMed]
- Maekawa, M.; Kanno, Z.; Wada, T.; Hongo, T.; Doi, H.; Hanawa, T.; Ono, T.; Uo, M. Mechanical Properties of Orthodontic Wires Made of Super Engineering Plastic. *Dent. Mater. J.* 2015, 34, 114–119. [CrossRef]
- Krey, K.-F. 3D-Printed Orthodontic Brackets—Proof of Concept Dreidimensional Gedruckte Kieferorthopädische Brackets—Eine Machbarkeitsstudie. Int. J. Comput. Dent. 2016, 19, 351–362. [PubMed]
- Community, B.O. Blender—A 3D Modelling and Rendering Package; Stichting Blender Foundation: Amsterdam, The Netherlands, 2018; Available online: http://www.blender.org (accessed on 30 July 2020).
- Maas, S.A.; Ellis, B.J.; Ateshian, G.A.; Weiss, J.A. FEBio: Finite elements for biomechanics. J. Biomech. Eng. 2012, 134, 011005. [CrossRef]
- 29. Available online: https://www.merz-dental.de/fileadmin/user\_upload/downloads/IFU/GBA\_PEEK\_BioSolution\_907187-2 021-08-05\_907260-2021-10-02\_907328-2021-09-01.pdf (accessed on 10 September 2019).
- 30. Schwindling, F.-P. Vom Centroid zur Widerstandszone. Kieferorthopädie 2020, 34, 39-46.
- 31. Viecilli, R.F.; Budiman, A.; Burstone, C.J. Axes of Resistance for Tooth Movement: Does the Center of Resistance Exist in 3-Dimensional Space? *Am. J. Orthod. Dentofac. Orthop.* 2013, 143, 163–172. [CrossRef]
- Scribante, A.; Gallo, S.; Pascadopoli, M.; Canzi, P.; Marconi, S.; Montasser, M.A.; Bressani, D.; Gandini, P.; Sfondrini, M.F. Properties of CAD/CAM 3D Printing Dental Materials and Their Clinical Applications in Orthodontics: Where Are We Now? *Appl. Sci.* 2022, 12, 551. [CrossRef]
- 33. Wilmes, B.; Vasudavan, S.; Drescher, D. CAD-CAM–Fabricated Mini-Implant Insertion Guides for the Delivery of a Distalization Appliance in a Single Appointment. *Am. J. Orthod. Dentofac. Orthop.* **2019**, *156*, 148–156. [CrossRef] [PubMed]
- Gabriele, O.D.; Dallatana, G.; Riva, R.; Vasudavan, S.; Wilmes, B. The Easy Driver for Placement of Palatal Mini-Implants and a Maxillary Expander in a Single Appointment. J. Clin. Orthod. 2017, 51, 728–737. [PubMed]
- 35. Brauer, L.; Pausch, N. Digital unterstützte kombiniert kieferorthopädisch-kieferchirurgische Therapie. Zahnmed. Up2date 2018, 12, 215–234. [CrossRef]
- Al Mortadi, N.; Eggbeer, D.; Lewis, J.; Williams, R.J. CAD/CAM/AM Applications in the Manufacture of Dental Appliances. Am. J. Orthod. Dentofacial Orthop. 2012, 142, 727–733. [CrossRef]
- Wolf, M.; Schumacher, P.; Jäger, F.; Wego, J.; Fritz, U.; Korbmacher-Steiner, H.; Jäger, A.; Schauseil, M. Novel Lingual Retainer Created Using CAD/CAM Technology: Evaluation of Its Positioning Accuracy. J. Orofac. Orthop. Fortschr. Kieferorthopadie Organ Off. J. Dtsch. Ges. Kieferorthopadie 2015, 76, 164–174. [CrossRef]
- Kravitz, N.D.; Grauer, D.; Schumacher, P.; Jo, Y. Memotain: A CAD/CAM Nickel-Titanium Lingual Retainer. Am. J. Orthod. Dentofacial Orthop. 2017, 151, 812–815. [CrossRef]

### 3. Diskussion

Mit der Weiterentwicklung der digitalen intraoralen Abformung verändern sich dentalen Prozessketten auch in der Kieferorthopädie und eröffnen neue Möglichkeiten.

