《연구논문》 Hankook Kwanghak Hoeji, Volume 19, Number 1, February 2008 DOI: 10.3807/HKH.2008.19.1.080

FDTD 방법을 이용한 광집게의 포획 힘 계산

성승용 · 이용구†

광주과학기술원 기전공학과
㊐ 500-712 광주광역시 북구 오룡1동

(2007년 12월 26일 받음, 2008년 1월 29일 수정본 받음)

광집게는 매질보다 큰 굴절률을 가지는 마이크로 크기의 구형 유전체를 강하게 집속되는 레이저를 이용해서 포획하고 움직이는 도구이다. 본 논문에서는 FDTD 방법을 이용해서 포획 힘을 계산하고, 그 방법을 설명하였다. 강하게 집속되는 레이저는 nonparaxial Gaussian beam을 이용해서 표현하였으며, 레이저가 대상물체와 매질에서 진행하는 것은 FDTD 방법을 이용해서 시뮬레이션 하였다. 레이저를 계산공간 전체에서 해석적으로 표현하기 위해서 scattered field formulation을 이용하였다. FDTD 방법을 이용해서 대상물체의 안팎의 전자기장을 시뮬레이션하고, 그 결과를 이용해서 Maxwell's stress tensor에 기반하여 포획 힘을 계산하였다.

주제어: Optical tweezers, Optical force, FDTD

I. 서 론

광집게(Optical tweezers)는 레이저를 이용해서 수십 나노미터에서 수십 마이크로미터의 크기를 가지는 물체를 포획(Trapping)하고 움직이는(Manipulation) 기술로 물리학, 생물학 등에서 아주 중요하고 강력한 도구로 여겨지고 있다. 높은 경구율(Numerical aperture, N.A.)을 가지는 대물렌즈를 통해서 강하게 집속된 레이저는 강도의 구배(Intensity's gradient)에 의해서 초점(Focus) 근처로 매질(Medium)보다 큰 굴절률(Refractive index)을 가지는 물체를 끌어당기는 힘을 가진다. 강도의 구배(Intensity's gradient)를 가지는 레이저가 대상물체에 의해서 모멘텀(Momentum)의 변화가 생기는데 이것이 대상물체에 힘으로 전달되는 것이다. 광집게는 1986년, Ashkin에 의해서 3차원 포획이 보고[1] 된 이후로 다양하게 응용되고 있다. DNA와 원자,[2] living cell[3]을 포획하고 제어하는 것은 물론, 마이크로 크기의 구형 유전체(micron-sized dielectric particles)를 이용해서 마이크로-구조물(micro-structure)을 만드는[4] 등 여러 분야에서 그 가능성이 검증되고 있다. 광집게를 이용한 응용과 실험들이 활발하게 연구되고 있는데 이에 못지않게 이론적인 계산도 매우 중요하다. 레이저의 프로필(profile), 파워, 최소 직경(Minimum waist), 경구율(Numerical aperture, N.A.), 대상물체의 물리적 특성 등에 따라서 포획하는 힘이 달라지는데, 실험을 하기 전에 가장 적합한 조건을 찾을 수 있다면, 광집게의 효용성과 성능을 훨씬 증가시킬 수 있을 것이다. 그리고 계산을 통해서 광집게를 이용한 측정 결과들을 검증할 수 있으며, 일반적으로 알려지지 않은 새로운 현상을 접하거나 새로운 응용을 시도할 때, 시뮬레이션을 통해서 그 현상을 이해하고 응용 가능성을 따질 수 있다. 또한 최근에는 단순히 구의 형상이 아닌 다양한 형상의 물체에 대한 포획이 시도 및 응용되었는데,[5] 시뮬레이션을 통해서 미리 예측하고 가장 적절한 형상을 찾거나 어떻게 포획을 할 것인지에 대한 방법 및 포획 가능성 여부를 예상할 수 있다.

광집게의 포획 힘을 계산하는 몇 가지의 방법이 있다. Ashkin에 의해서 Ray optics regime[6]에서, Yasuhoro Harada에 의해서 Rayleigh regime[7]에서 포획 힘이 계산되었다. 그런데, Ray optics regime에서의 계산은 대상물체의 크기가 파장보다 훨씬 큰 범위에서 이루어지며($\lambda \ll D$), Rayleigh regime에서의 계산은 대상물체의 크기가 파장보다 훨씬 작은 범위에서 이루어진다($D \ll \lambda$). 하지만 광집게의 대부분의 응용은 대상물체가 파장과 비슷한 크기를 가지는 범위에 있기 때문에, 그 범위에서 계산을 할 필요가 있다. 그래서 고려된 방법이 FDTD (Finite Difference Time Domain)방법을 이용하는 것이다.[8] FDTD방법은 대상물체의 크기나 형상에 제약을 받지 않는다는 장점이 있다. 본 논문에서는 대부분의 FDTD 방법을 이용한 계산들과는 달리 Nonparaxial Gaussian beam에 의해서 포획되는 힘을 Maxwell's stress tensor에 근거해서 계산하는 방법을 자세히 설명하였다.

