

진화알고리즘을 이용한 표면플라즈몬 공명센서의 설계

정재훈, 김민욱
단국대학교 전자컴퓨터공학부

Design of surface plasmon resonance sensors using evolution algorithm

Jaehoon Jung, Minwook Kim
School of Electronics and Computer Engineering, Dankook University

Abstract - 본 논문에서는 표면 플라즈몬 공명(Surface Plasmon Resonance) 센서의 여러 파라미터를 동시에 만족시키는 설계기법을 제시하였다. 설계 파라미터는 반사광 dip의 3dB bandwidth와 dip의 깊이이고 목적함수는 해석치와 목표치의 차이 벡터의 norm으로 정의하였다. 설계 변수는 박막된 각 금속 층의 두께로 하였고 SPR 센서의 스펙트럼을 해석하기 위해 광학 어드미턴스 기법을 이용하였다. 최적화 기법은 (1+1) 진화 알고리즘을 사용하였다. 설계방법을 3층 구조의 SPR 센서에 적용하여 최적 설계한 파라미터는 초기값에 비해 3dB bandwidth는 4.8nm, dip의 깊이는 1.1dB 향상되었다.

1. 서 론

표면 플라즈몬 공명(Surface Plasmon Resonance: SPR) 현상이 처음으로 응용된 것은 1978년 Pockrand 등에 의해 박막의 특성을 측정하는 분야였고 [1], 센서에 응용된 것은 1983년 Liedberg 등에 의해서였다[2]. 그 이후로 SPR 현상은 많은 화학 및 바이오센서 구조에 응용되어 왔다[3,4]. SPR 기술이 바이오센서에 유용하게 사용될 수 있는 이유는 센서 표면에서 발생하는 바이오 물질들의 상호 작용을 실시간으로 측정할 수 있으며 특정 바이오 물질의 측정에 있어서 레이블링이나 표시자(labeling or marker)를 필요로 하지 않기 때문이다.

SPR 센서에 대한 관심이 증폭됨에도 불구하고 연구는 본격적인 설계 기법을 제시하지 않고 주로 새로운 구조 및 그것의 구현 여부에만 집중되어 왔다. 현재까지는 SPR 센서의 설계는 여러 번 해석해서 그 중에서 최하거나, 순차적으로 설계변수를 조정하여 기준 성능을 만족할 때까지 계속해서 시도하는 방법, 혹은 직접 제작하여 시행착오를 거쳐 설계하는 방법을 채택하고 있다. 즉 동시에 여러 파라미터를 만족시키는 설계방법은 아직 시도된 적이 없다.

본 연구에서는 설계변수를 각층의 두께로 하여 dip 3dB bandwidth와 dip의 깊이를 포함하는 목적함수를 최적화하는 방법을 제시한다. 최적화 기법은 (1+1) 진화 알고리즘을 사용하며 이를 프리즘 위에 형성된, 3층의 금속 박막의 센서에 측정물질을 형성시킨 모델에 적용한다. 반사 스펙트럼은 광학 어드미턴스 방법을 이용하여 해석하고 박막은 크롬(Cr), 금(Au), 은(Ag) 등의 연속적인 층으로 이루어져 있다. 이 기법이 실제 제작되고 있는 다층 박막 설계 시 효율적인 방법으로 사용될 수 있음을 확인함으로써 새로운 형태의 센서를 설계하는 데에도 실제로 이용될 수 있음을 보이고자 한다.

