

РБФ.

### **Джерела:**

1. Офіційний сайт Python [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://www.python.org/>– Дата звернення: 2.03.2017.
2. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации/ Пер. с польского И. Д. Руданского. М.: Финансы и Статистика, 2002.-344с.:ил.

### **Застосування середовища R для аналізу спектроскопічних даних** *Марковський А.А., Жишкович А.В., Малий Т.С., Апуневич С.В.*

*Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет,  
кафедра експериментальної фізики*

Recently the fluorescent microscopy of biological objects with doped luminescent nanoparticles as biomarkers has become rapidly developing technology. In this paper, we have synthesized the microparticles of YVO<sub>4</sub>:Bi<sup>3+</sup> by the method of solid phase synthesis with different concentrations of Bi. For processing and analysis of experimental data we used “prospectr” R-package, namely for data smoothing and noise elimination. As a result, we can say that with increasing of concentrations of Bismuth ions in the matrix YVO<sub>4</sub>, the edge of luminescence excitation is shifting to the longer wavelengths 370nm. This fact allows us to use such luminescent nanoparticles as biomarkers. The R packages for spectroscopy in physics research of luminescence appear to be more useful than standard methods of computer research.

Сучасний розвиток фізики, біології та медицини зумовлює пошук нових люмінесцентних наночастинок, призначених для використання їх як біологічно сумісних маркерів для медичної діагностики мікроорганізмів і патологічних клітин, а також розробки експрес-методу ідентифікації бактеріологічного забруднення, методів фотодинамічної терапії пухлинних захворювань.

В останні роки набуває велику ваги аналіз й технології люмінесцентної мікроскопії біологічних об'єктів із використанням легованих люмінесцентних наночастинок у якості біомаркерів.

Однак відомо, що фотони з довжиною хвилі менше 290nm при поглинанні біологічними клітинами приводять до незворотніх змін структури, тому ведеться активний пошук люмінесцентних матеріалів, які збуджуються квантами з довжиною хвилі більше 290nm. І ще одна причина зміщення краю збудження зв'язана з областю пропускання лабораторних люмінесцентних мікроскопів, що обмежується використанням скляної оптики та її поглинанням при  $\lambda < 330\text{nm}$ . Інша обставина зумовлена спектральним складом випромінювання ртутних ламп високого тиску з максимумом випромінювання при 366nm.

В даній роботі було синтезовано мікрочастинки YVO<sub>4</sub>:Bi<sup>3+</sup> методами твердофазного синтезу з різною концентрацією Bi. Основною метою було переві-

риту припущення, що зі збільшенням концентрації іонів вісмуту в матриці YVO<sub>4</sub> вдається зсунути край області збудження люмінесценції в область більших довжин хвиль, хоча б з 330 до 370нм. Це дозволить подолати перелічені проблеми при роботі з люмінесцентними наночастинками.

Для наочності аналізу динаміки краю збудження люмінесценції, необхідно зробити її графічну візуалізацію. Експериментальні данні отримувались з монохроматора МДР-2, для обробки зручно використовувати пакети R. Насправді, важко знайти статистичний метод чи алгоритм, який не втілено у пакетах R чи не опубліковано у вигляді рецептури або зразка. Навіть більше, R вже є дечим значно більшим ніж просто статистичним пакетом чи засобом візуалізації, він вже може потіснити MATLAB (Octave) як система наукових обчислень та моделювання.

Перелічимо основні проекти які застосовуються в спектроскопії: “hyperSpec” дає можливість візуалізувати/аналізувати гіперспектральні дані, тобто спектри із додатковою інформацією про розподіл у просторі, часі, концентрацію тощо; “ChemoSpec” є збіркою функцій для побудови графіків та загального аналізу спектральних даних; “prospectr” містить функції для попередньої обробки та формування вибірки для дифузних спектрів відбивання; “resemble” включає функції аналізу відмінностей, нелінійне моделювання спектральних даних; “TIMP” надає середовище розв’язування задач для апроксимації, розділення моделей, для часово-впорядкованих спектрів; “sreac” втілює засоби калібровки спектрів Cluster-based Peak Alignment (CluPA); “Peaks” надає функції для маніпуляцій із спектром, перенесений із ROOT/TSpectrum.

Ми скористались пакетом prospectr для згладжування даних та усунення шуму методом біжучого середнього, а також для побудови графіків. Як результат, можна констатувати, що зі збільшенням концентрації іонів вісмуту в матриці YVO<sub>4</sub> вдається зсунути край області збудження люмінесценції в область більших довжин хвиль до 370нм.

R- широко використовується, як статистичне програмне забезпечення для аналізу даних і фактично є стандартом для статистичних програм. Пакети R для спектроскопії зручно використовувати в фізичних дослідженнях люмінесценції, в порівнянні зі стандартними методами комп’ютерного дослідження.

### **Джерела:**

1. <http://www.r-project.org/>
2. GNU Project: <http://www.gnu.org>
3. Бібліотека CRAN: <http://cran.r-project.org/>
4. Journal of Statistical Software <http://www.jstatsoft.org/>, January 2007, Vol. 18, Issue 1. An Introduction to the Special Volume “Spectroscopy and Chemometrics in R”