

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Московский физико-технический институт

(государственный университет)

Кафедра молекулярной физики

Лабораторная работа

**ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
ПОГЛОЩЕНИЯ.**

**КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ
ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ.**

Составили:

А.Е. Мишина

В.В. Зарубин

Москва

МФТИ

2019

In [1]:

```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.signal import find_peaks_cwt
```

Reference (air)

In [48]:

```
names = ['Волновое число, v, см^-1', '', '', 'Волновое число, v, см^-1 ', ' ', '', 'Волновое  
df_r = pd.read_excel('Vozdukh_Pri_Raznykh_Razresh.xlsx', sheet_name='Воздух при разных разр
```

Референтный спектр

In [81]:

```
df_r[:10]
```

Референтный спектр

Out[81]:

Воздух, разрешение 1.0, без апод.				Воздух, разрешение 0,5, без апод.			Воз разреш 2.0 а
.1				.2			
0	Волновое число v, см^-1	Интенсивность	Нормировка	Волновое число v, см^-1	Интенсивность	Нормировка	Волн чис с
1	0	811206	0.00811206	0	671469	0.00671469	
2	0.482281	878687	0.00878687	0.24114	2463680	0.0246368	0.96
3	0.964562	1079180	0.0107918	0.482281	4317250	0.0431725	1.9
4	1.44684	934295	0.00934295	0.723421	2166760	0.0216676	2.8
5	1.92912	1266020	0.0126602	0.964562	1216800	0.012168	3.8
6	2.4114	1436270	0.0143627	1.2057	705003	0.00705003	4.8
7	2.89369	945033	0.00945033	1.44684	1373240	0.0137324	5.7
8	3.37597	662844	0.00662844	1.68798	691347	0.00691347	6.7
9	3.85825	816891	0.00816891	1.92912	2490950	0.0249095	7.7

In [49]:

```
plt.style.use('seaborn-notebook')  
plt.rcParams['figure.figsize'] = (18, 7)
```

In [3]:

```
df_r = df_r.set_index('Волновое число, v, см^-1')
```

In [82]:

```
df_r[5000:5010]
```

Out[82]:

	Воздух, разрешение 1.0, без апод.			.1	Воздух, разрешение 0,5, без апод.			.2	Воздух, разрешение 2.0, без апод.		
5000	2410.92	60720700	0.607207		1205.46	44621400	0.446214		4821.84	367509	
5001	2411.4	60593700	0.605937		1205.7	44610800	0.446108		4822.81	365902	
5002	2411.89	60566200	0.605662		1205.94	44605800	0.446058		4823.77	365118	
5003	2412.37	60666900	0.606669		1206.18	44619800	0.446198		4824.74	365051	
5004	2412.85	60661700	0.606617		1206.43	44638100	0.446381		4825.7	364611	
5005	2413.33	60530100	0.605301		1206.67	44630700	0.446307		4826.67	364560	
5006	2413.82	60506700	0.605067		1206.91	44600100	0.446001		4827.63	365779	
5007	2414.3	60608200	0.606082		1207.15	44588900	0.445889		4828.6	366555	
5008	2414.78	60604000	0.60604		1207.39	44621800	0.446218		4829.56	365272	
5009	2415.26	60483200	0.604832		1207.63	44664500	0.446645		4830.53	363792	

In [83]:

```
df_r[15000:15010]
```

Out[83]:

	Воздух, разрешение 1.0, без апод.			.1	Воздух, разрешение 0,5, без апод.			.2	Воздух, разрешение 2.0, без апод.		
15000	7233.73	118096	0.00118096		3616.87	9376060	0.0937606		14467.5	3006	
15001	7234.21	111198	0.00111198		3617.11	9347800	0.093478		14468.4	2248	
15002	7234.7	112474	0.00112474		3617.35	9281640	0.0928164		14469.4	2975	
15003	7235.18	105937	0.00105937		3617.59	9116030	0.0911603		14470.4	4019	
15004	7235.66	97311.4	0.000973114		3617.83	8943970	0.0894397		14471.3	4270	
15005	7236.14	99482	0.00099482		3618.07	8890150	0.0889015		14472.3	3747	
15006	7236.62	103751	0.00103751		3618.31	8953210	0.0895321		14473.2	3360	
15007	7237.11	97051.2	0.000970512		3618.55	9017830	0.0901783		14474.2	33	
15008	7237.59	89661.6	0.000896616		3618.79	9000110	0.0900011		14475.2	3604	
15009	7238.07	95580	0.0009558		3619.04	8937240	0.0893724		14476.1	3797	

In [84]:

```
df_r[30000:30010]
```

Out[84]:

	Воздух, разрешение 1.0, без апод.			.1	Воздух, разрешение 0,5, без апод.			.2	Воздух, разрешение 2.0, без апод.		
30000	14467.9	44453.1	0.000444531		7233.97	107822	0.00107822		NaN	Na	
30001	14468.4	35669.3	0.000356693		7234.21	127544	0.00127544		NaN	Na	
30002	14468.9	35085.4	0.000350854		7234.45	144106	0.00144106		NaN	Na	
30003	14469.4	40604.4	0.000406044		7234.7	137707	0.00137707		NaN	Na	
30004	14469.9	46600.5	0.000466005		7234.94	122755	0.00122755		NaN	Na	
30005	14470.4	37889.9	0.000378899		7235.18	126973	0.00126973		NaN	Na	
30006	14470.8	28608.7	0.000286087		7235.42	146354	0.00146354		NaN	Na	
30007	14471.3	35228.8	0.000352288		7235.66	148650	0.0014865		NaN	Na	
30008	14471.8	42727.4	0.000427274		7235.9	122580	0.0012258		NaN	Na	
30009	14472.3	38968.9	0.000389689		7236.14	96114.5	0.000961145		NaN	Na	

In [85]:

```
df_r[60000:60010]
```

Out[85]:

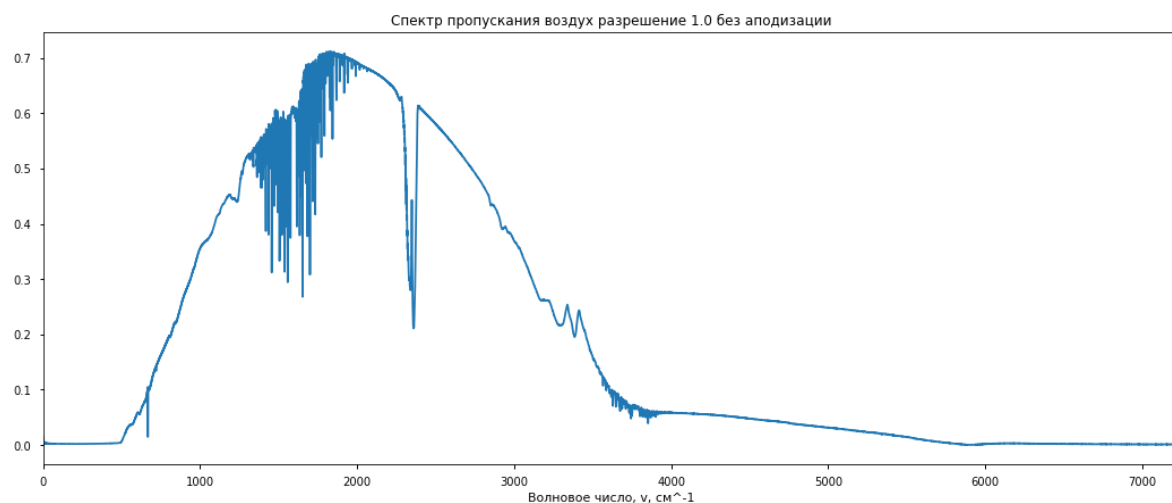
	Воздух, разрешение 1.0, без апод.			.1	Воздух, разрешение 0,5, без апод.			.2	Воздух, разрешение 2.0, без апод.			.3	Е
60000	NaN	NaN	0		14468.2	38920.1	0.000389201		NaN	NaN	0		
60001	NaN	NaN	0		14468.4	41490.8	0.000414908		NaN	NaN	0		
60002	NaN	NaN	0		14468.7	28207.8	0.000282078		NaN	NaN	0		
60003	NaN	NaN	0		14468.9	29537.7	0.000295377		NaN	NaN	0		
60004	NaN	NaN	0		14469.2	35021.9	0.000350219		NaN	NaN	0		
60005	NaN	NaN	0		14469.4	44782.3	0.000447823		NaN	NaN	0		
60006	NaN	NaN	0		14469.6	43314.4	0.000433144		NaN	NaN	0		
60007	NaN	NaN	0		14469.9	36672.8	0.000366728		NaN	NaN	0		
60008	NaN	NaN	0		14470.1	43276.5	0.000432765		NaN	NaN	0		
60009	NaN	NaN	0		14470.4	43314.5	0.000433145		NaN	NaN	0		