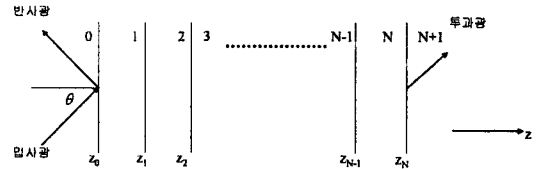
2. 본 론

2.1 다층 SPR 센서의 스펙트럼 해석

굴절률이 큰 매질에서 작은 매질로 빛을 입사시키면서 입사각을 변화시키면 투과하는 빛이 경계면과 평행하게 되는 임계각이 존재한다. 입사각이 임계각보다 커지면 입사된 빛은 모두 반사되는 현상이 발생하는데 이를 전 반사라 한다. 전반사가 일어나면 경계면에 수직인 방향으로 소멸파(evanescent field)가 발생되고, 단일 경계면 상에 얇은 금속 층이 존재한다면 입사된 빛에 의해 금속 층 표면에 존재하는 여기된 전자들이 진동하는 현상이 발생하며 이러한 진동이 경계면을 따라 진행하는 표면파 형태로 나타난다. 이 표면파를 표면 플라즈몬 파(surface plasmon wave)라고 하는데, 특정 조건에서 이 파는 입사된 빛과 공명을 일으켜 입사된 빛의 에너지가 모두 표면파로 전달되는 현상이 나타난다. 이것을 표면 플라즈몬 공명이라고 한다.

일반적으로 표면 플라즈몬의 여기는 프리즘의 감쇠전반사를 이용한 Kretschmann 방법과 Otto 방법을 많이 사용한다[5,6]. 그 중 여러 가지의 편이성 때문에 Kretschmann 방법이 주로 이용되고 있다. 본 논문에서도 Kretschmann 방법과 다층의 박막구조에서 반사파의 크기를 구하기 위해 광학 어드미턴스 방법을 이용하였다[7].

그림 1와 같이 N 개의 박막이 각각의 두께를 갖고 입사면과 투과면 사이에 적층이 되어있을 때, θ 의 각도로 p-편광된 빛을 입사시키면 입사파의 파장, 입사각, 각 층의 물질 유전상수, 그 두께에 따라 반사율이 달라지고, 이러한 변수를 조절하여 다층 구조의 센서를 설계할 수 있다. k 번째 박막층의 파라미터를 각각 d_k , 유전상수 ϵ_k , 자화율 μ_k , 굴절률 n_k 라 하고 각 박막 층은 균일성(uniform), 등방성(isotropic), 비자성(non-magnetic)이라고 가정한다. 그러면 반사면 z_0 에서의 박막면의 접선방향의 전계와 자계는 다음과 같이 나타낼 수 있다[7].



<그림 1> N개의 박막을 가진 다층구조

$$\begin{bmatrix} E(z_0) \\ H(z_0) \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E(z_N) \\ H(z_N) \end{bmatrix}$$

여기서 M 은 다층박막구조의 특성행렬이라 하고 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$M = \prod_{k=1}^N M_k = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}$$

$$M_k = \begin{pmatrix} \cos \delta_k & j \sin \delta_k / Y_k \\ j Y_k \sin \delta_k & \cos \delta_k \end{pmatrix}, \delta_k = \frac{2\pi}{\lambda} n_k d_k \cos \theta_k$$

$$Y_k = n_k y_0 / \cos \theta_k$$

$$y_0 = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} = 2.6544 \times 10^{-3} [1/\Omega]$$

여기서 M_k 는 k 번째 박막의 특성행렬이고, δ_k 는 k 번째 박막을 투과할 때의 위상변화, θ_k 는 k 번째 박막의 입사각, y_0 는 진공이 어드미턴스이다. 이로부터 계산된 반사계수와 반사율은 다음과 같다.

