

광-유체링공진기(OFRR) 바이오센서에 관한 공진이동과 양호도의 시뮬레이션

조한근 한진우 양길모

Simulation of Resonance Shift and Quality Factor for Opto-fluidic Ring Resonator (OFRR) Biosensors

H. K. Cho J.-W. Han G. Yang

Abstract

In this work, the finite element method was used to investigate the shifts of resonance frequencies and quality factor of whispering-gallery-mode (WGM) for an opto-fluidic ring resonator (OFRR) biosensor. To describe the near-field radiation transfer, the time-domain Maxwell's equations were employed and solved by using the in-plane TE wave application mode of the COMSOL Multiphysics with RF module. The OFRR biosensor model under current study includes a glass capillary with a diameter of 100 μm and wall thickness of 3.0 μm . The resonance energy spectrum curves in the wavelength range from 1545 nm to 1560 nm were examined under different biosensing conditions. We mainly studied the sensitivity of resonance shifts affected by changes in the effective thickness of the sensor resonator ring with a 3.0 μm thick wall, as well as changes in the refractive index (RI) of the medium inside ring resonators with both 2.5 μm and 3.0 μm thick walls.

In the bulk RI detection, a sensitivity of 23.1 nm/refractive index units (RIU) is achieved for a 2.5 μm thick ring. In small molecule detection, a sensitivity of 26.4 pm/nm is achieved with a maximum Q-factor of 6.3×10^3 . These results compare favorably with those obtained by other researchers.

Keywords : OFRR biosensors, Whispering gallery mode, Resonant shift, Quality factor, Finite element method, Simulation

1. 서론

농업·환경(토양 및 식품 잔류 제초제, 살충제, 항생제), 의약(질병진단, 약물검출), 과학기술(단백질학, 생물학), 국가안보(생화학 무기)와 같은 분야에서 분자분석을 위해서는 무표식자(label-free) 방식의 광학 센서가 효과적이며 빠른 측정결과를 보이는 것으로 알려져 있다. 표면플라즈몬공명(surface plasmon resonance, SPR)에 기초한 분석기술은 시료의 종류에 따라 1 ppt 수준까지 측정할 수 있는 높은 검출감도로 인해 비교적 널리 활용되고 있다. 농산물의 잔류농약과 같은 유해물질의 다양한 성분을 동시에 검출하기 위해서는 다채널

센서의 구성이 필요하다. 그러나 SPR 바이오센서는 광학렌즈의 배열이 복잡하여 다채널 센서를 구성하기 어려운 문제를 갖고 있다(Yang et al., 2008). 여러 개의 미세유로관과 레이저도파관을 각각 병렬로 교차시킴으로서 이를 해결할 수 있는 기술로 속삭임회랑모드(whispering gallery modes, WGM)를 활용한 바이오센서를 선택할 수 있다.

WGM 공진현상은 초정밀 바이오센서는 물론 마이크로레이저, 협대역 필터, 광 스위치, 고분해능의 분광계 등에 활용될 가능성이 많기 때문에 많은 주목을 받고 있다. WGM 바이오센서는 단백질, DNA, 펩티드, 독성분자 등의 식별과 검출이 가능하다(Guo et al., 2005). 최근에는 WGM 바이오센

This work was supported by the research grant of the Chungbuk National University in 2009. The article was submitted for publication on 2011-01-24, reviewed on 2011-01-31, and approved for publication by the editorial board of KSAM on 2011-02-08. The authors are Han Keun Cho, KSAM member, Professor, Jinwoo Han, Professor, Dept. of Physics, Daegu University, and Gilmo Yang, KSAM member, Senior Researcher, National Academy of Agricultural Science, RDA. Corresponding author: H. K. Cho, Professor, Dept. of Biosystems Engineering, Chungbuk National University, Cheongju, 361-763, Korea; Fax: +81-43-271-4413; E-mail:<hkcho@cbu.ac.kr>

서 중에서 광학과 마이크로유체학을 결합한 광-유체링공진기(opto-fluidic ring resonator, OFRR) 바이오센서가 관심을 끌고 있다(Fan et al., 2008). OFRR 기술은 표식이 불필요하고, 감도가 높고, 신속하고, 제작이 쉽고, 초소형 구조로 적은 량의 시료가 필요할 뿐 아니라 다채널 센서의 구성이 가능한 많은 장점을 갖고 있다(Zhu et al., 2010).

Quan and Guo(2005)는 유한요소법으로 초소형구 센서에서 WGM의 공진주파수 이동을 분석하였다. 이를 위해 편미분방정식을 유한요소법으로 해석하는 상용 소프트웨어인 FEMLAB을 사용하여 다양한 바이오센싱 조건으로 213-220 THz의 주파수 범위에서 공진강도 스펙트럼을 조사하였다. 분석결과 WGM 센서로 0.1 nm 정도의 분자크기 변화의 구별이 가능하며 일반적인 광스펙트럼 분석기를 사용할 때 1/1,000 크기의 굴절을 변화까지 구별이 가능한 것으로 추정하였다. 대부분의 연구는 센서공진기의 크기 변화와 공진기 주위 시료의 굴절을 변화에 따른 공진주파수 이동감도의 분석에 중점을 두었다. White 등(2006)은 WGM의 소산파(evanescent field)를 사용하는 liquid-core optical ring resonator biosensor (LCORR)를 개발하여 광학적 특성을 분석하였다. 물과 에탄올의 혼합물로 실험한 결과 스펙트럼 감도는 단위 굴절을 당 2.6 nm로 확인되었다. 실험결과를 설명하기 위해 Mie 이론에 기초한 모델식을 활용하였다. Yang 등(2008)은 유기인계 농약의 검출을 위해 OFRR 바이오센서를 개발하여 상용 SPR 센서와 성능을 비교하였다. 개발된 OFRR의 검출한계는 3.8×10^{-11} M로서 미량의 살충제를 검출하기에 충분한 것으로 보고하였다. 이 검출한계는 SPR 보다 다소 큰 값이었지만 검출에 소요된 시간은 SPR의 경우보다 10배 빠른 30초로 확인되었다. Li and Fan(2010)은 OFRR의 검출능력을 조사하는 연구에서 570 nm/RIU의 감도와 1.2×10^5 의 양호도(quality factor, Q-factor)를 확인하였다. 이 결과는 OFRR 성능의 기준을 확립하였고 다른 무표식 광센서와 비교할 만 한 것으로 보고되었다.

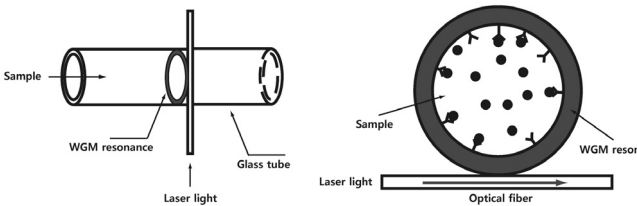


Fig. 1 The schematic diagram of the OFRR biosensor.