In [18]:

```
df_r['.1'][0:7238.07].plot().set_title('Спектр пропускания воздух разрешение 1.0 без аподизации')
```

Out[18]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания воздух разрешение 1.0 без аподизации')



In [9]:

```
df_r = df_r.set_index('Волновое число, ν, см⁻¹ ') # take the longest series for ground ax
```

In [10]:

```
df_r['.3'][0:7039.37].plot().set_title('Спектр пропускания воздух разрешение 2.0 без аподизации')
```

Out[10]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания воздух разрешение 2.0 без аподизации')



In [21]:

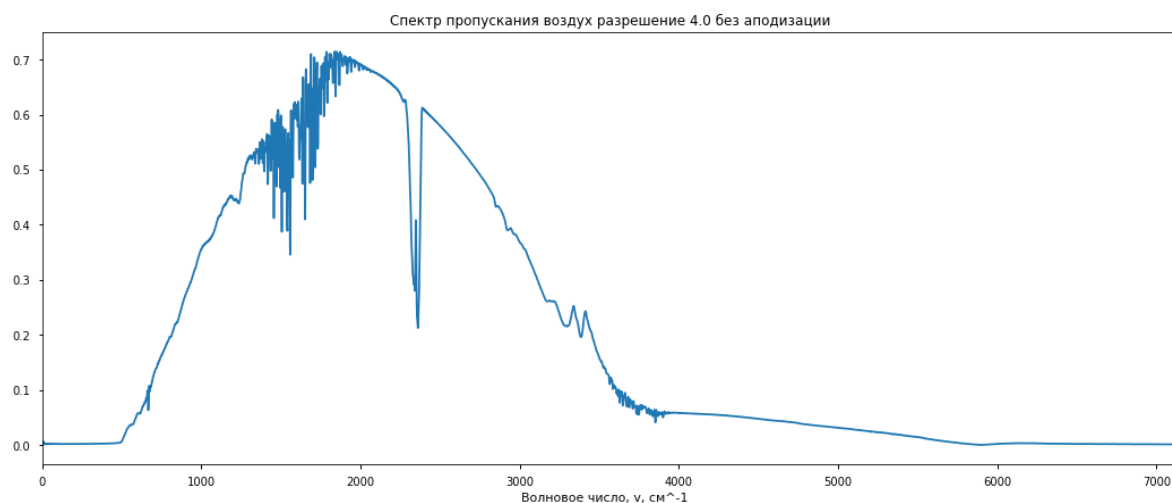
```
df_r = df_r.set_index('Волновое число, ν, см⁻¹ ')
```

In [23]:

```
df_r['.4'][0:7139.69].plot().set_title('Спектр пропускания воздух разрешение 4.0 без аподизации')
```

Out[23]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания воздух разрешение 4.0 без аподизации')



In [50]:

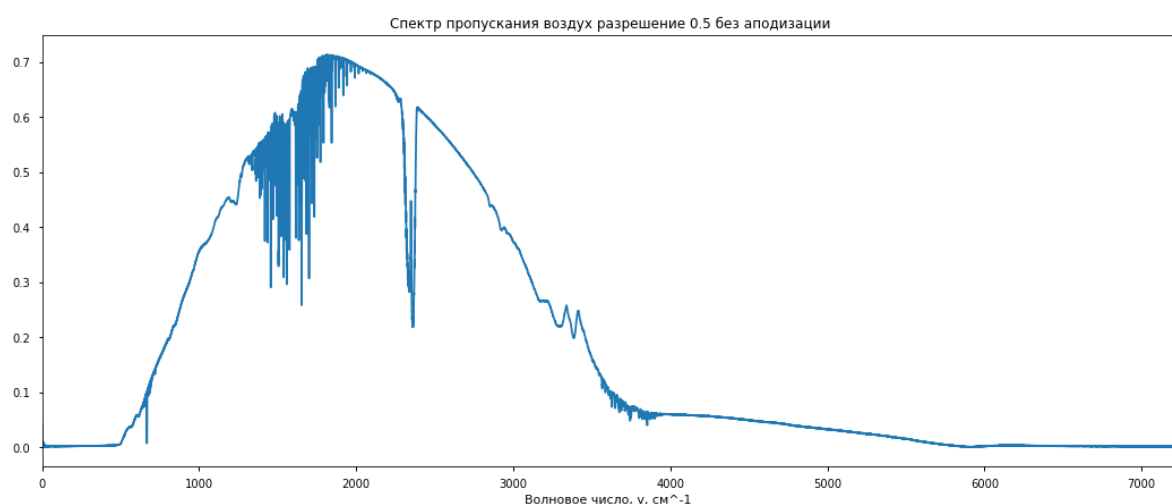
```
df_r = df_r.set_index('Волновое число, ν, см⁻¹ ') # take the longest series for ground ax
```

In [6]:

```
df_r['.2'][0:7236.14].plot().set_title('Спектр пропускания воздух разрешение 0.5 без аподизации')
```

Out[6]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания воздух разрешение 0.5 без аподизации')

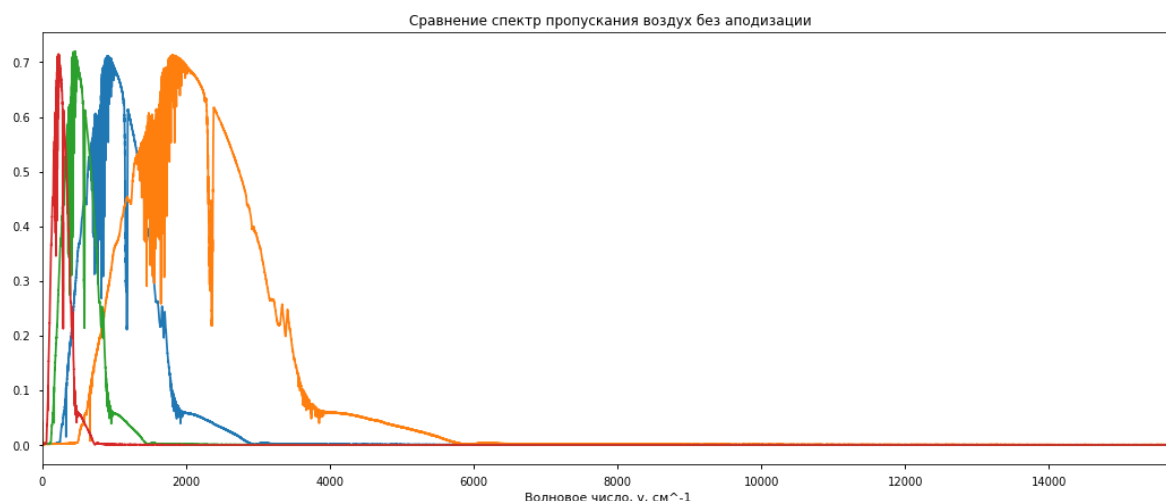


In [7]:

```
df_r['.1'][0:7238.07].plot()  
df_r['.2'][0:7236.14].plot()  
df_r['.3'][0:7039.37].plot()  
df_r['.4'][0:7139.69].plot().set_title('Сравнение спектр пропускания воздух без аподизации')
```

Out[7]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение спектр пропускания воздух без аподизации')