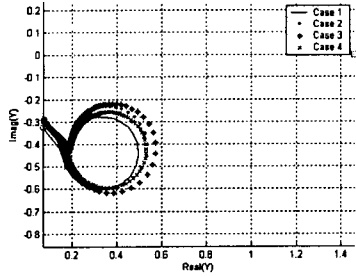
$$r = \frac{Y_0 m_{11} + Y_0 Y_s m_{12} - m_{21} - Y_s m_{22}}{Y_0 m_{11} + Y_0 Y_s m_{12} + m_{21} + Y_s m_{22}}, R = |r|^2$$

$$Y_0 = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} n_0 \cos \theta_0, Y_s = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} n_s \cos \theta_s$$

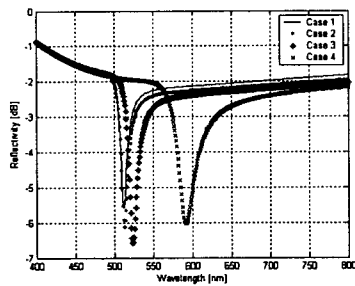
여기서 $n_0, \theta_0, n_s, \theta_s$ 는 각각 입사면의 굴절률, 입사각, 투과면의 굴절률, 투과각을 나타낸다.

그림 1에서 크롬과 금, 은으로 금속박막을 한 다층 SPR 센서 구조를 각 박막의 두께를 변화시키며 반사율을 해석한다. 금의 경우 $\lambda_p = 1.6826 \times 10^{-7} m$, $\lambda_c = 8.9342 \times 10^{-6} m$ 이고 은의 경우 $\lambda_p = 1.4541 \times 10^{-7} m$, $\lambda_c = 1.7614 \times 10^{-5} m$ 이다[8,9]. 본 연구에서는 타 연구결과와의 비교를 위해 기존연구의 파라미터를 이용하여 $n_0=1.4613$, $n_s=1.333$, $\theta_0=83^\circ$ 값을 사용하였다[10].

크롬은 6nm, 금과 은의 두께 합은 60nm가 되는 $Au=(60,40,20,00)nm$, $Ag=(00,20,40,60)nm$ 일 때의 어드미턴스와 반사 스펙트럼을 그림 2, 그림 3 에 나타내었다. 광학 어드미턴스 Y는 정규화된 굴절률이라고 해석할 수 있는데 입사면에서의 어드미턴스와 멀리 떨어져 있으면 반사율이 크고 가까이 있으면 반사율이 작아짐을 의미한다. 즉 Y가 입사면에서의 어드미턴스와 가장 근거리에서 접근했을 경우 반사 스펙트럼에서 dip에 해당하는 것이다. 그림 3에서 보면 은의 두께가 증가할수록 장파장으로 dip의 위치가 바뀔 수 있다. 이것은 최소점에 근접하는 점이 많은 점이 경과하고 난 후에 있음을 의미한다. 또한 금속의 두께가 변화하면 dip의 위치, bandwidth, 깊이 등 변화에 관한 거의 모든 파라미터가 변화하게 된다. SPR 센서의 입장에서 보면 dip의 bandwidth는 좁을수록, dip의 깊이는 깊을수록 신호대잡음비(SNR)가 높게 된다. 다음 절에서는 이 2개의 파라미터를 포함하는 목적함수를 최적화하기 위하여 박막들의 두께를 설계변수로 하여 설계를 시행하였다.



〈그림 2〉 Cr=6nm, Au=(60,40,20,00)nm, Ag=(00,20,40,60)nm일 때의 어드미턴스



〈그림 3〉 Cr=6nm, Au=(60,40,20,00)nm, Ag=(00,20,40,60)nm일 때의 반사 스펙트럼

2.2 (1+1) 진화 알고리즘 기법을 이용한 최적화 설계

2.2.1 (1+1)진화 알고리즘 기법

진화 알고리즘 기법(evolution strategy)은 확률개념의 최적화 기법중의 하나로 Rothenberg에 의해 처음 제안되었다. 이 방법을 구성하는 세 가지의 중요한 과정은 genetic algorithm의 재생산(regeneration) 및 변이(mutation)와 stimulated annealing의 annealing이다. 재생산은 자연현상에서 부모세대로부터 자식세대가 형성되는 것을 모사한 것이며, 변이는 돌연변이의 과정을 모사한 것이다. 또한, annealing은 주어진 환경에서 가장 안정된 분자구조를 형성하는 과정을 모사한 것이라 할 수 있다.