WGM을 활용한 바이오센서의 공진기로 구(sphere), 원반(disk), 실린더(cylinder) 또는 링(Ring) 등이 사용되는데 구의 경우 다채널 구성, 항체 고정화 및 시료공급에 어려움이 많아 최근에는 제작이 비교적 간편하고 시료공급에 유리한 실린더형 링 공진기(LCORR, OFRR)에 대한 연구가 많이 보고되는

추세이다. WGM 공명은 공진기의 형태에 의존적이므로(Arnold et al., 2003), 공진기 크기, 광도파관의 크기, 공진기와 광도파관의 간격은 광특성을 결정하는 중요한 요소이다. 디스크와 구의 광특성 분석을 위해 유한요소법을 활용한 연구가 보고되었으며(Quan and Guo, 2005), 링 공진기의 경우에는 Mie 이론에 근거한 모델을 적용한 공진기의 분석은 가능하나(White et al., 2006), 공진기와 광도파관으로 결합된 시스템의 특성분석은 어렵고 수치해석적인 방법을 이용한 연구는 보고된 바가 없다. 따라서 본 연구에서는 시뮬레이션을 통한 OFRR 바이오센서의 설계인자를 구명하기 위하여, 광화이버와 초소형 링실린더가 결합된 바이오센서의 모델식을 구성하고 유한요소법을 이용한 수치해석방법으로 OFRR 바이오센서에서의 전자장분포와 에너지분포를 조사하고, 링 공진기의 두께 및 시료용액의 굴절율에 따른 공진파장의 이동(resonance shift)과 양호도(quality factor)를 분석하였다.

2. 재료 및 방법

가. WGM 공진

1) 개념

최근에는 나노입자 크기의 소재 제조기술의 등장으로 광파장의 수 배 정도 크기(~수 마이크로)의 광 공진기 제작이 가능해졌다. WGM은 공진기의 원주 둘레로 빛이 반사될 때 내부전반사에 의해 공진기 내부에 구속 유지되어 공진현상을 일으켜 공진기 내에서 누설되는 광량은 극히 작은 편이다. 실린더형 모세관 링 공진기의 두께는 보통 4 μm 이하로 WGM 소산파가 모세관 내부표면을 따라 확산되어 모세관에 있는 분석물을 검출하게 된다. 링 공진기의 작은 크기에도 불구하고 WGM 공진현상으로 인하여 광-분석물의 반복적인 상호작용이 가능해져 검출감도가 상당히 증가하게 된다.

공진기로 빛을 보내기 위해서는 WGM 공진파와 광도파관의 소산파가 서로 겹치도록 해야 한다(Fig. 2). 공진기와 광도파관의 굴절율이 비슷한 경우 광자(photon)는 광도파관에서 공진기로 이동하게 된다. 그림 2는 OFRR 바이오센서와 같은 모양의 마이크로링 공진기(직경 10 μm, 파장 801 nm)의 비공진상태(a)와 공진상태(b)를 나타낸다. 그림 2(b)에서는 광도파관의 소산파가 공진기의 링에 전달되어서 WGM 공진파가 형성된 것을 알 수 있다.

WGM 링 공진기에 형성된 공진파의 에너지를 광파장의 함수로 그래프를 그려보면 공진피크가 매우 뾰족하고, 인접한 두 개의 피크 간격은 매우 안정적이다. 공진주파수는 공진기의 크기나 인접한 매체의 굴절을 등의 광특성에 따라 변하기 때문에 분자 단위의 검출도 가능하게 한다. 마이크로링 공진기의 경우 내벽에 분자가 흡착되면 공진기의 실효적 크기나 광특성이 바뀌게 되어 공진주파수의 이동을 초래하게 된

다. 특정분자의 효과적인 검출을 위해서는 투사 레이저광의 조절범위, 공진기 크기, 공진기와 도파관의 간격, 및 재료의 굴절율과 같은 해당 센서 구조에 대한 최적화 설계가 필요하다. 실험을 통해 주요 인자들을 최적화하기 위해서는 많은 시간과 비용이 요구되므로 컴퓨터 시뮬레이션을 통한 모의실험이 바람직하다.

WGM 공진을 이용한 센서에서 양호도는 매우 중요하며 그 값이 클수록 감도와 정확도가 커진다. 양호도 Q 는 한 주기 동안 공진기에 저장된 에너지와 손실된 에너지 비에 $2p$ 를 곱한 값으로 정의된다. 양호도는 공진기의 에너지 저장능력과 공진주파수의 대역폭을 결정한다. Q 는 산란손실이나 공진기 내 재료의 흡수 또는 방출에 의존한다. 재료의 흡수 또는 산란, 표면 거칠기, 재료의 불균일성은 양호도를 감소시킨다. 일반적으로 공진 스펙트럼은 Lorentzian 선형을 보이며 양호도는 식, $Q = f_o / \Delta f$ 로 표현되며, f_o 는 공진주파수이며, Δf 는 공진주파수 절반 값의 주파수 폭(the full-width at half maximum, FWHM)에 해당된다.

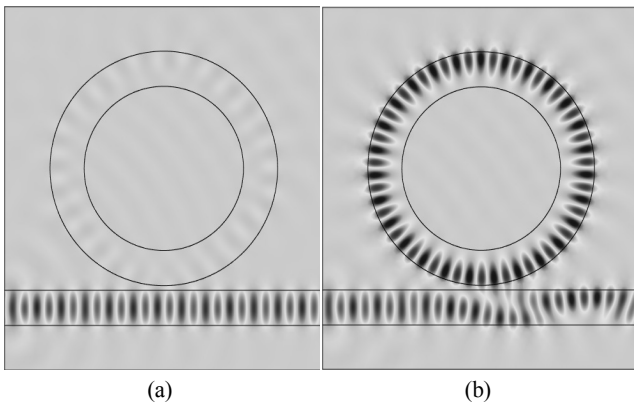


Fig. 2 Electric fields under off-resonance(a) and the first-order resonance(b).

2) 전자파이론

WGM공진기-도파관의 전자장은 시간에 종속적인 Maxwell 방정식으로 표현된다. 이 식에 시간-조화파를 대입하면 식 (1-a) 및 식 (1-b)와 같은 두 개의 Helmholtz 방정식이 된다.

$$\frac{1}{\mu} \nabla^2 \bar{E} + \omega^2 \epsilon_c \bar{E} = 0 \quad (1-a)$$

$$\frac{1}{\mu} \nabla^2 \bar{H} + \omega^2 \epsilon_c \bar{H} = 0 \quad (1-b)$$

여기에서 \bar{E} 와 \bar{H} 는 각각 전기장벡터와 자기장벡터이고, 유전율(복소수)은 $\epsilon_c = \epsilon_{cr} \epsilon_0 = \epsilon - i(\sigma/\omega)$ 여기에서 ϵ_{cr} 은 복소수 상대 유전율, ϵ_0 는 진공에서의 유전율, ϵ 는 매질의 유전율, σ 는 전기전도도, μ 는 투자율이고, 각속도 $\omega = 2\pi c/\lambda$ 이고 c 는 매질에서의 광속이고 λ 는 광파장이다.

식 (1-a)를 그림 3과 같은 광-유체링공진기에 적용하여 링 실린더 영역에서 반경방향의 전기장분포를 구하면 식 (2)와 같다.

$$E_{m,l}(r) = \begin{cases} AJ_m(k_{m,l} n_s r) & (r \leq a) \\ BJ_m(k_{m,l} n_r r) + CH_m^{(1)}(k_{m,l} n_r r) & (a \leq r \leq b) \\ DH_m^{(1)}(k_{m,l} n_a r) & (r \geq b) \end{cases} \quad (2)$$

여기서 $J_m(r)$ 과 $H_m^{(1)}(r)$ 은 m 번째 Bessel함수와 1-형 m 번째 Hankel 함수이다. 그리고 m 과 l 은 각각 azimuthal mode 수와 radial mode 수이고, $k_{m,l}$ 은 mode 수가 m 과 l 인 WGM 파에 대한 진공에서의 파수벡터(wave vector)의 크기이며, 공진파장은 $\lambda_{m,l} = 2\pi/k_{m,l}$ 이다. 또 n_s, n_r, n_a 는 각 영역(링의 내부, 링, 링의 외부)에서 빛의 굴절율이고 a 와 b 는 그림 3에서와 같이 각각 링의 내경과 외경이다. A, B, C, D는 경계치 조건에 의하여 결정되는 상수들이다.