Im Bereich der Diagnostik und der Therapieplanung werden bereits ausgereifte Softwaretools mit zahlreichen Applikationsmöglichkeiten angeboten und zunehmend in der Praxis genutzt (54). Die Etablierung digitaler Workflows zur Fertigung von kieferorthopädischen Behandlungsgeräten schreitet ebenfalls voran. Hier stehen dem kieferorthopädischen Behandler mehrere komplexe Programme zur virtuellen Konstruktion (CAD) der Apparaturen zur Verfügung. Die digitale Fertigung (CAM) kann im additiven oder im subtraktiven Verfahren erfolgen. Neueste Veröffentlichungen zeigen virtuell designte (CAD) und im selektiven Laserschmelzverfahren aus einem Metallpulver additiv gefertigte (CAM) Behandlungsapparaturen. Diese sind individuell auf die Bedürfnisse des einzelnen kieferorthopädischen Patienten angepasst und weisen eine sehr präzise Passung auf (55–57).

Mit weiterem Fortschritt der CAM-gestützten Fertigung werden auch stetig neue Materialien für den 3D-Druck oder die subtraktive Fertigung auf dem Dentalmarkt angebotenen. Diese Studie untersuchte das biokompatible Hochleistungspolymer Polyetheretherketon (PEEK), das in der Zahnmedizin bereits für dentale Implantate und als Zahnersatz verwendet wird. In der Kieferorthopädie wurde PEEK zur Herstellung herausnehmbarer und festsitzender Platzhalter und als Bogenmaterial für die Multi-Bracket-Apparatur getestet.

Die vorliegende Publikation konnte zeigen, dass sich das Hochleistungspolymer Polyetheretherketon (PEEK) grundsätzlich für die Herstellung von Apparaturen zur transversalen Expansion des Zahnbogens eignet. Dafür wurde in Zusammenarbeit mit der Hochschule Koblenz eine vollständig digitale Prozesskette entwickelt. Es konnten verschieden Geometrien von Expansionsapparaturen (TPAs) virtuell konstruiert und mithilfe einer computergesteuerten Fünf-Achsen-Fräsmaschine im subtraktiven CAM Verfahren aus PEEK hergestellt werden. Die hier vorgestellten Geometrien stehen beispielhaft für eine Vielzahl von Designmöglichkeiten. Mit der Weiterentwicklung des Materials und der 3D-Druck-Verfahren wäre in Zukunft möglicherweise auch eine additive Fertigung denkbar.

Die Ergebnisse der Analysen bestätigten therapeutisch günstige Expansionskräfte.

Durch die geringere Last-Biege-Rate des weniger steifen PEEK Materials (E-Modul 3-5 GPa) vergrößerte sich der Aktivierungsbereich, und verringerten sich die Nebenwirkungen im Vergleich zum klassischen analog aus federhartem Stahldraht hergestellten TPA.

Weitere Forschungen im Bereich der Optimierung der TPAs in Bezug auf die jeweilige individuelle Aufgabenstellung werden an der Hochschule Koblenz bereits durchgeführt.

# 4. Schlussfolgerung

Aufbauend auf den wissenschaftlichen Erkenntnissen aus dieser Forschungsarbeit wird es in Zukunft möglich sein, durch die Anwendung von CAD-Programmen für die jeweilige Aufgabenstellung individuelle und zielgerichtete TPAs zu entwickeln. Zudem ist durch die Fertigung im CAM-Verfahren eine hohe Präzision der Apparaturen zu erwarten. Dies sollte in weiterführenden experimentellen Studien evaluiert werden.