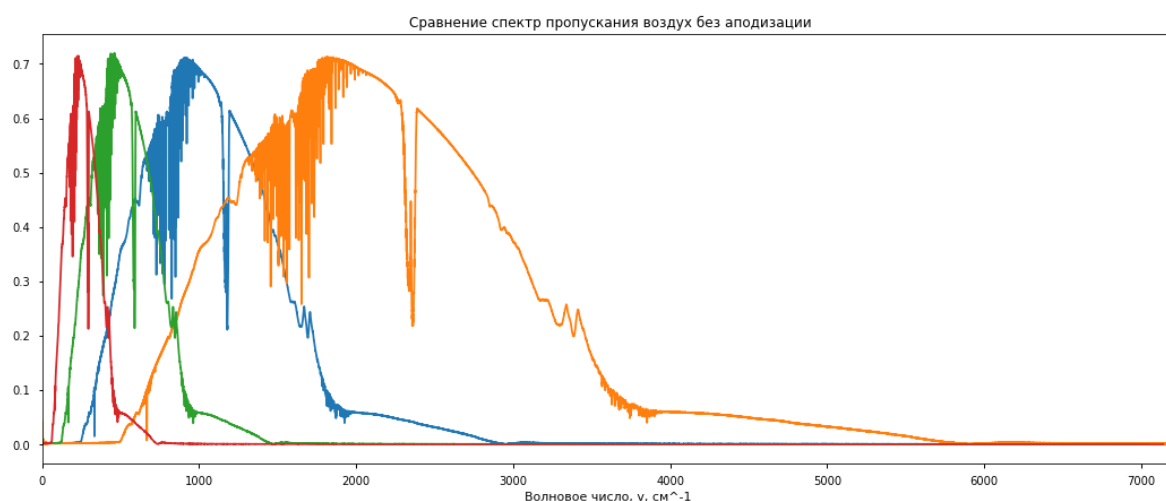


In [8]:

```
df_r['.1'][0:7238.07].plot()  
df_r['.2'][0:7236.14].plot()  
df_r['.3'][0:7039.37].plot()  
df_r['.4'][0:7139.69].plot().set_title('Сравнение спектр пропускания воздух без аподизации')
```

Out[8]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение спектр пропускания воздух без аподизации')



In [52]:

```
first = df_r['.1'][0:7238.07]  
second = df_r['.3'][0:7039.37]  
fourth = df_r['.4'][0:7139.69]  
semi = df_r['.2'][0:7236.14]
```

In [55]:

```
ground = np.concatenate((first, second, fourth, semi), axis=0)
```

In [3]:

```
n_names = ['Воздух, разрешение 0.5, без апод.', '', '', 'Воздух, разрешение 0,5, треуг.', '' ]
df_a = pd.read_excel('Sravnenie_Apodizatsiy.xlsx', sheet_name='Сравнение аподизаций', header=0)
```

Сравнение аподизаций

In [93]:

```
df_a.head(10)
```

Out[93]:

	Воздух, разрешение 0.5, без апод.			.1	Воздух, разрешение 0,5, треуг.			.2
0	Воновое число, см^-1	Интенсивность	Нормировка		Воновое число, см^-1	Интенсивность	Нормировка	
1	0	671469	0.00671469		0	2081260	0.0208126	
2	0.24114	2463680	0.0246368		0.24114	2086010	0.0208601	
3	0.482281	4317250	0.0431725		0.482281	1921900	0.019219	
4	0.723421	2166760	0.0216676		0.723421	1395730	0.0139573	
5	0.964562	1216800	0.012168		0.964562	1048770	0.0104877	
6	1.2057	705003	0.00705003		1.2057	785837	0.00785837	
7	1.44684	1373240	0.0137324		1.44684	604055	0.00604055	
8	1.68798	691347	0.00691347		1.68798	528257	0.00528257	
9	1.92912	2490950	0.0249095		1.92912	893095	0.00893095	

In [4]:

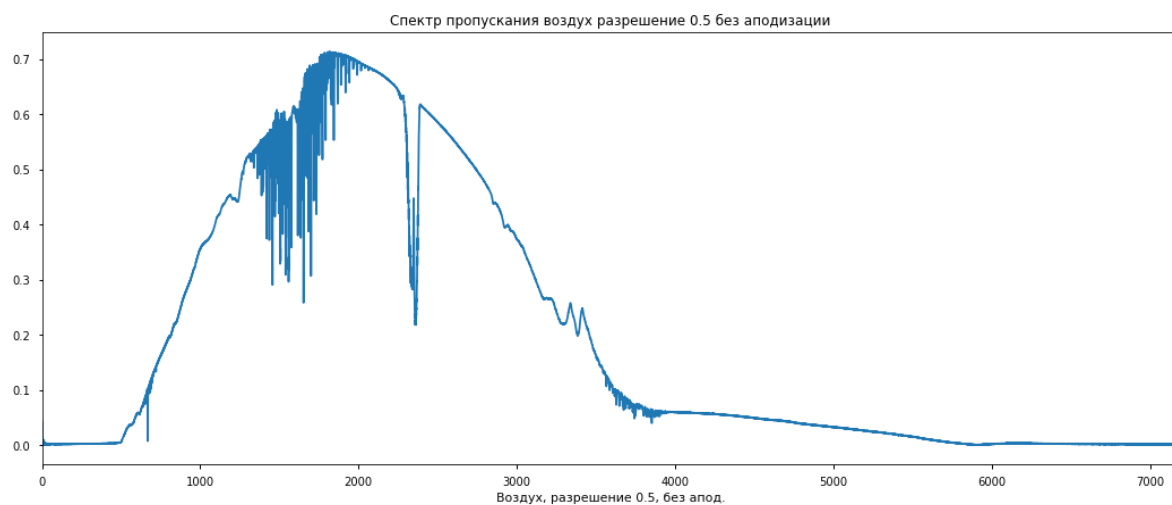
```
df_a = df_a.set_index('Воздух, разрешение 0.5, без апод.') #вона
```


In [8]:

```
df_a['.1'][0:7181.89].plot().set_title('Спектр пропускания воздух разрешение 0.5 без аподизации')
```

Out[8]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания воздух разрешение 0.5 без аподизации')

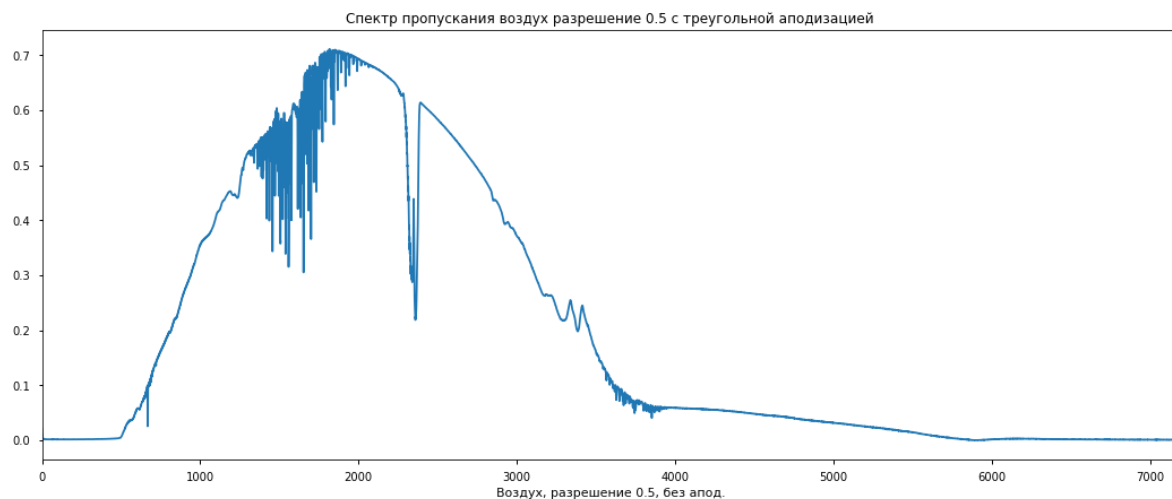


In [21]:

```
df_a['.2'][0:7181.89].plot().set_title('Спектр пропускания воздух разрешение 0.5 с треугольн
```

Out[21]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания воздух разрешение 0.5 с треугольной аподизацией')