II. 대상물체에 작용하는 힘

그림 1과 같이 대상물체가 유전체의 매질 속에 있을 때, 전자기장(Electromagnetic fields)에 의해서 이 물체에 작용하는 기계적 힘은 Maxwell's stress tensor로부터 유도될 수 있으며 그 식은

$$\mathbf{F}=\int_S\left[\varepsilon(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n})\mathbf{E}+\mu(\mathbf{H}\cdot\mathbf{n})\mathbf{H}-\frac{1}{2}\left(\varepsilon E^2+\mu H^2\right)\mathbf{n}\right]da-\frac{1}{c^2}\frac{d}{dt}\int_V\mathbf{E}\times\mathbf{H}dv \quad (1)$$

와 같다.[9] 식 (1)에서 ε와 μ은 각각 매질의 유전율(Permittivity)

†E-mail: lygu@gist.ac.kr

과 투과율(Permeability)을, n은 그림 1의 S에서 바깥쪽 수직 방향을 향하는 단위 벡터를 나타내며, c는 진공에서의 빛의 속도이다. 적분구간인 S와 V는 그림 1의 대상물체 바로 위의 표면적과 그것의 부피이며, da와 dv는 각각에서의 미세면적과 미세부피이다. 이것을 주기(Period)가 $T=2\pi/\lambda$인 단색 파동(Monochromatic wave)에 대해서 고려하면

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{F} \rangle &= \left\langle \int_S \left[\varepsilon(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n})\mathbf{E} + \mu(\mathbf{H}\cdot\mathbf{n})\mathbf{H} - \frac{1}{2}\left(\varepsilon E^2 + \mu H^2\right)\mathbf{n} \right] da - \frac{1}{c^2}\frac{d}{dt}\int_V \mathbf{E}\times\mathbf{H}dv \right\rangle \\ &= \frac{1}{T}\sum_T \int_S \left[\varepsilon(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n})\mathbf{E} + \mu(\mathbf{H}\cdot\mathbf{n})\mathbf{H} - \frac{1}{2}\left(\varepsilon E^2 + \mu H^2\right)\mathbf{n} \right] da \end{aligned} \tag{2}$$

와 같이 나타낼 수 있다. 여기에서 <>은 시간 평균을 의미한다.

대물렌즈를 통해서 강하게 집속되는 레이저(Highly focused laser beam)를 표현하기 위해서 Non-paraxial Gaussian beam을 이용하였으며, 본 계산에서 사용한 빔의 수식에 대해서는 [10]에 자세히 기술되어 있다.

III. 포획 힘의 계산

Nonparaxial Gaussian beam이 대상물체가 있는 유전체(Dielectric)를 포함하는 매질(Medium)을 진행하는 것을 계산하기 위해서 FDTD 방법을 이용하였다. FDTD 방법은 시간과 공간에 대한 편미분방정식으로 이루어진 맥스웰 방정식(Maxwell's equations)을 컴퓨터를 이용해서 계산할 수 있도록 한 방법으로 1966년 Yee에 의해서 처음 제안되었다.[11]