# 5. Literatur- und Quellenverzeichnis

- 1. Ender A, Mehl A. Accuracy in dental medicine, a new way to measure trueness and precision. J Vis Exp JoVE. 2014;(86).
- Ender A, Zimmermann M, Attin T, Mehl A. In vivo precision of conventional and digital methods for obtaining quadrant dental impressions. Clin Oral Investig [Internet]. 2015 Nov 7 [cited 2016 Jun 6]; Available from: http://link.springer.com/10.1007/s00784-015-1641-y
- Zimmermann M, Koller C, Rumetsch M, Ender A, Mehl A. Precision of guided scanning procedures for full-arch digital impressions in vivo. J Orofac Orthop Fortschritte Kieferorthopädie. 2017 Nov;78(6):466–71.
- 4. Wiranto MG, Engelbrecht WP, Tutein Nolthenius HE, van der Meer WJ, Ren Y. Validity, reliability, and reproducibility of linear measurements on digital models obtained from intraoral and cone-beam computed tomography scans of alginate impressions. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2013 Jan;143(1):140–7.
- 5. Akyalcin S, Cozad BE, English JD, Colville CD, Laman S. Diagnostic accuracy of impression-free digital models. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2013 Dec;144(6):916–22.

- 6. Burhardt L, Livas C, Kerdijk W, van der Meer WJ, Ren Y. Treatment comfort, time perception, and preference for conventional and digital impression techniques: A comparative study in young patients. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2016 Aug;150(2):261–7.
- 7. Sfondrini MF, Gandini P, Malfatto M, Di Corato F, Trovati F, Scribante A. Computerized Casts for Orthodontic Purpose Using Powder-Free Intraoral Scanners: Accuracy, Execution Time, and Patient Feedback. BioMed Res Int. 2018;2018:1–8.
- 8. Yuzbasioglu E, Kurt H, Turunc R, Bilir H. Comparison of digital and conventional impression techniques: evaluation of patients' perception, treatment comfort, effectiveness and clinical outcomes. BMC Oral Health. 2014 Dec;14(1):10.
- 9. Siqueira R, Galli M, Chen Z, Mendonça G, Meirelles L, Wang HL, et al. Intraoral scanning reduces procedure time and improves patient comfort in fixed prosthodontics and implant dentistry: a systematic review. Clin Oral Investig. 2021 Dec;25(12):6517–31.
- 10. Radeke J, von der Wense C, Lapatki BG. Comparison of orthodontic measurements on dental plaster casts and 3D scans. J Orofac Orthop Fortschritte Kieferorthopadie OrganOfficial J Dtsch Ges Kieferorthopadie. 2014 Jul;75(4):264–74.
- Czarnota J, Hey J, Fuhrmann R. Measurements using orthodontic analysis software on digital models obtained by 3D scans of plaster casts : Intrarater reliability and validity. J Orofac Orthop Fortschritte Kieferorthopadie OrganOfficial J Dtsch Ges Kieferorthopadie. 2016 Jan;77(1):22–30.
- 12. Al Mortadi N, Eggbeer D, Lewis J, Williams RJ. CAD/CAM/AM applications in the manufacture of dental appliances. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2012 Nov;142(5):727–33.
- 13. Al Mortadi N, Jones Q, Eggbeer D, Lewis J, Williams RJ. Fabrication of a resin appliance with alloy components using digital technology without an analog impression. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2015 Nov;148(5):862–7.
- 14. van der Meer WJ, Vissink A, Ren Y. Full 3-dimensional digital workflow for multicomponent dental appliances: A proof of concept. J Am Dent Assoc 1939. 2016 Feb 4;
- Graf S, Cornelis MA, Hauber Gameiro G, Cattaneo PM. Computer-aided design and manufacture of hyrax devices: Can we really go digital? Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2017 Dec;152(6):870–4.
- 16. Graf S, Vasudavan S, Wilmes B. CAD-CAM design and 3-dimensional printing of mini-implant retained orthodontic appliances. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2018 Dec;154(6):877–82.
- 17. Pasin, Tamina. Unser Weg in die digitale Kieferorthopädie und zur digital designten Herbst-Apparatur. KN. 2021;13:32–9.
- 18. Graf S, Vasudavan S, Wilmes B. CAD/CAM Metallic Printing of a Skeletally Anchored Upper Molar Distalizer. 2020;(3):10.
- 19. Willman et al. Digitale Mini-implantat getragene Suprakonstruktionen Design und Workflows. COO. 2019;16–20.
- Cantarella D, Quinzi V, Karanxha L, Zanata P, Savio G, Del Fabbro M. Digital Workflow for 3D Design and Additive Manufacturing of a New Miniscrew-Supported Appliance for Orthodontic Tooth Movement. Appl Sci. 2021 Jan 20;11(3):928.
- 21. Wolf M, Schumacher P, Jäger F, Wego J, Fritz U, Korbmacher-Steiner H, et al. Novel lingual retainer created using CAD/CAM technology: evaluation of its positioning accuracy. J Orofac

Orthop Fortschritte Kieferorthopadie OrganOfficial J Dtsch Ges Kieferorthopadie. 2015 Mar;76(2):164–74.