나. 시뮬레이션 모델 및 실험방법

1) 시뮬레이션 모델

Quan and Guo(2005)는 구형 WGM 공진기와 광섬유 결합계에 대한 전자기 및 복사에너지의 시뮬레이션 연구에서 유한요소법을 사용하였다. 전기동력학적 문제의 수치해석을 위해 유한차분법(FDM)이 많이 사용되고 있지만, FDM은 정상해를 구하는데 많은 시간과 컴퓨터 메모리를 필요로 한다. 본 연구에서와 같이 실린더와 도파관이 결합된 불규칙한 구조를 다루는 경우에는 유한요소법(FEM)이 FDM에 비해 더 많은 장점을 갖게 된다. 따라서 시뮬레이션에 의한 최적설계에는 FEM을 사용하는 것이 적절하다. 본 연구에서는 COMSOL Multiphysics(ver. 4.1, COMSOL Inc, MA, USA)를 사용하였다. 이 소프트웨어를 이용하여 FEM의 모델링, mesh, 계산 및 후처리 등 일련의 작업을 동시에 처리할 수 있다.

모델링은 실험용 OFRR 바이오센서를 대상으로 하였으며 각 부재들의 제원은 표 1과 같다. 마이크로실린더 링 공진기의 재료는 모세관유리(#A120-85-10, Sutter instrument, CA, USA)이고, 광도파관의 재료는 광섬유(#SMF 28, Corning Inc., NY, USA)이다. 레이저 여기를 위해서는 1,550 nm 파장대를 사용하여 192-195 THz의 주파수 범위를 사용하였다.

링 실린더 내부에 발생되는 WGM 공명은 광도파관의 입력광과 동일한 선상에 놓이게 된다. 따라서 2차원 시뮬레이션 모델을 사용할 수 있다. 그림 3은 OFRR 바이오센서의 시뮬레이션 모델을 나타내며 전체 영역은 가로 180 μm , 세로 190 μm 크기의 직사각형이다. 이 영역을 213,000개의 삼각형 모양의 요소로 나누었다. 마이크로링 공진기의 단면이 가운데에 위치하고 그 아래에 광도파관이 수평으로 놓여 링과 접촉하여 있다.

Table 1 Specification of the parts used in simulation

Parts	Parameter	Size (μm)	Refractive index
Resonator	Outside diameter*	100	1.5200
	Thickness**	2.5, 3.0	
Waveguide	Outside diameter	2	1.4682
Air	N/A	N/A	1.0000
Sample solution	N/A	N/A	1.3330

*, **: $(2 \times a)$ and $(b - a)$ in Fig. 3, respectively

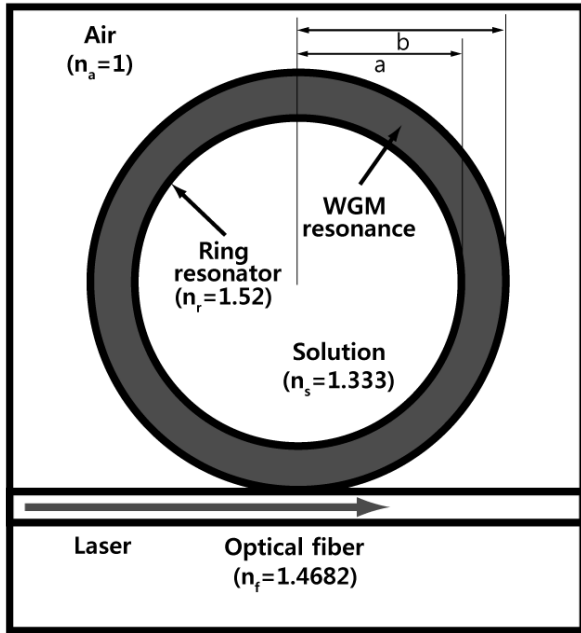


Fig. 3 The simulation model of an OFRR biosensor.

2) 정확한 시뮬레이션을 위한 mesh 파라미터 설정

연구에 사용된 소프트웨어인 COMSOL Multiphysics의 mesh 크기에 따른 정확도와 감도를 확인하기 위하여 링 실린더형 공진기를 대상으로 수치해석적인 실험을 하였다. 실린더의 외경은 $5 \mu\text{m}$, 링의 두께와 광도파관의 외경은 각각 $1 \mu\text{m}$, 그리고 실린더와 도파관의 간격은 200 nm 로 고정하고, 공진파장으로는 816.39 nm 를 사용하였다. 또 공진기와 공기의 굴절율은 각각 2.01과 1.0을 적용하였다. 이 소프트웨어에는 요소를 만드는 메뉴로 일반적인 크기로 잘게 나누는 ‘일반요소화’ 기능과 부분적으로 더 작은 크기로 나누어 주는 ‘지역세밀화(local mesh refining)’ 기능이 포함되어 있다. 또한 공진기 원주, 소형 광도파관 및 gap 영역과 같이 예민한 영역에서의 급격한 변화를 처리하기 위한 메시경사법(mesh gradient approach)을 채택하고 있다. 전체적인 mesh 개수를 최소화하여 컴퓨터 메모리의 효율적인 사용을 위해 광에너지가 상대적으로 많이 분포될 광도파관과 실린더링의 영역은 지역세밀화를 선택하였고, 그 이외의 영역은 일반 요소화를 선택하였다.

그림 4는 외경 $5 \mu\text{m}$ 의 링 실린더형 공진기에 사용된 시뮬레이션 영역의 유한요소 mesh를 보여주고 있다. 이 그림에서 실제로 존재하는 실린더 공진기는 가운데 원과 안쪽 원 사이의 링 부분이다. 바깥 원은 영역을 설정하기 위한 목적으로 그린 것이다. 공진파는 가운데 원의 바로 안쪽 부분에 형성되므로 인접한 영역, (즉, 가운데 원과 바깥 원 사이의 “외부에 접한 가상의 링”과 가운데 원과 안쪽 원 사이의 “내부에 위치한 링”)은 mesh의 크기를 세밀하게 설정할 필요가 있다. 따라서 내부에 위치한 링과 아래에 인접한 광도파관은 ‘일반요소화’ 메뉴와 ‘지역세밀화’ 메뉴를 추가하여 더 작은 요소로 나누었고, 링 외부에 접한 가상의 링은 링의 작은 직경으로 인해 곡률이 커져 산란과 회절이 증가하여 공진기 표면에서의 광에너지 누출이 생기므로 보다 정확한 계산을 위해 ‘일반요소화’ 메뉴에 ‘지역세밀화’ 기능을 추가로 선택하였다. 나머지 외곽 부분과 링의 안쪽에는 광에너지가 상대적으로 적게 존재하므로 메모리 절약을 위해 ‘일반세밀화’ 기능만 선택하였다.

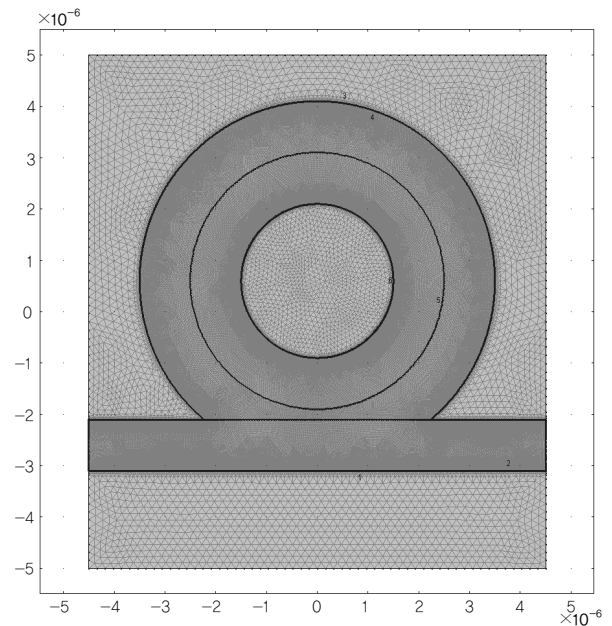


Fig. 4 Finite element meshes for the simulation domain of the $5 \mu\text{m}$ diameter micro-cylinder system (unit: m).