본 계산에서는 계산하고자 하는 레이저의 파장과 대상물체의 크기가 정해지면, 그 크기에 맞게 공간을 여러 개의 격자로 나누었다. 정확한 계산결과를 얻기 위해서 공간을 충분히 많이 나누어야 하는데,[12] 파장의 20분의 1 혹은 구의 지름의 40분의 1만큼 충분히 격자를 나누어서 사용하였다. 격자의 크기(dx)가 결정되면, 안정화 조건(Stability condition)에 의해서 시간 간격(dt)이 결정된다.[12] 그리고 각각의 격자에 물성치를 대입하고, 계산을 진행해서 계산영역 전체가 시간에 대해서 정상 상태(Steady-state)가 되면 그 때의 값들을 이용해서 대상물체에 작용하는 힘을 식 (1)을 이용해서 계산할 수 있다. Absorbing boundary layer(ABC)는 UPML(Uni-axial perfectly matched payer)을 사용했다.[12] 힘은 그림 2에서 점선으로 표시된 대상물체의 바로 바깥에서 계산하였다. 그리고 그림 2와 같이 FDTD 계산을 위한 계산영역에서 그 중심의 좌표는 항상 대상물체의 중심으로 하고, 대신에 Focused Gaussian beam의 중심의 좌표를 이동시켰다. FDTD에서 Incident fields를 모든 구간에서 해석적으로 입력해주기 위해서 scattered-field formulation을 이용하였다. 하지만 Scattered-field formulation은 시간이 많이 걸린다는 단점이 있다. 그래서 입력할 incident fields를 모든 시간과 공간에 대해서 미리 계산을 해서 저장을 해두고 사용하였다. Scattered-field formulation은 기본적으로

$$\varepsilon\frac{\partial \mathbf{E}_{scat}}{\partial t} + \sigma\mathbf{E}_{scat} = \nabla\times\mathbf{H}_{scat} - \sigma\mathbf{E}_{inc} - \left(\varepsilon - \varepsilon_0\right)\frac{\partial \mathbf{E}_{inc}}{\partial t}$$
$$\begin{cases} \mathbf{E}_{inc} = \text{electric incident field} \\ \mathbf{E}_{scat} = \text{electric scattered field} \\ \mathbf{H}_{scat} = \text{magnetic scattered field} \end{cases} \tag{3}$$

와 같은 형태를 가지는데, 본 계산과 같이 전도율(conductivity, σ)이 '0'이라면 (ε-ε_0)이 '0'이 아닌 구간에서만 incident fields가 적용된다. 그래서 계산시간과 메모리를 줄이기 위해서 대상물체와 가까운 범위에서만 incident fields를 계산하였다.

FDTD 방법은 공간을 격자로 나누어서 표현하기 때문에 구와 같이 곡면을 표현할 때, 구의 경계가 되는 격자에서 구의 안쪽과 바깥쪽에 해당하는 부피의 비를 고려해서 물성치를 대입하였다. 그리고 식 (2)를 이용해서 힘을 계산할 때는 적분구간에서 단위면적을 정확하게 고려하기 위해서, 적분구간을 극좌표계인 $0\le\theta\le2\pi$, $0\le\varphi\le\pi$로 하고, 그 좌표에서 전자기장의 값은 주변 격자들을 이용해서 선형 보간하여 계산하였다.

IV. 결과 및 고찰

물 속(ε_0=1.33)에 있는 지름이 1.0 μm인 폴리스틸렌 비드(polystyrene bead, ε=1.58)를 포획하는 힘을 계산하였다. 집속되는 레이저 빔은 앞에서 언급한 것처럼 non-paraxial Gaussian

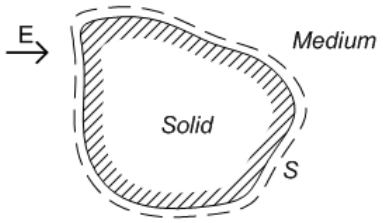


그림 1. 매질 속에 떠 있는 대상물체.

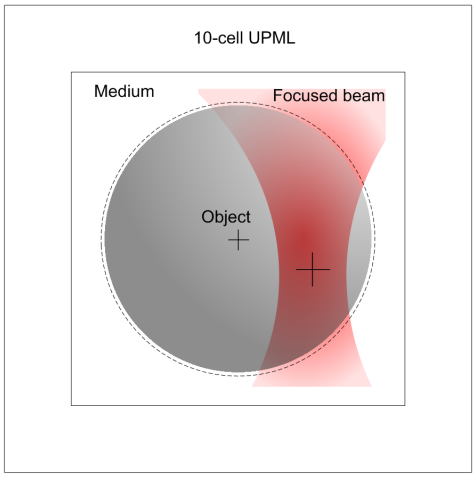
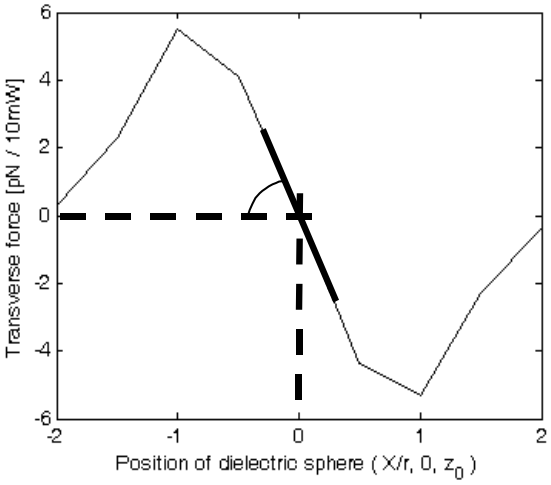