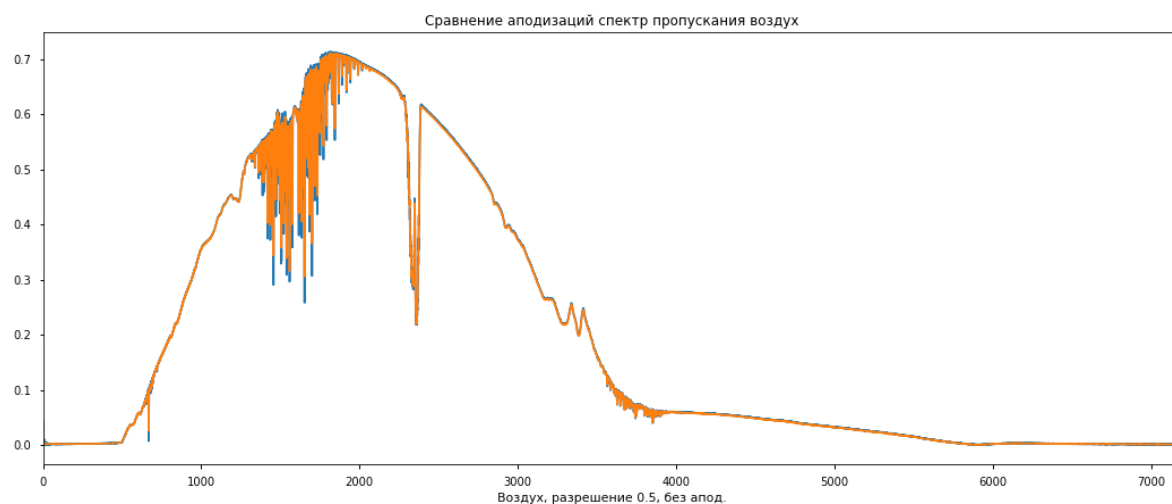


In [9]:

```
df_a['.1'][0:7181.89].plot()  
df_a['.2'][0:7181.89].plot().set_title('Сравнение аподизаций спектр пропускания воздух')
```

Out[9]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение аподизаций спектр пропускания воздух')



In [10]:

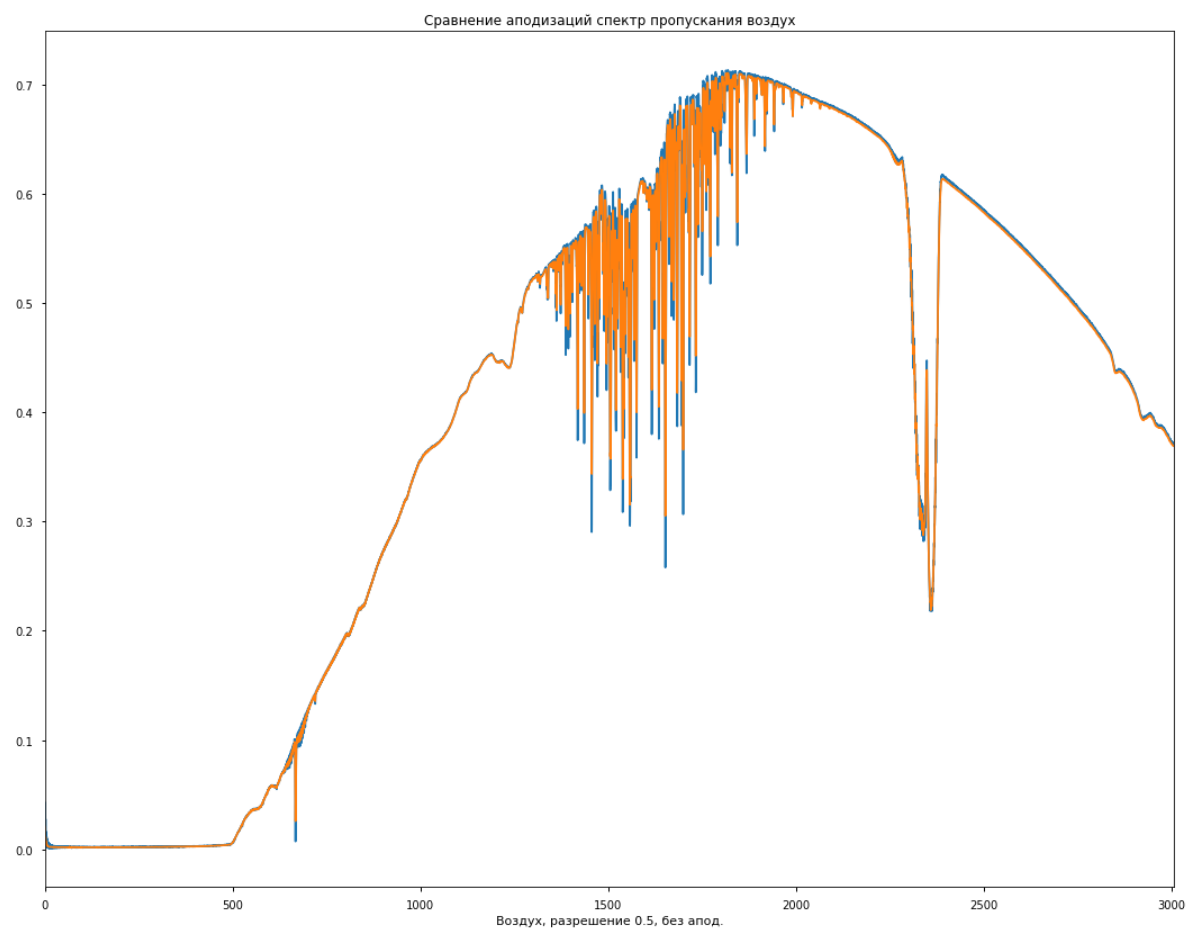
```
plt.rcParams['figure.figsize'] = (18, 14)
```

In [11]:

```
df_a['.1'][0:3006.54].plot()  
df_a['.2'][0:3006.54].plot().set_title('Сравнение аподизаций спектр пропускания воздух') #
```

Out[11]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение аподизаций спектр пропускания воздух')

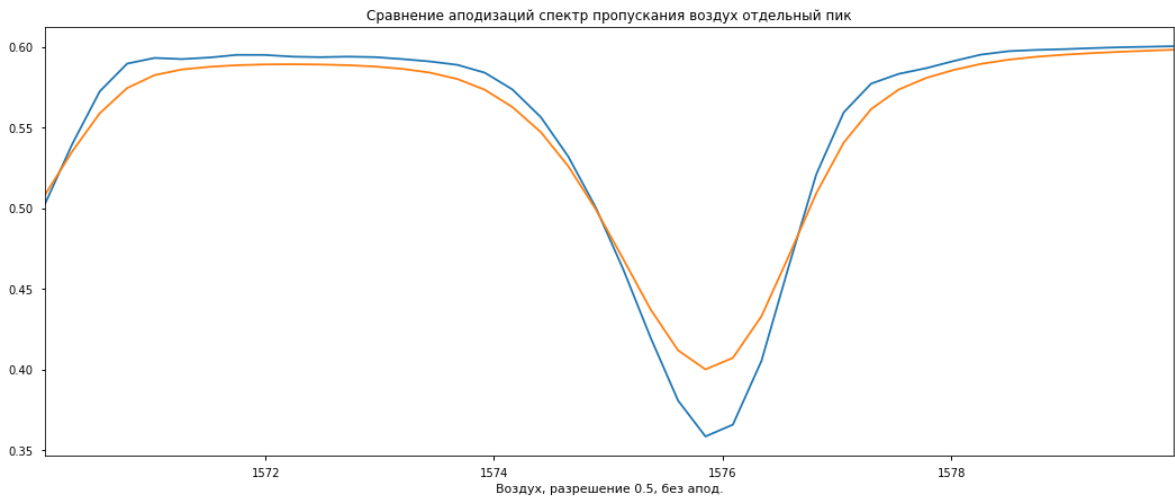


In [16]:

```
df_a['.1'][1570.07:1579.95].plot()  
df_a['.2'][1570.07:1579.95].plot().set_title('Сравнение аподизаций спектр пропускания возду
```

Out[16]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение аподизаций спектр пропускания воздух отдельный пи
к')



In [94]:

```
df_a[30000:30010]
```

Out[94]:

	Воздух, разрешение 0.5, без апод.			.1	Воздух, разрешение 0,5, треуг.			.2
30000	7233.97	107822	0.00107822		7233.97	102621	0.00102621	
30001	7234.21	127544	0.00127544		7234.21	106408	0.00106408	
30002	7234.45	144106	0.00144106		7234.45	111519	0.00111519	
30003	7234.7	137707	0.00137707		7234.7	115672	0.00115672	
30004	7234.94	122755	0.00122755		7234.94	117050	0.0011705	
30005	7235.18	126973	0.00126973		7235.18	115969	0.00115969	
30006	7235.42	146354	0.00146354		7235.42	114744	0.00114744	
30007	7235.66	148650	0.0014865		7235.66	115053	0.00115053	
30008	7235.9	122580	0.0012258		7235.9	115866	0.00115866	
30009	7236.14	96114.5	0.000961145		7236.14	115340	0.0011534	

In [95]:

```
df_a[65527:65537]
```

Out[95]:

	Воздух, разрешение 0.5, без апод.			.1	Воздух, разрешение 0,5, треуг.			.2
65527	15801	36301.2	0.000363012		15801	37393	0.00037393	
65528	15801.2	33944.1	0.000339441		15801.2	34357.5	0.000343575	
65529	15801.5	28070.7	0.000280707		15801.5	32372.9	0.000323729	
65530	15801.7	38421.1	0.000384211		15801.7	30810.1	0.000308101	
65531	15801.9	41438.7	0.000414387		15801.9	29294.1	0.000292941	
65532	15802.2	37823.2	0.000378232		15802.2	30209.1	0.000302091	
65533	15802.4	38683.2	0.000386832		15802.4	35405.3	0.000354053	
65534	15802.7	40348.1	0.000403481		15802.7	41451.4	0.000414514	
65535	15802.9	36610.7	0.000366107		15802.9	42754	0.00042754	
65536	15803.1	26902.8	0.000269028		15803.1	39752.9	0.000397529	

In [3]:

```
hcl_names = ['Сухая колба, без апод.', '', '', 'HCl, разрешение 0,5, без апод.', '', 'HCl,  
df_hcl = pd.read_excel('Vse_Pro_HCL.xlsx', sheet_name='Все про HCL', header=None, names=hcl
```

HCl

In [25]:

```
df_hcl.head(10)
```

Out[25]:

	Сухая колба, без апод.			.1	HCl, разрешение 0,5, без апод.		.2	HCl, разрешение 0,5, бипораб.		.3
0	499.884	34911.6	0.034912		499.884	7.25999		499.884	4.36288	
1	500.125	41104.8	0.041105		500.125	6.83055		500.125	3.68267	
2	500.366	36870.1	0.036870		500.366	5.98245		500.366	4.20402	
3	500.608	30492.8	0.030493		500.608	3.73579		500.608	4.93313	
4	500.849	30464.0	0.030464		500.849	3.72021		500.849	5.31234	
5	501.090	31662.3	0.031662		501.090	4.75329		501.090	4.29076	
6	501.331	34942.9	0.034943		501.331	5.37723		501.331	4.64263	
7	501.572	35623.8	0.035624		501.572	7.07874		501.572	4.44086	
8	501.813	27397.4	0.027397		501.813	6.40373		501.813	4.14318	
9	502.054	22917.8	0.022918		502.054	4.89483		502.054	6.28210	

In [26]:

```
df_hcl[10000:10010]
```

Out[26]:

	Сухая колба, без апод.			.1	HCl, разрешение 0,5, без апод.		.2	HCl, разрешение 0,5, бипораб.		.3
10000	2911.29	25176100.0	25.1761		2911.29	48.9292		2911.29	47.3654	
10001	2911.53	25145300.0	25.1453		2911.53	48.8909		2911.53	47.3434	
10002	2911.77	25108700.0	25.1087		2911.77	48.8939		2911.77	47.3313	
10003	2912.01	25084100.0	25.0841		2912.01	48.9258		2912.01	47.3281	
10004	2912.25	25058400.0	25.0584		2912.25	48.9336		2912.25	47.3235	
10005	2912.49	25012800.0	25.0128		2912.49	48.8865		2912.49	47.3006	
10006	2912.74	24965500.0	24.9655		2912.74	48.8115		2912.74	47.2560	
10007	2912.98	24951100.0	24.9511		2912.98	48.7590		2912.98	47.2086	
10008	2913.22	24962100.0	24.9621		2913.22	48.7559		2913.22	47.1775	
10009	2913.46	24954100.0	24.9541		2913.46	48.8036		2913.46	47.1650	

In [27]:

```
df_hcl[18656:18666]
```

Out[27]:

	Сухая колба, без апод.			.1	HCl, разрешение 0,5, без апод.		.2	HCl, разрешение 0,5, бипораб.		.3
18656	4998.60	2389880.0	2.38988		4998.60	59.7374		4998.60	58.2862	
18657	4998.84	2414980.0	2.41498		4998.84	59.6411		4998.84	58.1871	
18658	4999.08	2441730.0	2.44173		4999.08	59.5162		4999.08	58.0216	
18659	4999.32	2429310.0	2.42931		4999.32	60.1329		4999.32	58.0133	
18660	4999.56	2394120.0	2.39412		4999.56	61.0357		4999.56	57.9559	
18661	4999.81	2390500.0	2.39050		4999.81	61.1031		4999.81	57.6653	
18662	5000.05	2425560.0	2.42556		5000.05	60.0852		5000.05	57.4363	
18663	5000.29	2443730.0	2.44373		5000.29	58.7772		5000.29	57.6025	
18664	5000.53	2411980.0	2.41198		5000.53	57.9767		5000.53	57.9729	
18665	NaN	NaN	NaN		NaN	NaN		NaN	NaN	

In [18]:

```
plt.rcParams['figure.figsize'] = (18, 7)
```

In [4]:

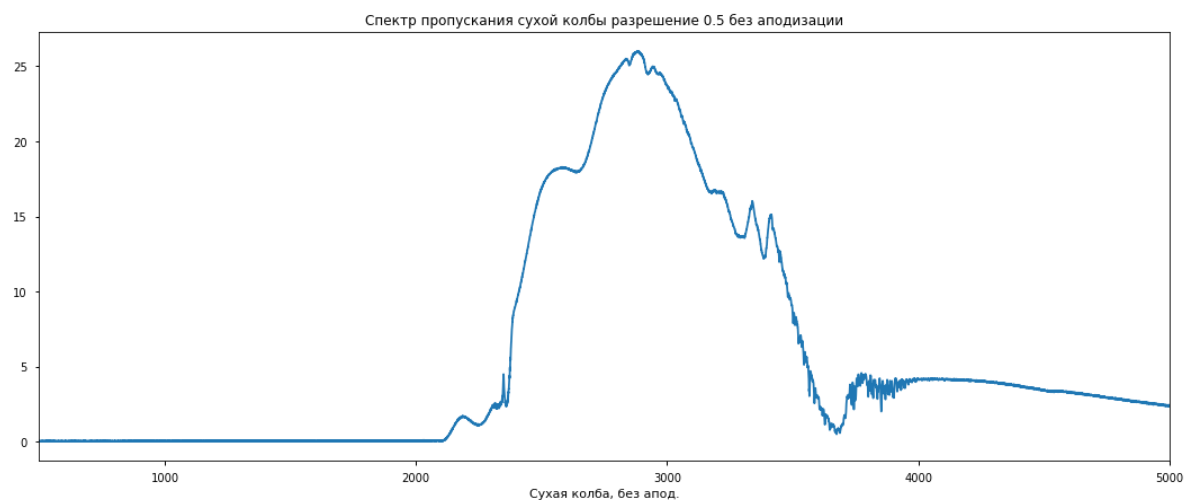
```
df_hcl = df_hcl.set_index('Сухая колба, без апод.')
```

In [29]:

```
df_hcl['.1'].plot().set_title('Спектр пропускания сухой колбы разрешение 0.5 без аподизации')
```

Out[29]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания сухой колбы разрешение 0.5 без аподизации')