- 22. Krey KF, Pfitzner S, Kühnert R, Quooß A. 3-D-gedruckte Lingualretainer Wunsch und Wirklichkeit. :9.
- Cole D, Bencharit S, Carrico CK, Arias A, Tüfekçi E. Evaluation of fit for 3D-printed retainers compared with thermoform retainers. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2019 Apr;155(4):592– 9.
- 24. Wilmes B, Vasudavan S, Drescher D. CAD-CAM–fabricated mini-implant insertion guides for the delivery of a distalization appliance in a single appointment. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2019 Jul;156(1):148–56.
- 25. Gabriele OD, Dallatana G, Riva R, Vasudavan S, Wilmes B. The Easy Driver for Placement of Palatal Mini-Implants and a Maxillary Expander in a Single Appointment. 2017;(11):11.
- 26. Brauer L, Pausch N. Digital unterstützte kombiniert kieferorthopädisch-kieferchirurgische Therapie. Zahnmed Up2date. 2018 Jun;12(03):215–34.
- 27. Scribante A, Gallo S, Pascadopoli M, Canzi P, Marconi S, Montasser MA, et al. Properties of CAD/CAM 3D Printing Dental Materials and Their Clinical Applications in Orthodontics: Where Are We Now? Appl Sci. 2022 Jan 6;12(2):551.
- 28. TADMAN GmbH [Internet]. Available from: https://www.tadman.de
- 29. orthoLIZE GmbH [Internet]. Available from: https://www.ortholize.de
- 30. Kravitz ND, Grauer D, Schumacher P, Jo Y min. Memotain: A CAD/CAM nickel-titanium lingual retainer. Am J Orthod Dentofacial Orthop. 2017 Apr;151(4):812–5.
- 31. Rahmitasari F, Ishida Y, Kurahashi K, Matsuda T, Watanabe M, Ichikawa T. PEEK with Reinforced Materials and Modifications for Dental Implant Applications. Dent J. 2017 Dec 15;5(4):35.
- 32. Jockusch J, Özcan M. Additive manufacturing of dental polymers: An overview on processes, materials and applications. Dent Mater J [Internet]. 2020 [cited 2020 Mar 23]; Available from: https://www.jstage.jst.go.jp/article/dmj/advpub/0/advpub\_2019-123/\_article
- Schwitalla A, Müller WD. PEEK Dental Implants: A Review of the Literature. J Oral Implantol. 2013 Dec 1;39(6):743–9.
- 34. Skirbutis G. PEEK polymer's properties and its use in prosthodontics. A review. Stomatol Balt Dent Maxillofac J. 2018;20(2):54–8.
- 35. Alexakou E. PEEK High Performance Polymers: A Review of Properties and Clinical Applications in Prosthodontics and Restorative Dentistry. Eur J Prosthodont Restor Dent. 2019;(27):113–21.
- 36. Kurahashi K, Matsuda T, Ishida Y, Ichikawa T. Effect of polishing protocols on the surface roughness of polyetheretherketone. J Oral Sci. 2020;62(1):40–2.
- 37. Ierardo G, Luzzi V, Lesti M, Vozza I, Brugnoletti O, Polimeni A, et al. Peek polymer in orthodontics: A pilot study on children. J Clin Exp Dent. 2017;e1271–5.
- 38. Maekawa M, Kanno Z, Wada T, Hongo T, Doi H, Hanawa T, et al. Mechanical properties of orthodontic wires made of super engineering plastic. Dent Mater J. 2015;34(1):114–9.