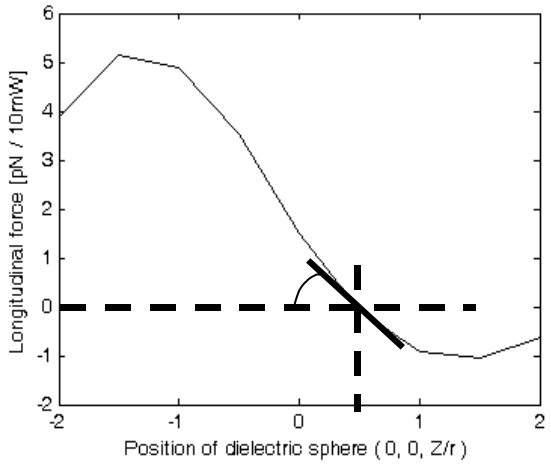
그림 2. FDTD 계산을 위한 계산 영역.

beam을 이용하였고, 파장(λ_0)은 1064 nm, N.A.는 1.2155, 파워(Power)는 10 mW로 하였고, 본 계산에서는 x축과 y축 방향의 minimum waist가 같은 조건에서 계산하였다. dx는 26.6 nm, dt는 약 4.436×10^{-17} sec, Scattered field의 격자의 개수는 (80×80×80)으로 하였고, UPML의 두께는 격자 10개로 하였다. 본 FDTD계산에서의 오차율은 3×10^{-6}이하였다. 이에 따른 계산 결과는 그림 3과 같다.

다른 실험이나 계산들과 마찬가지로 빔의 진행방향과 그것에 수직인 방향 모두에서 초점 근처로 힘이 작용하는 것을 확인할 수 있으며, 빔의 진행방향에서는 초점보다 조금 먼 곳에서 힘의 평형이 이루어진다는 것도 확인할 수 있다. 이 결과는 T.A. Nieminen이 T-matrix를 이용해서 계산한 것[13]과 비슷한 결과를 보이고 있다. 하지만, 일반적으로 폴리스틸렌 비드가 depth of field보다 좀 더 넓은 영역에서 초점 근처로 끌어당기는 힘이 작용하여 포획이 된다. 그런데 [13]의 결과에서는 포획구간이 빔이 Z방향으로 진행할 때, Z가 1.4 um보다 작은 구간이다. 이런 작은 포획구간은 실제와 다소 차이가 있으며, 또한 Z 방향에 대한 trap stiffness가 본 계산보다 작은 값을 가진다. 이것은 본 계산에서 non-paraxial Gaussian beam을 이용한 것과 달리, [13]에서는 paraxial Gaussian beam을 이용하였기 때문이다. 그리고 T-matrix방법은 구의 형상이 아닌 다른 형상들에 대해서는 계산하기가 어렵다는 단점이 있지만, FDTD 방법은 대상물체의 형상에 상관없이 쉽게 계산할 수 있다. FDTD 방법을 이용해서 계산한 [8]에서는 Gaussian beam이 아닌, plane wave가 진행하다가 대물렌즈(N.A.=1.15)를 통해서 집속되는 레이저에 의한 힘을 계산하였는데, 본 계산보다 더 작은 결과가 나왔다. 그런데 본 계산과 비슷한 조건에서 실험을 통하여 힘을 측정한 [14]에 의하면 본 계산과 거의 같은 결과를 보이고 있다.



(a) 대상물체를 x축 방향으로 움직일 때, 같은 방향의 힘



(b) 대상물체를 z축 방향으로 움직일 때, 같은 방향의 힘

그림 3. Polystyrene particle을 움직이면서 힘을 계산.

V. 결 론

FDTD 방법에 의한 광집게를 이용해서 마이크로 크기의 구형 유전체를 포획할 때의 힘을 계산하고, 그 방법을 서술하였다. Non-paraxial Gaussian beam을 이용하여서 강하게 집속되는 레이저를 해석적으로 표현하였으며, scattered-field formulation을 이용해서 FDTD에 적용시켰다. 포획하는 힘은 Maxwell's stress tensor에 기반하여 계산하였다. FDTD 방법을 이용하면 광집게를 위한 시뮬레이션에서 대상물체의 크기와 형상에 제약을 받지 않고 계산할 수 있다. 이 방법을 이용해서 광집게의 다양한 응용에 대한 계산을 시도할 수 있다.