이러한 과정을 수치적으로 모사하여 최적화 알고리즘에 도입하면, 초기값을 적절한 값으로 선택한 μ 개의 모델변수 집합들이 부모세대를 구성하고, 재생산의 과정에 의해 λ 개의 모델변수 집합들이 형성되면 이들이 자식세대를 형성한다. μ 개의 부모세대 및 λ 개의 자식세대의 모델변수 집합들로부터 적자생존의 원리에 입각하여 최적화 목표를 잘 만족하는 μ 개의 모델변수 집합들을 선택하여 새로운 부모세대를 구성한다. 이러한 방법을 ($\mu+\lambda$) 진화 알고리즘 기법이라 한다. 본 논문에서는 부모세대와 자식세대의 모델변수 집합이 각각 1 개씩인 (1+1) 진화 알고리즘 기법을 사용함으로써 한 세대에서 계산량이 적고 간단하도록 하였다.

적당히 선정된 부모세대의 모델변수 벡터 x_p 로부터 자식벡터의 모델변수 x_c 벡터가 생성되는 과정은 다음과 같다.

$$x_c = x_p + \alpha R$$

여기서 R 는 평균값이 0이고 (-1,1) 구간에서 균등분포를 갖는 확률밀도함수에 의해 발생된 난수이며, α 는 x_p 를 중심으로 한 변화가능폭(step width)을 나타낸다. 부모세대의 x_p 와 자식세대의 x_c 에 해당하는 목적함수 값을 F_p 와 F_c 라 하면 다음 부모세대 x_p 는 다음과 같이 정해진다.

$$x_p = \begin{cases} x_c & \text{if } F_c < F_p \\ x_p & \text{if } F_c \geq F_p \end{cases}$$

이 과정은 변이를 모사한 것이다. 한편 annealing의 기능은 최적화 과정에서 변화가능폭 α 를 적절히 조절함으로써 모사되는데, 본 논문에서는 현재 세대로부터 이전 10세대 동안의 재생산 과정에서 변이가 일어난 횟수 ($F_c < F_p$ 가 발생한 횟수)를 계산하여 다음과 같이 조절하였다.

$$\alpha = \begin{cases} \alpha \times 0.85 & \text{if 변이횟수} > 10 \times N/5 \\ \alpha/0.85 & \text{otherwise} \end{cases}$$

여기서 N은 설계변수의 개수이다. 즉 변이 횟수가 특정의 수보다 크면 계속 범위를 좁히고 그렇지 않고 계속 목적함수의 값이 개선되지 않으면 local minimum을 피하기 위해서 검색 범위를 넓히는 것이다.

2.2.2 목적함수

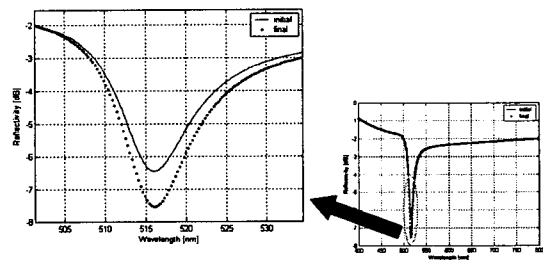
일반적으로 최적화 설계의 목적함수는 해석이 되는 모든 파라미터를 포함할 수 있는데 본 연구에서는 dip의 bandwidth와 dip의 깊이로 설정되었으며 설계변수는 금과 은 박막의 두께이다. 본 최적화 문제는 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\sqrt{\sum_{i=1}^2 a_i x_i} \text{ 를 최소화하기 } x_i = \left(\frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} \right)^2, \sum_{i=1}^2 a_i^2 = 1$$

여기서 설계 파라미터 y_1 은 dip의 bandwidth, y_2 는 dip의 깊이, y_n 는 각 목표치, a_n 는 각 가중치를 나타낸다.