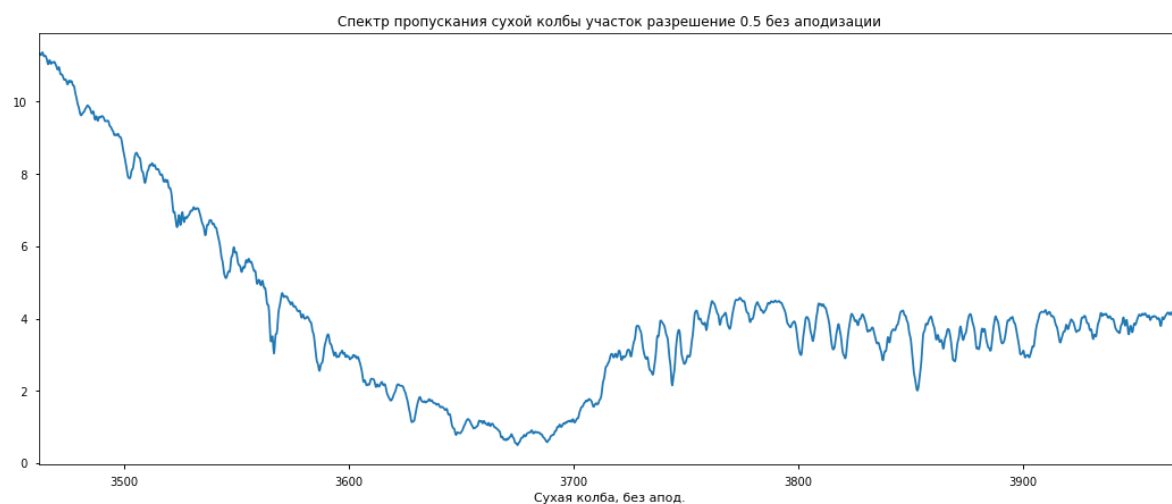


In [30]:

```
df_hcl['.1'][3462.29:3969.65].plot().set_title('Спектр пропускания сухой колбы участок разр
```

Out[30]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания сухой колбы участок разрешение 0.5 без аподизации')

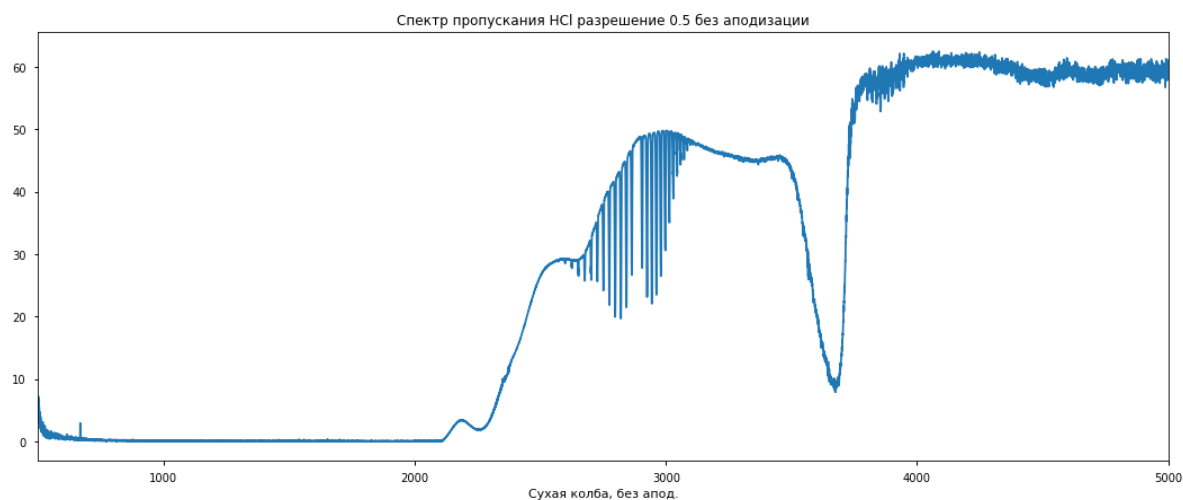


In [32]:

```
df_hcl['.2'].plot().set_title('Спектр пропускания HCl разрешение 0.5 без аподизации')
```

Out[32]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания HCl разрешение 0.5 без аподизации')

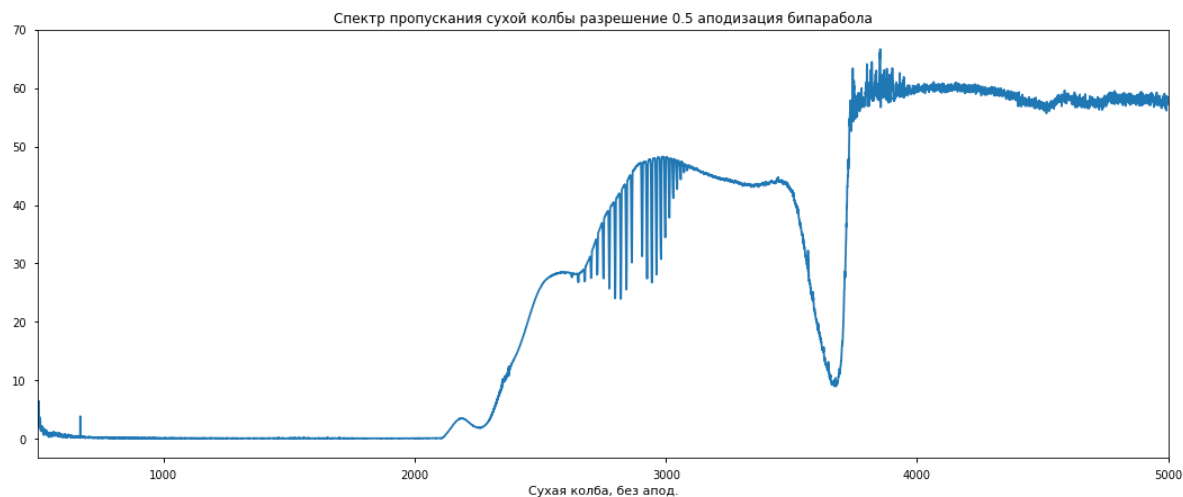


In [33]:

```
df_hcl['.3'].plot().set_title('Спектр пропускания HCl разрешение 0.5 аподизация бипарабола')
```

Out[33]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр пропускания сухой колбы разрешение 0.5 аподизация бипарабола')



In [5]:

```
df_hcl_t = pd.read_csv('HCL12triangle.ascii', header=None, sep='\t', names=['HCl', 'разрешени
```


In [58]:

```
df_hcl_t.head()
```

Out[58]:

HCl, разрешение 0,5, треуг.		
0	499.884	3.41761
1	500.125	3.68159
2	500.366	2.83603
3	500.608	1.92633
4	500.849	2.60005

In [6]:

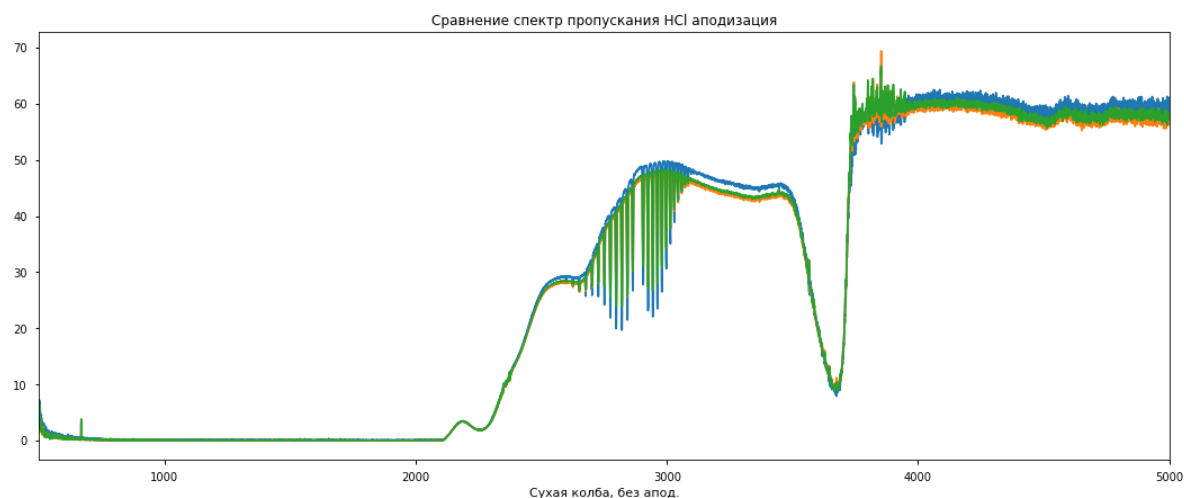
```
df_hcl_t = df_hcl_t.set_index('HCl, разрешение 0,5, треуг.')
```