일반적으로 요소의 수는 그물망(mesh)처럼 나누는 요소 중 최대요소 크기(M_{max})에 따른다. 이 M_{max} 가 작으면 요소의 수는 더 많아져 많은 용량의 컴퓨터 메모리가 필요하며 계산 시간도 더불어 증가한다. 계산 정확도와 메모리용량 또는 계산 시간은 서로 상충되므로 균형있는 선택이 필요하다. 본 실험에 사용된 PC에는 2.93 GHz CPU, 16 GB RAM 및 64 bit Win 7 운영체제가 탑재되어 있다. 이 소프트웨어에 정해진 방법을 사용할 경우 크기가 작은 순으로 ‘extremely fine’에서 ‘extremely coarse’까지 모두 9 등급의 크기 선택이 가능

하도록 되어 있다. 이 컴퓨터로 ‘normal’ 등급의 요소 117,616 개로 구성된 시뮬레이션 모델을 대상으로 실행한 경우 1회당 소요 시간은 16.91 s/run 이고, 1,545~1,550 nm 구간에서의 공진주파수를 찾기 위해 0.01 nm 간격으로 실행하면 실행 수는 1,500 회가 되어 25,365 s가 소요된다.

표 2는 사용된 시뮬레이션영역에 대한 정해진 등급별 최대 요소의 크기(M_{max})와 상대오차 및 요소의 수를 나타낸다. 이 시뮬레이션 영역에서 ‘extremely fine’ 등급의 경우 M_{max} 가 0.10 μm 이고, 생성된 요소의 수는 2,998,352 개이나 메모리 한계의 이유로 다음으로 작은 ‘extra fine’ 등급의 계산 결과가 계산 가능한 범위에서의 가장 정확한 조건이 된다. 따라서 ‘extra fine’ 등급으로 설정하여 얻은 결과를 기준값으로 정하고 이 값에 대한 상대적인 오차와 저장된 에너지를 계산하면 표 2와 그림 5와 같다. M_{max} 값 1 μm 이하의 경우 즉 ‘coarse’ 등급 또는 더 작은 크기를 사용하면 계산 오차는 1% 이하가 된다. 그림 5는 시뮬레이션에서 사용된 요소 수에 따른 저장 에너지의 정규값을 나타낸다. 요소의 수가 9만개 이상 즉 ‘coarse’ 등급 이상일 때 최대에너지 값인 1에 수렴하게 된다.

Table 2 The maximum element size and the number of elements for each predefined class of mesh in 5 μm cylinder system

Predefined class of mesh	Maximum element size (μm)	Relative error (%)	Number of elements
extremely coarse	3.30	71.43	29,338
extra coarse	2.00	57.49	35,462
coarser	1.30	5.23	58,770
coarse	1.00	0.22	90,764
normal	0.67	0.36	168,400
fine	0.53	0.13	204,519
finer	0.37	0.08	320,120
extra fine	0.20	0.00	808,258
extremely fine	0.10	N/A	2,998,352

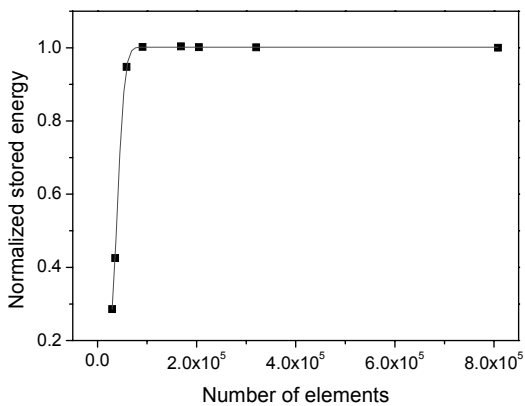


Fig. 5 The normalized stored energy at various numbers of elements in computation.

3) 시뮬레이션 모델의 검증

FEM 시뮬레이션 모델의 정확도 평가를 위해 시뮬레이션 결과를 이론적 해석과 비교하였다. 시뮬레이션에 사용된 공진기 모델의 직경은 10 μm 로 공진기와 공기의 굴절율은 각각 2.01과 1.0을 적용하였고, 공진기와 광도파관 사이의 gap은 광과장과 비슷한 크기로 azimuthal mode 20~24의 경우에는 2,500 nm, 26~30의 경우에는 2,000 nm를 각각 선택하였다. 모든 계산에서 요소의 mesh 크기는 중간 등급인 ‘normal’을 선택하였다(Table 2). 속이 채워진 실린더형 공진기의 경우는 식 (2)로 기술되는 3-layer 모델(링공진기, 내부, 외부 3부분으로 구성) 보다 간단한 2-layer 모델(공진기와 외부 2부분으로만 구성)을 이용하여 이론적 계산을 쉽게 할 수 있다. 여기서는 radial mode(반경방향의 진동)는 1을, azimuthal mode(원주방향의 진동)는 20, 22, 24, 26, 28 및 30을 선택하였다.

표 3은 두 방법으로 구한 여러 개의 공진모드에서의 공진과장 오차율을 나타낸다. 표 3에서와 같이 두 방법의 상대 오차율은 0.011% 이하로 시뮬레이션 결과는 이론적 해석결과와 잘 일치하는 것이 확인되었다.

Table 3 Comparison of the theoretical and simulated resonance wavelengths for 10 μm -diameter cavity for the radial mode 1

Azimuthal mode number	Theoretical resonant wavelength (nm)	Simulated resonant wavelength (nm)	Relative error (%)
20	2,616.9	2,616.7	0.0076
22	2,401.9	2,401.8	0.0042
24	2,220.3	2,220.1	0.0090
26	2,064.8	2,064.7	0.0048
28	1,930.1	1,929.9	0.0104
30	1,812.2	1,812.0	0.0110

4) 실험방법

상업용 소프트웨어인 COMSOL Multiphysics(ver. 4.1)와 RF모듈을 사용하였다. 2차원의 radio frequency-electromagnetic waves 모델을 기본으로, Model builder를 통해 모델설계, 계수입력, 메시, 실행, 출력 등의 모든 작업을 수행하였다. 파장에 따른 공진기의 전기장 분포 및 광에너지 분포 스펙트럼을 구하고 공진기의 크기 및 시료용액의 굴절율 변화가 공진주파수 이동과 양호도에 미치는 영향을 조사하기 위하여, 그림 3의 모델과 표 1의 계수를 사용하고, mesh 등급으로는 ‘normal’을 적용하였다. 광원의 파장으로는 1,545~1,560 nm를 사용하였다. 공진기와 광도파관의 외경은 고정하고, 공진기 링의 두께는 3.00 ~ 3.05 μm 범위에서 0.01 μm 씩 증가하며 조사하였다. 시료의 굴절율은 1.333 ~ 1.338 RIU 범위에서 0.001

RIU 씩 증가하며, 두 개의 링 두께 2.5와 3.0 μm 에 대하여 조사하였다.

3. 결과 및 고찰

가. OFRR의 전자장 및 광 에너지 분포

COMSOL Multiphysics를 이용하여 OFRR의 전기장 분포와 광에너지 분포를 계산하였다. 레이저의 여기 파장범위는 1,545~1,560 nm이고, 파장 간격을 0.01 nm로 하여 얻은 데이터의 수는 실험 당 1,500개가 된다.