- Shirakawa N, Iwata T, Miyake S, Otuka T, Koizumi S, Kawata T. Mechanical properties of orthodontic wires covered with a polyether ether ketone tube. Angle Orthod. 2018 Jul;88(4):442–9.
- 40. Burstone CJ, Koenig HA. Precision adjustment of the transpalatal lingual arch: Computer arch form predetermination. Am J Orthod. 1981 Feb;79(2):115–33.
- Baldini G, Luder HU. Influence of arch shape on the transverse effects of transpalatal arches of the Goshgarian type during application of buccal root torque. Am J Orthod. 1982 Mar;81(3):202–8.
- 42. Hoederath H, Bourauel C, Drescher D. Differences between Two Transpalatal Arch Systems upon First-, Second-, and Third-Order Bending Activation: J Orofac Orthop Fortschritte Kieferorthopädie. 2001 Jan;62(1):58–73.
- 43. Wichelhaus A, Sander C, Sander FG. Development and Biomechanical Investigation of a New Compound Palatal Arch. J Orofac Orthop Kieferorthop die. 2004 Feb 1;65(2):104–22.
- 44. Jäger A, Planert J, Modler H, Gripp L. In-vitro-Studie zur Anwendung von Palatinalbögen bei der Kontrolle der Position oberer Molaren. Fortschritte Kieferorthopädie. 1992 Jul;53(4):230–8.
- 45. Burstone CJ, Manhartsberger C. CJ. Precision lingual arches. Passive applications. J Clin Orthod. 1988; 22: 444-451. Am J Orthod. 1981 Jul;80(1):1–16.
- 46. Tsetsilas M, Konermann AC, Keilig L, Reimann S, Jäger A, Bourauel C. Symmetric and asymmetric expansion of molars using a Burstone-type transpalatal arch: Biomechanical and clinical analysis. J Orofac Orthop Fortschritte Kieferorthopädie. 2015 Sep;76(5):377–90.
- Gündüz E, Crismani AG, Bantleon HP, Hönigl KD, Zachrisson BU. An improved transpalatal bar design. Part II. Clinical upper molar derotation--case report. Angle Orthod. 2003 Jun;73(3):244– 8.
- Ambrositsch P, Bantleon HP. Der S-Garian TPA Einsatzmöglichkeiten und Vorteile des Transpalatinalbogendesigns. Informationen Aus Orthod Kieferorthopädie. 2016 Apr 14;48(01):7–10.
- 49. Nikkerdar A. Butterfly arch: a device for precise controlling of the upper molars in three planes of space. J Dent Tehran Iran. 2013 May;10(3):221–6.
- Community BO. Blender a 3D modelling and rendering package [Internet]. Stichting Blender Foundation, Amsterdam; 2018. Available from: http://www.blender.org [Internet]. Blender. Available from: https://www.blender.org
- P. Cignoni, M. Callieri, M. Corsini, M. Dellepiane, F. Ganovelli, G. Ranzuglia. MeshLab: an Open-Source Mesh Processing Tool Sixth Eurographics Italian Chapter Conference, page 129-136, 2008 [Internet]. Available from: https://www.meshlab.net
- 52. Maas SA, Ellis BJ, Ateshian GA, Weiss JA: FEBio: Finite elements for biomechanics. Journal of Biomechanical Engineering, 134(1) 2012. [Internet]. FEBio. Available from: https://febio.org
- 53. John W. Eaton, David Bateman, Søren Hauberg, Rik Wehbring. GNU Octave version 6.2.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations. [Internet]. 2021. Available from: https://www.gnu.org/software/octave/doc/v6.2.0/
- 54. Gerhart C, Radeke J, Elkholy F, Schramm E, Lapatki BG. Digitale Kiefermodelle Erstellung und kieferorthopädisch-diagnostische Anwendungen. Informationen Aus Orthod Kieferorthopädie. 2021 Jun;53(02):99–110.

- 55. Wilmes B, Willmann J, Bräutigam M, Bonitz L, Drescher D. Einordnung ankylosierter Zähne im digitalen Zeitalter. Informationen Aus Orthod Kieferorthopädie. 2021 Jun;53(02):133–42.
- Wilhelmy L, Willmann JH, Goldberg M, Wilmes B, Drescher D. Oberkiefer-Lückenschluss mittels Mesialslider und digitalem Workflow. Informationen Aus Orthod Kieferorthopädie. 2021 Mar;53(01):39–45.
- Bertl MH, Astl E. Digitaler Workflow zur Herstellung eines modifizierten Transpalatinalbogens zur Scherenbisskorrektur. Informationen Aus Orthod Kieferorthopädie. 2021 Dec;53(04):285– 90.