In [7]:

```
df_hcl['.2'].plot()  
df_hcl_t[''].plot()  
df_hcl['.3'].plot().set_title('Сравнение спектр пропускания HCl аподизация')
```

Out[7]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение спектр пропускания HCl аподизация')

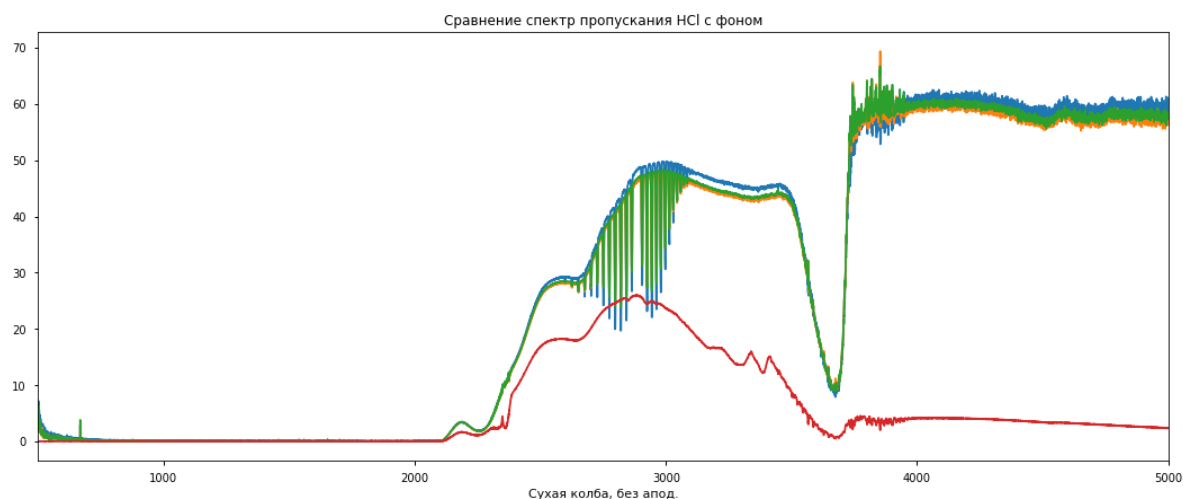


In [9]:

```
df_hcl['.2'].plot().set_title  
df_hcl_t[''].plot()  
df_hcl['.3'].plot()  
df_hcl['.1'].plot().set_title('Сравнение спектр пропускания HCl с фоном')
```

Out[9]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение спектр пропускания HCl с фоном')



In [10]:

```
spectrum = pd.read_excel('Spektr.xlsx', sheet_name='Sheet1', header=None, names=['Волновое
```

Спектр

In [100]:

```
spectrum.head()
```

Out[100]:

HCl, разрешение 0,5, без апод.		
0	Волновое число, см ⁻¹	Теперь точно поглощение
1	2316.4	0.948765
2	2316.64	0.94915
3	2316.88	0.948555
4	2317.12	0.946552

In [11]:

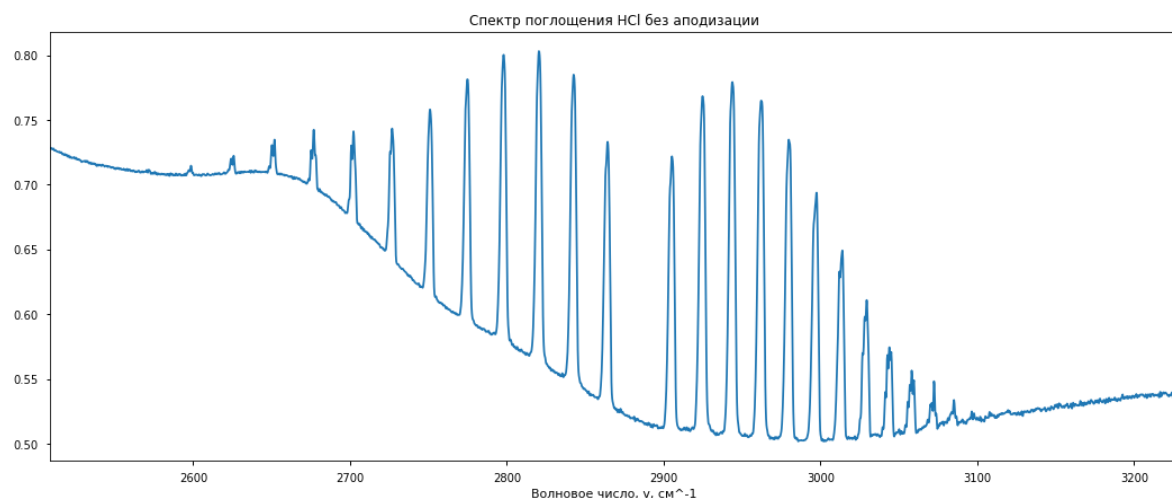
```
spectrum = spectrum.set_index('Волновое число, v, см-1)
```

In [140]:

```
spectrum['Интенсивность поглощения'][2508.58:3228.63].plot().set_title('Спектр поглощения HCl без аподизации')
```

Out[140]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр поглощения HCl без аподизации')



In [21]:

```
spectrum_bp = pd.read_excel('Spektr.xlsx', sheet_name='Sheet1', header=None, names=['Волновое число', 'Интенсивность поглощения'])
```

In [22]:

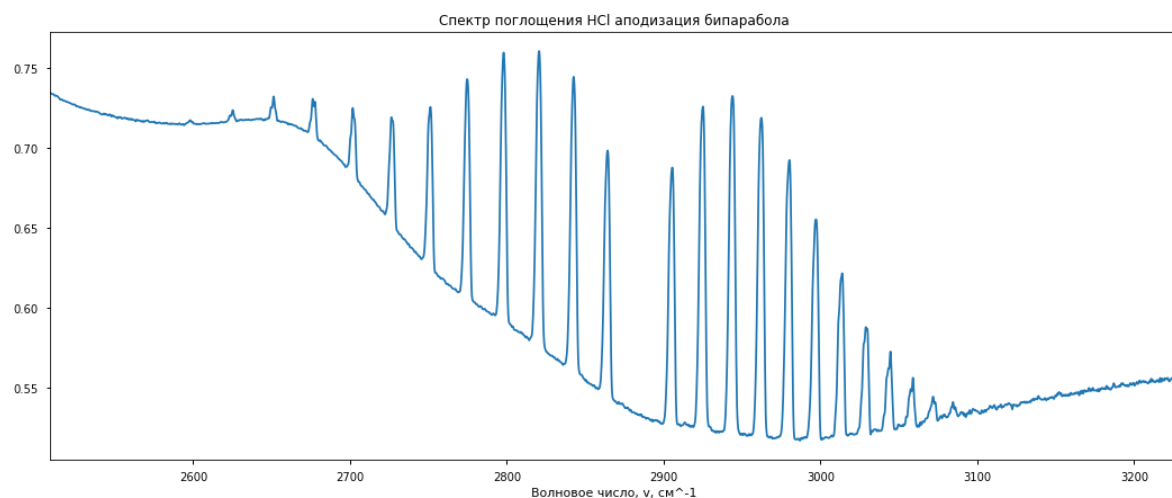
```
spectrum_bp = spectrum_bp.set_index('Волновое число,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ )
```

In [50]:

```
spectrum_bp['Интенсивность поглощения'][2508.58:3228.63].plot().set_title('Спектр поглощения HCl аподизация бипарабола')
```

Out[50]:

Text(0.5, 1.0, 'Спектр поглощения HCl аподизация бипарабола')



In [17]:

```
spectrum_t = pd.read_csv('HCl12triangle.ascii', header=None, sep='\t', names=['Волновое число', 'Интенсивность поглощения'])
```