그림 6과 그림 7은 여기 파장에 따른 전기장(electric field) 분포를 2차원으로 나타낸 그림이다. 그림 6은 공진파장 1,548.40 nm일 때의 전기장 분포로서 radial mode가 1이고 azimuthal mode가 276일 때를 나타낸다. Azimuthal 모드 수 276은 링 전체에 나타난 피크(적색 또는 청색)의 갯수로 확인되었다. 그림 6(a)에서 보는 바와 같이 왼쪽 광도파관을 통해 투사된 레이저광은 WGM에 의해 대부분 링 내부에 분포하고 있다. 그림 6(b)는 그림 6(a)의 사각형으로 표시된 링과 광도파관의 접촉부분을 확대하여 보여주는 것으로 링 부분에는 최대의 광이 분포되고 있으며, 광도파관의 좌우쪽 빛의 양이 다르게 분포하고 있는 것은 광도파관의 오른쪽 출구쪽으로는 입사량에 비해 작은 양의 빛이 빠져 나가기 때문인 것으로 판단된다.

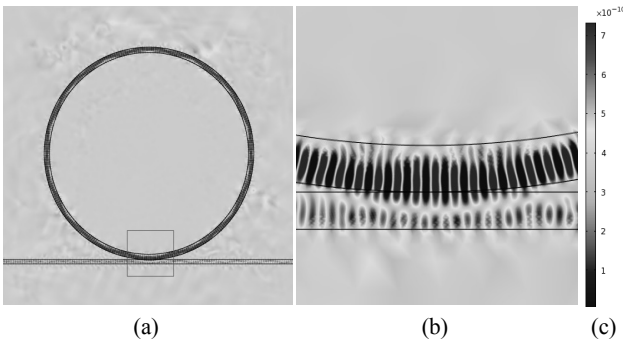


Fig. 6 The electric field distribution of OFRR biosensor at on-resonance with radial mode 1 : the overview (a), the magnified view of marked ring and waveguide coupled area (b) and the color legend showing relative energy density (c).

그림 7은 공진파장 1,547.28 nm일 때의 전기장 분포로서 radial mode가 2이고 azimuthal mode가 570일 때를 나타낸다. 그림 7(a)에서도 그림 6(a)와 마찬가지로 광도파관 출구 쪽 빛의 강도는 입구 쪽에 비해 상대적으로 작아진 것을 확인할 수 있다. 그림 7(b)를 보면 그림 6(b)와 다르게 공진에 의한 WGM 파가 두 갈래로 갈라져 진행함을 확인할 수 있다. Azimuthal 모드 수 570은 링 전체에 나타난 피크(적색 또는 청색)의 갯수로 확인되었다.

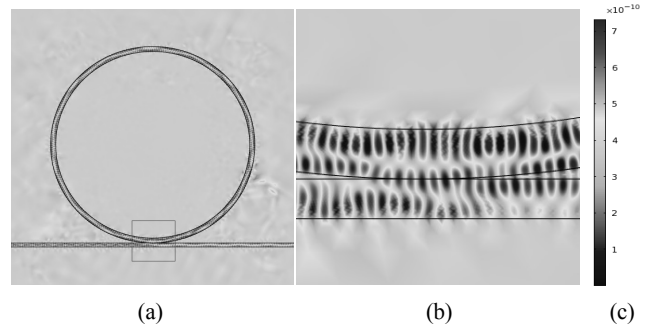


Fig. 7 The electric field distribution of OFRR biosensor at on-resonance with radial mode 2 : the overview (a), the magnified view of marked ring and waveguide coupled area (b) and the color legend showing relative energy density (c).

나. 공진기 링 두께의 변화에 따른 공진이동과 양호도 변화

1) 스펙트럼과 공진이동

구형 또는 디스크형 공진기와 같이 공진기 외부에 시료를 반응시킬 경우 시료흡착 등에 의해 외경이 증가하면 빛의 이동거리도 증가하여 공진파장의 증가가 수반된다(Quan and Kuo, 2005). 링 공진기의 경우에 측정용 시료가 링 공진기 내부로 주입되면 시료의 분자가 내벽에 흡착되어 공진기 링의 두께를 증가시키게 된다. 따라서 공진기의 두께 증가에 의한 공진기의 내경 감소에 따라 공진이동이 발생되는지의 확인이 필요해진다. 공진이동과 내경과의 상관관계가 클 경우 시료 농도를 검출할 수 있는 중요한 요인이 될 수 있다.

링공진기의 외경을 100 μm 에 고정한 상태에서 두께를 3.00 μm 에서 3.05 μm 까지 0.01 μm 간격으로 내경을 변화시키며 1,545~1,560 nm의 공진파장 범위(192.307~194.805 THz의 주파수 범위에 해당)에서 0.01 nm 간격으로 공진기 링에 발생하는 전자파 에너지를 계산하였다. 에너지 값이 최대가 되는 공진파장을 찾아서 그 파장에 해당되는 전기장강도를 나타내는 2차원 plot을 이용하여 피크의 열과 행의 수를 확인하여 radial mode number와 azimuthal mode number를 구하였다. 그림 8은 링공진기의 두께 변화에 따른 주파수 vs. 정규화된 에너지 스펙트럼을 보여준다. 그림 8에서 정규화된 에너지 값이 1에 근접하는 큰 피크는 radial mode가 1인 경우를 나타내며, 0.6~0.2 범위의 상대적으로 낮은 피크는 radial mode가 2인 경우를 나타낸다.

그림 8에서 링의 두께가 증가할 때 공진파장이 오른쪽으로 이동하는 것을 확인할 수 있다. radial mode가 2인 경우 radial mode 1의 경우에 비해 공진파장의 이동 정도가 더 큰 것으로 나타났다.

그림 9는 링 공진기의 외경을 고정한 상태에서 두께 변화에 따른 공진파장의 이동을 나타낸 것으로서 각 두께별 3개의 공진이동의 평균값과 선행회귀를 나타낸 것이다. 그림 9(a)는 그림 8에서 큰 피크 값들에 해당되는 radial mode 1의

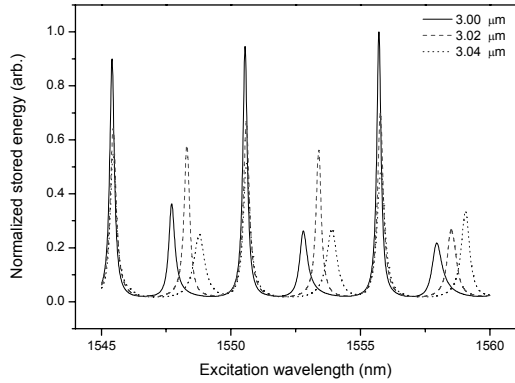
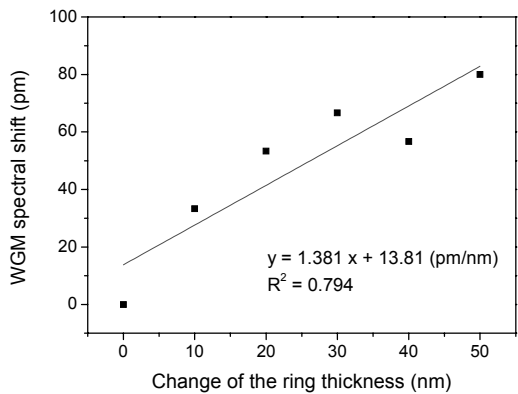
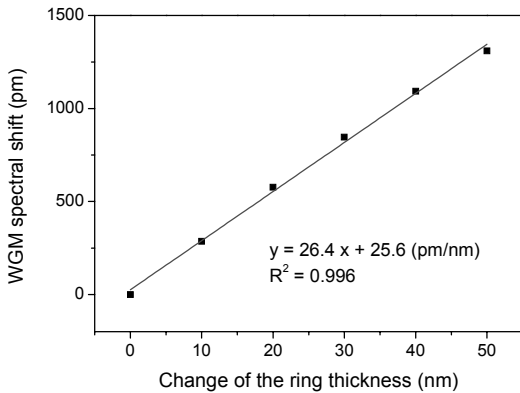


Fig. 8 Scattering spectra for different thickness of the 3.00 μm ring.