2.3 시뮬레이션 결과 및 토의

그림 4는 본 연구에서 수행된 설계변수의 초기 값과 최적화 값에서의 반사 스펙트럼을 나타낸 것이다. 설계변수의 범위를 30 nm 로 두어 최적화를 진행하였고 초기 값에 비해 두께의 전체적인 반사 스펙트럼에서는 변화가 없어 보이지만 최적화 대상인 bandwidth와 dip 깊이는 향상되었음을 알 수 있다. 초기의 설계변수 상태에서는 각각 3dB bandwidth는 17.1 nm, dip의 깊이는 5.6 dB이며 최적화된 설계변수 상태에서는 각각 3dB bandwidth는 12.3 nm, dip의 깊이는 6.7 dB로 향상되었다. 여기서 포함되지는 않았지만 더 많은 설계변수를 채택했다면 더욱 향상된 파라미터 값을 얻을 수 있을 것이다. 이러한 최적화 기법은 각각의 가중치를 변화시킴으로써 파라미터의 중요성을 변경할 수 있다. 이러한 설계방법을 이용하면 새로운 구조의 SPR 센서의 설계에 체계적인 도구를 제공해 줄 수 있을 것이다.



〈그림 4〉 설계변수의 초기값과 최적화 값에서의 반사 스펙트럼

3. 결 론

본 논문에서는 다층 SPR 센서의 최적설계 방법을 제시하였다. 설계변수는 금과 은의 두께이고 설계 파라미터는 반사 스펙트럼의 3dB bandwidth와 dip의 깊이이다. 최적화 기법으로는 (1+1) 진화 알고리즘 기법을 이용하였다. 이러한 최적화 기법은 가중치를 변화시킴으로써 파라미터의 중요성을 변경할 수 있다. 본 연구에서 제시한 것은 설계변수의 선택에 제약이 없으므로 다양한 목적함수를 가진 여러 설계변수의 경우에 대한 최적화 과정에도 적용될 수 있을 것으로 사료된다.

[참 고 문 헌]

- [1] I. Pockrand, J. D. Swalen, J. G. Jordan, and M. R. Philpott, "Surface plasmon spectroscopy of organic monolayer assemblies", Surf. Sci., vol.74, pp.237-244, 1978
- [2] B. Liedberg, C. Nylander, and I. Sundstrom, "Surface plasmon resonance for gas detection and biosensing," Sens. Actuators, vol.4, pp.299-304, 1983
- [3] S. L. Jung, C. T. Campbell, T. M. Chinowsky, M. N. Nar, and S. S. Yee, "Quantitative interpretation of the response of surface plasmon resonance sensors to absorbed films," Langmuir, vol.14, pp.5636-5648, 1998
- [4] J. Homola, S. S. Yee and G. Gauglitz, "Surface plasmon resonance sensors: review," Sens. Actuators B, vol.54, pp.3-15, 1999
- [5] E. Kretschmann and H. Raether, "Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light," Z. Naturforsch., vol. 23A, pp.2135-2136, 1968
- [6] A. Otto, "Excitation of surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection," Z. Physik., vol.216, pp. 398-410, 1968
- [7] E. Hecht, "Optics, 4th ed.", Addison Wesley, 2002
- [8] M. A. Ordal, L. L. Long, R. J. Bell, S. E. Bell, R. R. Bell, R. W. Alexander Jr., and C. A. Ward, "Optical properties of metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Ag, Ti, and W in the infrared and far infrared," Appl. Optics, vol.11, pp.1099-1119, 1983
- [9] H. Raether, Surface Plasmon on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings, Springer-Verlag, 1988
- [10] B.D. Gupta, and Anuj K. Sharma, "Sensitivity evaluation of a multi-layered surface plasmon resonance-based fiber optic sensor: a theoretical study," Sensors and Actuators B, vol.107, pp.40-46, 2005