# 6. Anhang

CAD/CAM - Workflow zur Fertigung und Analyse eines Transpalatinalbogens

# Computer Aided Design (CAD)

Digitalisierung der intraoralen Situation Generierung eines STL-Modelldatensatzes

Import der STL-Dateien in BLENDER\* (eine Open-Source CAD software)

Virtuelles Design eines Transpalatinalbogens:

1. Konstruktion von zwei *Shells*, (liegen den zu bewegenden Molaren palatinal an und übertragen die Kraft auf die Zähne)

2. Individuell gestaltbarer *Gaumenbogen:* (wird mithilfe einer *Bezier-Curve* konstruiert und die Dimension mithilfe des *Bezier-Circles* erzeugt)

3. Nach Fertigstellung der Apparatur kann die *Curve* in ein *Mesh* konvertiert werden.

4. Alle Teile (2x Shells + Verbindungselement(e)) werden markiert und als STL-Datei exportiert.



1





\* Community, B. O. (2018). Blender - a 3D modelling and rendering package. Stichting Blender Foundation, Amsterdam. Retrieved from <u>http://www.blender.org</u> CAD/CAM - Workflow zur Fertigung und Analyse eines Transpalatinalbogens 2

### Generierung und Optimierung von digitalen Netzen (Meshes)

Umwandlung der in Blender erzeugten Netze in homogene Oberfächennetze mit der freien Software: Meshmixer\*

Import Objekt als STL-Datei

Zusammensetzen der Einzelteile 2Shells + Bogen (Edit>Make Solid)

Herstellung qualitativ hochwertiger Netze für die Finite-Elemente-Analyse (FEA) (Edit>Remesh>Smooth)

Format

Export Objekt im PLY (Stanfort Polygon File)-

Bearbeitung und Reparatur der 3D-Netzte mit der freien Software: Meshlab\*

Import der Datei im PLY-Format

Anwendung verschiedener Reparaturwerkzeuge:

- Cleaning and Repairing
- Remeshing, Simplification and Reconstruction
- Normals, Curvatures and Orientation

Export Mesh im PLY-Format



\*Autodesk Meshmixer (RRID:SCR\_015736) \*MeshLab 2020.07

## Finte Elemente Analyse (FEA)

FEBio\* ist eine Open-Source-Software für Finite Elemente Analysen (aus der Biomechanik, zur Beschreibung und numerischer Berechnung von strukturmechanischen Problemen)

<u>PreView</u> ist ein Finite-Elemente-Präprozessor zum Importieren und materialspezifischen definieren von 3D-Objekten.

Import Geometry im PLY-Format

<u>1. Build Mesh</u> Convert >Editable Mesh >TetGen

2. Add Material Name: Peek Category: elastic Material: isotropic elastic density:1 Young's modul: 5100 N/mm<sup>2</sup> Poisson's ratio: 0,42



3. Add boundary conditions Physiks>add bc Name: Shell 16 Step:Initial Prescribed displacement: x 2, y 0, z 0 erneut Physiks>add bc Name: Shell 26 Step:Initial Prescribed displacement: x -2, y 0, z 0

<u>4.</u> <u>Add Steps</u> Name: / Structural Mechanics Typ: static Name: Step 1

5. Output:

- Displacement
- Reaction Forces
- Stress



Save as PRV-Datei (PreView-Datei) für die Berechnung im Gleichungslöser (FEBio-Run) + Export FE Model als FEB-Datei zum erneuten Import in FEBio.

\*Maas SA, Ellis BJ, Ateshian GA, Weiss JA: FEBio: Finite elements for biomechanics. Journal of Biomechanical Engineering, 134(1) 2012.

### Finite Elemente Analyse

<u>PostView</u> ist ein Finite-Elemente-Postprozessor zur Visualisierung und Analyse der Ergebnisse von FEBio PreView.