(a)



(b)

Fig. 9 WGM spectral shift of various changes of the ring thickness at the radial mode of 1(a) and at the radial mode of 2(b).

두께변화에 따른 공진이동값과 그 예측값을 표시한 것이고, 그림 9(b)는 그림 8에서 작은 피크 값들에 해당되는 radial mode 2의 두께변화에 따른 공진이동값과 그 예측값을 표시한 것이다. Radial mode 2의 경우 선형회귀식의 결정계수는 0.996으로서 radial mode 1의 결정계수인 0.794 보다 큰 값으로 나타났다. 또 radial mode 1의 경우 기울기가 1.381이므로 10 nm 크기의 분자흡착에 대해 13.8 pm 크기의 공진이동이 예측되며 주파수로는 1.72 GHz의 이동이 예상된다. 따라

서 선폭 1 GHz의 광측정장치를 사용할 경우 OFRR의 측정 한계는 대략 6 nm가 예상된다. 그림 9(b)에 표시된 radial mode 2를 사용한 경우 기울기가 26.4이므로 10 nm 크기의 분자흡착에 대해 264 pm 크기의 공진이동이 예측되며 주파수로는 32.4 GHz의 이동이 예상된다. 따라서 같은 광측정장치를 사용할 경우 OFRR의 측정한계는 0.3 nm가 된다. 따라서 극미량의 측정에는 radial mode 2의 값을 사용하는 것이 적합할 것으로 판단된다.

2) 양호도

그림 10은 링 공진기의 두께 변화에 따른 연속적인 공진파장 3개에 해당되는 양호도의 평균값 추세를 나타낸다. 그림 10에서 실선은 radial mode 1의 경우를 점선은 radial mode 2의 경우를 나타낸다. Radial mode 1의 경우 azimuthal mode는 295, 296 및 297에 해당되며 각각에서의 양호도는 $4.8 \times 10^3 \sim 7.6 \times 10^3$ 의 범위에서 두께의 증가에 따라 감소하다가 3.04 μm에서 최소가 된 후 다시 증가하는 경향을 나타냈다. Radial mode 2의 경우 azimuthal mode는 566, 568 및 570에 해당되며 각각에서의 양호도는 $2.5 \times 10^3 \sim 5.9 \times 10^3$ 의 범위에서 3.01 μm에서 최대가 된 후 두께 증가에 따라 감소하는 경향을 나타냈다.

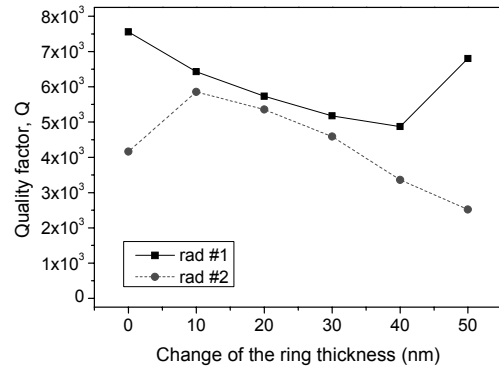


Fig. 10 Quality factor values at the changes of the ring thickness.

다. 시료의 굴절을 변화에 따른 공진이동과 양호도 변화

1) 스펙트럼과 공진이동

충분한 감도를 얻기 위해서는 링의 내부에 WGM 소산파가 충분히 노출되어야 한다. Mie의 이론에 따르면 모세관 링의 두께가 클수록 링 내부에 WGM 소산파의 양이 적어지므로 RI 변화에 덜 민감하게 된다. 반대로 두께가 작을수록 링 내부에 상당한 양의 WGM 소산파가 존재하므로 감도는 증가하게 된다(White et al., 2006).

그림 11과 그림 12는 링공진기의 시료 굴절을 변화에 따른 파장에 대한 에너지 스펙트럼을 보여준다. 그림 11은 링의 두께가 2.5 μm의 일 때의 에너지 스펙트럼을, 그림 12는 링

의 두께가 3.0 μm 일 때의 에너지 스펙트럼을 나타낸다. 두 개의 그림에서 큰 피크는 radial mode가 1일 때의 공진을 나타내며, 작은 피크는 radial mode가 2일 때의 공진을 나타낸다. Radial mode가 1인 경우 공진이동의 변화는 크지 않으며, radial mode가 2인 경우에는 공진이동의 변화가 radial mode 1의 경우 보다 큰 것으로 나타난다. 이 현상은 모든 두께의 경우에서 유사한 경향을 보였다. 어느 경우에서나 공진현상은 확실하고 규칙적으로 발생하는 것으로 확인되었다.

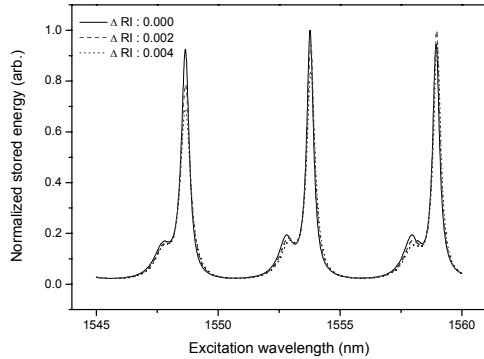


Fig. 11 Scattering spectra for different refractive indices of the sample medium for the 2.5 μm thick ring.

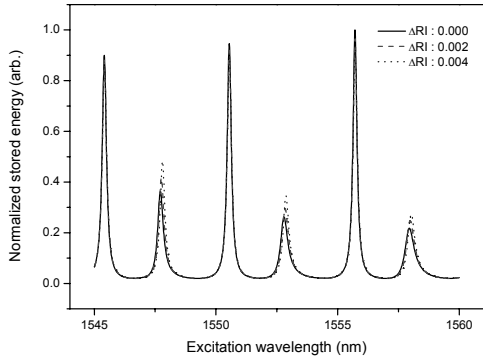
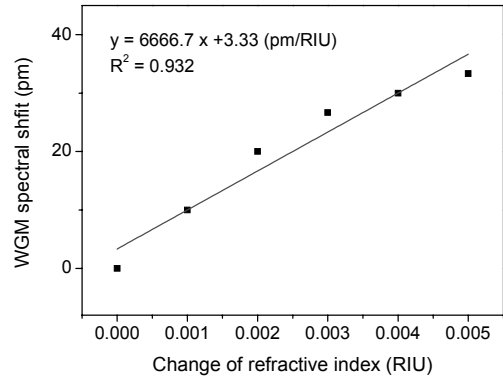
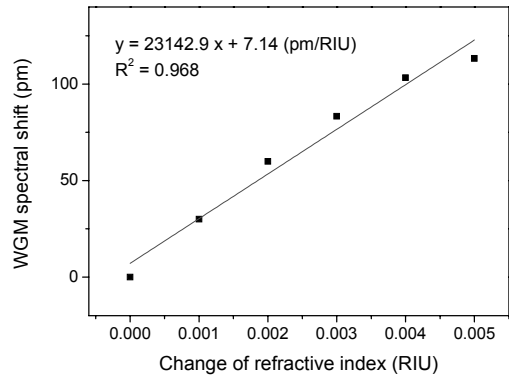


Fig. 12 Scattering spectra for different refractive indices of the sample medium for the 3.0 μm thick ring.