감사의 글

이 논문은 2007년도 정부(과학기술부)의 재원으로 한국과학재단의 지원을 받아 수행된 연구임. (No. R01-2007-000-11650-0)

참고문헌

[1] A. Ashkin, J. M. Dziedzic, J. E. Bjorkholm, and Steven Chu, "Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles," *Optics Letters*, vol. 11, no. 5, pp. 288-290, 1986.

[2] Steven Chu, "Laser manipulation and atoms and particles," *Science*, vol. 253, no. 5022, pp. 861-866, 1991.

[3] A. Ashkin, J. M. Dziedzic and T. Yamane, "Optical trapping and manipulation of single cells using infrared laser beams," *Nature*, 330, pp. 769-771, 1987.

[4] In-Yong Park, Seung-Yong Sung, Jong-Hyun Lee and Yong-Gu Lee, "Manufacturing micro-scale structures by an optical tweezers system controlled by five finger tips," *J. Micromech. Microeng.*, vol. 17, pp. 82-89, 2007.

[5] Peter John Rodrigo, Lorand Kelemen, Carlo Amadeo Alonzo, Ivan R. Perch-Nielsen, Jeppe Seidelin Dam, Pal Ormos, and Jesper Gluckstad, "2D optical manipulation and assembly of shape complementary planar microstruc-

tures," *Optics Express*, vol. 15, No. 14, pp. 9009-9014, 2007.

[6] A. Ashkin, "Forces of a single-beam gradient laser trap on a dielectric sphere in the ray optics regime," *Biophysics. J.*, vol. 61, pp. 569-582, 1992.

[7] Yasuhiro Harada, Toshimitsu Asakura, "Radiation forces on a dielectric sphere in the Rayleigh scattering regime," *Optics Communications*, vol. 124, pp. 529-541, 1996.

[8] Wei Sun, Shi Pan and Yuchi Jiang, "Computation of the optical trapping force on small particles illuminated with a focused light beam using a FDTD method," *Journal of Modern Optics*, vol. 53, no. 18, pp. 2691-2700, 2006.

[9] J. A. Stratton, Electromagnetic Theory (McGraw-Hill Inc., New York and London, 1941), Chap. 2.

[10] Guoquan Zhou, Ruipin Chen, and Junlang Chen, "Propagation of non-paraxial nonsymmetrical vector Gaussian beam," *Optics Communications*, vol. 259, pp. 32-39, 2006.

[11] Kane S. Yee, "Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, AP-14, vol. 3, pp. 302-307, 1966.

[12] Allen Taflove and Suans C. Hangess, Computational Electrodynamics, The Finite-Difference Time-Domain Method Third Edition (Artech House Inc., Norwood, MA, 2005).

[13] T. A. Nieminen, H. Rubinsztein-Dunlop, N. R. Heckenberg, A. I. Bioshop, "Numerical modeling of optical trapping," *Computer Physics Communications*, vol. 142, pp. 468-471, 2001.

[14] Robert M. Simmons, Jeffrey T. Finer, Steven Chu, and James A. Spudich, "Quantitative Measurements of Force and Displacement Using an Optical Trap," *Biophysical Journal*, vol. 70, pp. 1813-1822, 1996.

Calculations of the Trapping Force of Optical Tweezers using FDTD Method

Seung-Yong Sung and Yong-Gu Lee†

Department of Mechatronics, Gwangju Institute of Science and Technology, 1 Oryong-dong, Buk-gu, Gwangju, 500-712, Korea

†*E-mail: lygu@gist.ac.kr*

(Received December 26, 2007, Revised manuscript January 29, 2008)

Optical tweezers are a tool that can use a tightly focused laser beam to trap and manipulate micron-sized dielectric particles that are immersed in a medium with lower refractive index. In this paper, the calculation of the trapping force of optical tweezers is presented. A nonparaxial Gaussian beam is used to represent a tightly focused Gaussian beam, and the FDTD (Finite-Difference Time-Domain) method is used for computing the electromagnetic field distributions in the dielectric medium. Scattered-field formulation is used for analytical expression of the incident fields. Using the electromagnetic field distribution from FDTD simulation, the trapping force is calculated based on Maxwell's stress tensor.

OCIS Codes : 260.0260, 260.2110.