Import Datei im XPLT-Format

Grafische Darstellung der Verformung (Displacement) in [mm] Hier bis 4 mm je Seite (rote Bereiche) 406 347 334 334 334 311 228 233 214 19 19 166

Grafische Darstellung der Spannung (Stress) in [MPa] Hier bis 165 MPa



Die resultierenden Kräfte (reaction forces) in [N] werden exportiert und mit GNU Octave\* einer freien Software zur numerischen Lösung mathematischer Probleme, berechnet.

Octave öffnen, Skript starten

Eingabe der Widerstandszentren der Molaren 16 und 26 im Befehlsfenster zur Berechnung der Drehmomente.

Das Kräftesystem wird berechnet:

- resultierenden Kräften Fx, Fy, Fz in [N]
- Drehmomenten Mx, My, Mz in [Nmm]

Add 🔽 Co	Delete	Filter Ex	port		
Data field	Type	Class	Format		
displacement	vec3f	NODE	ITEM		
reaction forces	vec3f	NODE	ITEM		
stress	mat3fs	ELEM	ITEM		
Lagrange strain	mat3fs	ELEM	ITEM		
position	vec3f	NODE	ITEM		
initial position	vec3f	NODE	ITEM		
pressure	float	ELEM	ITEM		

> test script

[] up-order (stable). When position making my how serves, all grimenty trend (stable). If it is in the property is in the stable (stable) is in the stable of the stable makes is any investigation of the stable of the sta
inter toots-centresinjis,v.i+j Gt -
0.34771 10.25896 16.36674
ketrag des Bretmoments: 19.3204 78 -
7.29614 -0.18973 0.11987
£. =
-0.46738 -25.27855 -26.89106
betrag dem Brehmonents: 22.404 75 -
-7.29614 8.18971 -0.11963
**

\*Maas SA, Ellis BJ, Ateshian GA, Weiss JA: FEBio: Finite elements for biomechanics. Journal of Biomechanical Engineering, 134(1) 2012. \*GNU Octave, version 4.0.3, 2016 John W. Eaton and others

# Computer Aided Manufacturing (CAM)

im Fräszentrum Dentes\*

Subtraktive Fertigung mit der Fünf-Achsen Fräsmaschine: COR TEC 350i Loader\* Abb.1: ausgefräster PEEK Rohling

Abb.2: Stützstrukturen werden händisch entfernt



Abb.3 und 4: Fertiger Transpalatinalbogen aus PEEK





Abb.5: 3D gedruckte Halterung aus Polyamid\* für den *in vitro* Versuch



Abb.6 biomechanischer *in vitro* Versuch



Dentes, Fräszentrum GmbH, Neuss, Deutschland imes-icore® GmbH, Eiterfeld, Deutschland Protiq, 3D Druck GmbH, Blomberg, Deutschland

# 7. Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei nachstehenden Personen bedanken, da ohne ihre Unterstützung die Anfertigung dieser Promotionsschrift niemals zustande gekommen wäre:

Mein besonderer Dank gilt Herrn Professor Drescher, meinem Doktorvater, für die Betreuung dieser Arbeit. Hier möchte ich mich insbesondere für die Überlassung des interessanten und innovativen Themas, für die zahlreichen konstruktiven Gespräche und für die Überarbeitungen der Publikation, sowie der Dissertation herzlich bedanken.

Des Weiteren möchte ich mich herzlich bei Herr Professor Schmidt, meinem Co-Doktorvater, für die hilfsbereite und kompetente Betreuung bei der Finite Elemente Analyse bedanken. Unsere zahlreichen Treffen an der Hochschule in Remagen werden mir in sehr guter Erinnerung bleiben.

Mein außerordentlicher Dank gilt Frau Dr. Kathrin Becker, ohne deren geduldige und unkomplizierte Hilfe die Übersetzung und die Publikation meines Artikels niemals hätte gelingen können.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meinen guten Freunden Jens Bongartz, Iris Wilcke und Martin Bewerunge herzlich fürs Korrekturlesen und für ihre motivierenden Gespräche bedanken.

Mein ganz besonderer Dank gilt meiner Familie, denen ich diese Arbeit widme. Danke an meinem lieben Ehemann, der mich immer wieder ermutigt hat und meinen wunderbaren Kindern, die jetzt froh sind, dass ihre Mutter endlich wieder mehr Zeit für sie hat.