그림 13(a)와 13(b)는 링의 두께가 2.5 μm 일 때 3개의 연속적인 공진과장에서의 굴절율 변화와 WGM 스펙트럼의 공진이동의 평균값과 선형회귀에 의한 예측값을 나타낸다. 평균값은 점으로 표시되어 있고 예측값은 직선으로 표시되어 있다. 그림 13(a)는 radial mode가 1, 그림 13(b)는 radial mode가 2인 경우를 나타낸다. 그림 11의 스펙트럼에서도 관찰이 되었지만 radial mode가 2의 경우에 측정감도는 23.1 nm/RIU로서, radial mode 1의 경우의 측정감도인 6.7 nm/RIU 보다 3배 이상 큰 것으로 확인되었다. 결정계수는 radial mode 2의 경우가 0.968로 radial mode 1의 경우에는 0.932로 큰 값을 보여준다. 따라서 굴절율 변화를 측정할 때는 radial mode 2의 공진주파수를 이용하는 것이 높은 측정감도를 얻을 수 있을 것으로 확인되었다.



(a)



(b)

Fig. 13 WGM spectral shift at various changes of the refractive indices for the ring thickness of 2.5 μm at the radial mode of 1(a) and 2(b).

그림 14는 링의 두께가 3.0 μm 일 때 3개의 연속적인 공진과장에서의 굴절율 변화와 WGM 스펙트럼의 공진이동의 평균값과 선형회귀에 의한 예측값을 나타낸다. 평균값은 점으로 표시되어 있고 예측값은 직선으로 표시되어 있다. 그림 14(a)는 radial mode가 1, 그림 14(b)는 radial mode가 2일 때를 나타낸다. 그림 13의 스펙트럼에서도 관찰되었지만 radial mode가 2의 경우에 측정감도는 20.0 nm/RIU로서, radial mode 1의 경우의 측정감도인 1.2 nm/RIU 보다 16배 이상 큰 것으로 확인되었다. 결정계수도 radial mode 2의 경우가 0.982로 radial mode 1의 경우 0.815 보다 약간 높게 나타났다. 따라서 굴절율 변화를 측정할 때는 radial mode 2의 공진주파수를 이용하는 것이 다소 높은 측정감도를 얻을 수 있을 것으로 확인되었다.

링의 두께 2.5와 3.0 μm 에 대해서 radial mode 2의 경우를 선택할 경우, 각각의 감도는 23.1과 20.0 nm/RIU로서, 두께가 작은 경우에 두께가 큰 경우보다 감도가 증가된 것으로 확인되었다. 이 결과는 앞에서 언급된 링의 두께가 작아질수록 측정감도는 증가한다는 White 등(2006)의 주장과 잘 일치한다. Zhu 등(2007)은 980 nm의 파장을 사용하였을 때 두께 2.3과 2.8 μm 에 대한 측정감도를 각각 20.0과 6.6 nm/RIU로

보고하여 두께가 작을 경우 감도가 증가한 본 연구의 결과와 같은 경향을 보여주었다. 또한 Li and Fan(2010)은 980 nm의 파장과 링 두께 1.0 μm의 조건에서 BRIS(bulk refractive index sensitivity) 570 nm/RIU를 보고하여 링의 두께가 작을 수록 측정감도가 향상된다는 앞의 주장을 뒷받침하고 있다.

일반적으로 긴 파장의 광원이 사용될 경우 측정감도는 증가하는 것으로 알려져 있다. 그 이유는 링으로부터 시료쪽으로 소산파가 새어나가는 거리는 경계면으로부터 대략 빛의 한 파장 정도이기 때문이다. 따라서 빛의 파장이 증가하면 시료의 변화에 더 민감해지는 것이다. 본 연구의 경우 Zhu 등(2007)에 비해 링의 두께가 크지만 (2.5와 3.0 μm > 2.3과 2.8 μm), 측정감도는 상대적으로 큰 값(23.1과 20.0 nm/RIU > 20.0과 6.6 nm/RIU)을 보인 것은 긴 파장(1,550 > 980 nm)의 광원을 사용하였기 때문이다.

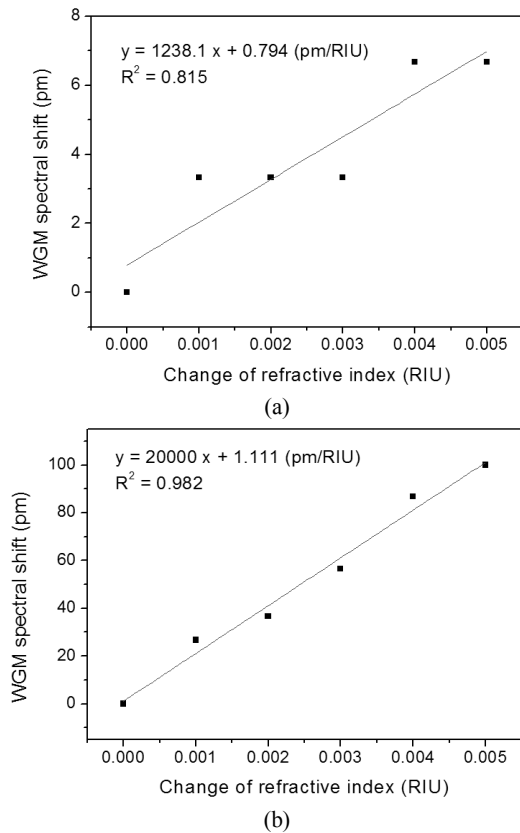


Fig. 14 WGM spectral shift vs. change of the refractive indices for the ring thickness of 3.0 μm at the radial mode of 1(a) and 2(b).

2) 양호도

그림 15(a)는 링의 두께가 2.5 μm인 경우에 radial mode 1에 대한 굴절을 변화에 따른 연속적인 3개의 공진파장에 대한 양호도의 평균값 추세를 나타낸다. 굴절율이 증가할 때 양호도는 4.28×10^3 에서 3.35×10^3 으로 감소하는 경향을 보여준다. radial mode 2의 경우는 스펙트럼(Fig. 11)에서 보는 바와 같이 완전한 피크가 발생되지 않아 양호도를 구할 수가

없었다.

그림 15(b)는 두께가 3.0 μm 인 경우에 radial mode 1과 2에 대한 굴절을 변화에 따른 3개의 연속적인 공진파장에 대한 양호도의 평균값 추세를 나타낸다. radial mode가 1인 경우에는 양호도가 7.56×10^3 에서 7.10×10^3 으로 감소하는 경향을 보여주며 이는 두께가 2.5 μm 경우와 유사한 경향을 나타낸다. radial mode가 2인 경우에는 양호도가 4.16×10^3 에서 5.35×10^3 으로 증가하는 경향을 보여준다.

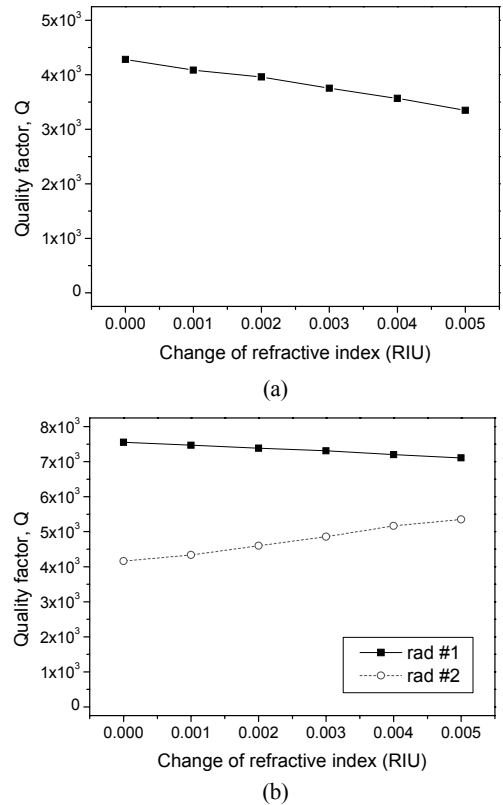


Fig. 15 Quality factor values at the change of refractive index for the ring thickness of 2.5 μm(a) and 3.0 μm(b).

4. 요약 및 결론

WGM 공진현상과 마이크로유체학을 활용한 OFRR 바이오센서는 적은 시료량으로 표식자를 사용하지 않고 고감도의 신속하고 정확한 측정이 가능하며, 초소형 센서로 다채널 구성이 가능하다. 본 연구에서는 OFRR 바이오센서의 공진이동과 양호도에 관한 시뮬레이션 연구를 위해 Maxwell 방정식에 기초한 전자파 이론을 바탕으로 유한요소법에 의한 수치해석적인 방법으로 상업용 소프트웨어인 COMSOL Multiphysics(ver. 4.1)와 RF모듈을 사용하였다. 이차원의 radio frequency-electromagnetic waves 모델을 기본으로, 소프트웨어의 model builder를 통해 모델설계, 계수입력, 메시, 실행, 출력 등의 모든 작업을 수행하여, 공진기 센서에 분포하

는 전기장과 에너지 분포 스펙트럼을 출력한 후, 별도의 후처리를 통해 공진이동을 분석하였다.

사용된 소프트웨어의 정확도와 감도를 조사하기 위하여 실제 모델과 같은 모양이며 크기를 축소시킨 직경 5 μm , 두께 1 μm 의 공진기에 도파관 직경 1 μm 의 소형 모델을 사용하였다. 조사결과 소프트웨어가 제공하는 메시 등급 중 ‘coarse’ 등급보다 작은 크기의 요소 크기의 등급을 사용할 경우, 제일 정확한 ‘extra fine’ 등급의 결과값에 비해 상대오차가 0.22%로 확인되었다(Table 2). 따라서 이후의 모든 실험에서 메시 등급은 상대오차가 0.36%로 나타난 ‘normal’을 사용하였다. 본 실험의 수행에 앞서 시뮬레이션 모델의 검증을 위해 2-layer 모델을 이용하여 radial mode 1, azimuthal mode 20, 22, 24, 26, 28 및 30 (총 6개)에 해당되는 공진모드에서의 파장을 구하였다. 이론적 해석결과와 비교한 결과 모든 모드에서 0.011% 이하의 오차를 보여주어 시뮬레이션모델의 정확도를 검증하였다(Table 3).

실험에 사용된 광원의 파장은 1,550 nm를 기준으로 하였고, 기초실험을 통해 3개의 공진이 발생하는 범위인 1,545~1,560 nm를 선택하였다. 간격은 0.01 nm로 실험 세트 당 수집한 데이터 수는 1,500개로 수집된 데이터는 파장별 공진기에 저장된 에너지값이며 이를 활용해 스펙트럼과 공진파장을 구하였다. 소프트웨어가 갖고 있는 전자장 분포도 plot 기능을 활용하여 공진과 공진이 아닐 때의 전자장 스펙트럼을 시각적으로 표시하였고, 피크의 배치모양과 갯수를 확인하고 radial 모드 수와 azimuthal 모드 수를 조사하여 이 후 공진모드의 식별에 활용하였다.

두께 변화에 따른 공진이동 특성을 조사하기 위해 2.5 μm 와 3.0 μm 의 링 두께를 기본으로 하고, 10 nm 씩 증가하여 각 6개의 두께 별 스펙트럼을 분석하였다. 시료 굴절율 변화에 따른 공진이동 특성을 조사하기 위해 굴절율 1.333 RIU를 기본으로 하여 0.001 RIU 씩 증가하여 두 개의 다른 두께 별로 각 6개의 굴절율변화에 따른 스펙트럼을 분석하였다.

두께와 굴절율 변화에 따른 스펙트럼 분석을 통하여 이들 요인의 개략적인 영향을 파악하였고, 이들의 상관관계 분석을 통해 상관정도를 조사하고, 실제 센서의 실험에 적용할 검출방법을 제시하였다. 연구결과를 요약하면 다음과 같다.

- (1) 시뮬레이션의 2-layer 모델 검증 결과, 시뮬레이션에 의한 공진값은 이론적 분석결과와 비교할 때 모든 실험모드에서 0.0011% 이하의 상대오차를 나타낸 것으로 확인되었다.
- (2) 공진이동과 두께 증가와의 상관관계를 조사한 결과 radial 모드 1과 모드 2에서의 결정계수는 각각 0.794와 0.996로 나타났다. 측정감도의 경우 radial 모드 1과 모드 2의 감도는 각각 1.381 pm/nm과 26.400 pm/nm로

나타났다. 따라서 radial 모드 2가 모드 1 보다 측정에 더 적합한 것으로 확인되었다.

- (3) 공진이동과 굴절율변화 간의 상관관계를 조사한 결과에서 링 두께가 2.5 μm 의 경우, radial 모드 1과 모드 2에서의 결정계수는 각각 0.932와 0.968로 나타났다. 측정감도의 경우 radial 모드 1과 모드 2에서 각각의 감도는 6.667 nm/RIU와 23.142 nm/RIU로 나타났다. 링 두께가 3.0 μm 의 경우 radial 모드 1과 모드 2에서의 결정계수는 각각 0.815와 0.982로 나타났고, radial 모드 1과 모드 2에서의 측정감도는 각각 1.238 nm/RIU과 20.000 nm/RIU로 나타났다. 두께가 작을수록 측정감도가 큰 것으로 확인되어 타 연구결과와 유사한 경향을 보였다. 양호도의 경우 $3.1 \times 10^3 \sim 7.8 \times 10^3$ 의 범위에 분포하였다.

참 고 문 헌

1. Arnold, S., M. Khoshshima, I. Teraoka and F. Vollmer. 2003. Shift of whispering-gallery modes in microspheres by protein adsorption. *Optics Letters* 28:272-274.
2. Fan, X., I. M. White, S. I. Shopova, H. Zhu, J. D. Suter, Y. Xun. 2008. Sensitive optical biosensors for unlabeled targets: A review. *Analytica chimica acta* 620:8-26.
3. Guo, Z., H. Quan and S. Pau. 2005. Numerical characterization of whispering-gallery mode optical microcavities. *Applied optics*, 45(4):611-618.
4. Li, H. and X. Fan. 2010. Characterization of sensing capability of optofluidic ring resonator biosensors. *Applied physics. Letter* 97:011105.
5. Quan, H. and Z. Guo. 2005. Simulation of whispering-gallery-mode resonance shifts for optical miniature biosensors. *Journal of quantitative spectroscopy & radiative transfer*, 93:231-243.
6. White, I. M, H. Oveys and X. Fan. 2006. Liquid-core optical ring-resonator sensors. *Optics letters*. 31(9):1319-1321.
7. Yang, G., I. White and X. Fan. 2008. An opto-fluidic ring resonator biosensor for the detection of organophosphorus pesticides. *Sensors and actuators*. B133:105-112.
8. Zhu, H., J. D. Suter and X. Fan. 2010. Label-free optical ring resonator bio/chemical sensors. *Optical guided-wave chemical and biosensors II*. Edited by M Zourob and A Lakhtakia. Springer series on chemical sensors and biosensors. Vol. 8, Part III, 259-279. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
9. Zhu, H., I. M. White, J. D. Suter, M. Zourob and X. Fan. 2007. Integrated refractive index optical ring resonator detector for capillary electrophoresis. *Analytical chemistry*. 79:930-937.