In [18]:

```
spectrum_t['Интенсивность поглощения'] = 1 - spectrum_t['Интенсивность поглощения']/100
```

In [19]:

```
spectrum_t.head()
```

Out[19]:

	Волновое число, ν , см^{-1}	Интенсивность поглощения
0	499.884	0.965824
1	500.125	0.963184
2	500.366	0.971640
3	500.608	0.980737
4	500.849	0.974000

In [23]:

```
spectrum_t = spectrum_t.set_index('Волновое число,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ ')
```

In []:

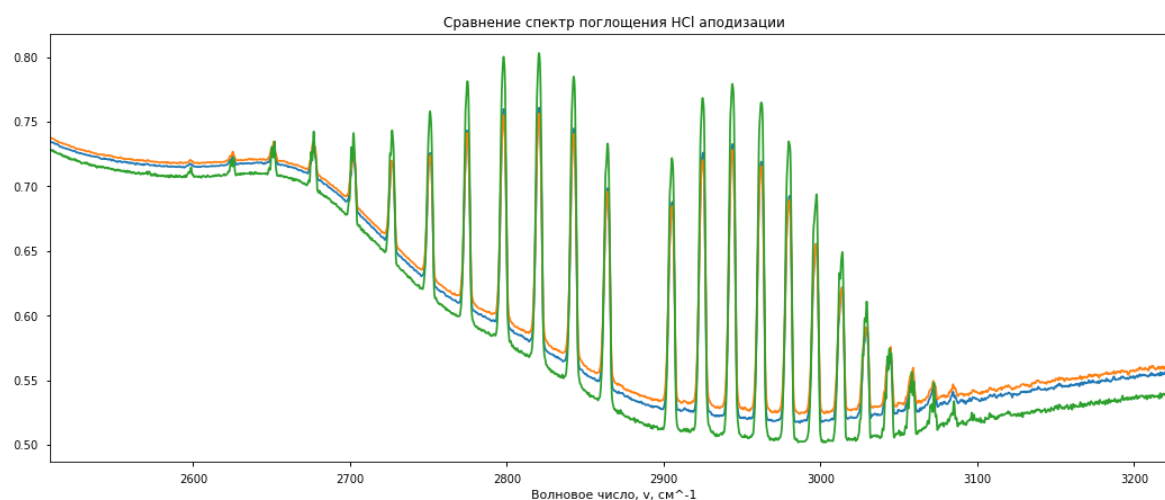
```
df_hcl_t[''][2508.58:3228.63].plot().set_title('Спектр поглощения')
```

In [24]:

```
spectrum_bp['Интенсивность поглощения'][2508.58:3228.63].plot()  
spectrum_t['Интенсивность поглощения'][2508.58:3228.63].plot()  
spectrum['Интенсивность поглощения'][2508.58:3228.63].plot().set_title('Сравнение спектр по
```

Out[24]:

Text(0.5, 1.0, 'Сравнение спектр поглощения HCl аподизации')



In [160]:

```
x = np.array(spectrum['Волновое число,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ '][800:3786])  
y = np.array(spectrum['Интенсивность поглощения'][800:3786])
```

In [175]:

```
peakind = find_peaks_cwt(y, np.arange(1,25))  
peakind
```

Out[175]:

```
array([ 4, 64, 95, 137, 142, 178, 207, 232, 260, 275, 319,  
       370, 424, 439, 482, 542, 589, 696, 801, 904, 1004, 1102,  
       1198, 1292, 1384, 1473, 1644, 1725, 1804, 1879, 1954, 2025, 2093,  
       2158, 2219, 2278, 2336, 2388, 2410, 2436, 2458, 2484, 2532, 2577,  
       2610, 2664, 2686, 2723, 2750, 2775, 2808, 2813, 2834, 2870, 2884,  
       2913, 2946, 2982], dtype=int32)
```

In [176]:

```
x[peakind]
```

Out[176]:

```
array([2510.27, 2524.74, 2532.22, 2542.34, 2543.55, 2552.23, 2559.22,  
       2565.25, 2572. , 2575.62, 2586.23, 2598.53, 2611.55, 2615.17,  
       2625.54, 2640.01, 2651.34, 2677.14, 2702.46, 2727.3 , 2751.41,  
       2775.04, 2798.19, 2820.86, 2843.05, 2864.51, 2905.74, 2925.27,  
       2944.32, 2962.41, 2980.5 , 2997.62, 3014.01, 3029.69, 3044.4 ,  
       3058.63, 3072.61, 3085.15, 3090.46, 3096.73, 3102.03, 3108.3 ,  
       3119.88, 3130.73, 3138.68, 3151.71, 3157.01, 3165.93, 3172.44,  
       3178.47, 3186.43, 3187.64, 3192.7 , 3201.38, 3204.76, 3211.75,  
       3219.71, 3228.39])
```

In [177]:

```
y[peakind]
```

Out[177]:

```
array([0.727405, 0.719987, 0.718465, 0.715297, 0.713944, 0.712972,  
       0.711796, 0.710812, 0.71099 , 0.709728, 0.707573, 0.714652,  
       0.707452, 0.708654, 0.720904, 0.710334, 0.725979, 0.737024,  
       0.737768, 0.73784 , 0.754155, 0.780981, 0.797659, 0.800069,  
       0.781357, 0.730906, 0.718173, 0.764893, 0.775348, 0.764461,  
       0.731162, 0.693723, 0.649158, 0.607975, 0.564812, 0.543695,  
       0.545921, 0.533734, 0.518766, 0.5234 , 0.520554, 0.521439,  
       0.525028, 0.524671, 0.527477, 0.528133, 0.530249, 0.532459,  
       0.533741, 0.533909, 0.534072, 0.535632, 0.538005, 0.538298,  
       0.537709, 0.53829 , 0.539257, 0.53882 ])
```

Результаты

In [29]:

```
p_names = names=['Волновое число, v, левая ветвь P, см^-1', 'j'', 'j''', 'Волновое число, v',  
p_data = pd.read_excel('Vse_Narabotki.xlsx', sheet_name='Sheet1', header=None, names=sp_names
```

In [30]:

```
sp_data.head(13)
```

Out[30]:

	Волновое число, ν , левая ветвь P, см^{-1}	j'	j''	Волновое число, ν , правая ветвь R, см^{-1}	j'	j''
0	2864.51	0	1.0	2905.74	1.0	0
1	2843.05	1	2.0	2925.27	2.0	1
2	2820.86	2	3.0	2944.32	3.0	2
3	2798.19	3	4.0	2962.41	4.0	3
4	2775.04	4	5.0	2980.5	5.0	4
5	2751.41	5	6.0	2997.62	6.0	5
6	2727.3	6	7.0	3014.01	7.0	6
7	2702.46	7	8.0	3029.69	8.0	7
8	2677.14	8	9.0	3044.4	9.0	8
9	2651.34	9	10.0	3058.63	10.0	9
10	2640.01	10	11.0	3072.61	11.0	10
11	2625.54	11	12.0	3085.15	12.0	11
12	2615.17	12	13.0	NaN	NaN	NaN

In [46]:

```
0*10-6, см^-1', 'j'+1/2', 'Растяжение, D1*10-6, см^-1', 'J"+1/2', 'DF'/(j'+1/2)', '(j' + 1/2  
botki.xlsx', sheet_name='Sheet1', header=None,names=sp_names, skiprows=48, usecols=[22,23,25
```

In [47]:

```
sp_data.head(11)
```

Out[47]:

	Растяжение, D0*10-6, см^-1	j'+1/2	Растяжение, D1*10-6, см^-1	J''+1/2	DF'/(j'+1/2)	(j' + 1/2)^2	DF''/(j''+1/2)	(j''+ 1/2)^2
0	60.76	1.5	84.88	1.5	40.506667	2.25	56.586667	2.25
1	101.27	2.5	127.08	2.5	40.508000	6.25	50.832000	6.25
2	141.55	3.5	169.28	3.5	40.442857	12.25	48.365714	12.25
3	182.31	4.5	211.00	4.5	40.513333	20.25	46.888889	20.25
4	222.58	5.5	253.20	5.5	40.469091	30.25	46.036364	30.25
5	262.60	6.5	295.16	6.5	40.400000	42.25	45.409231	42.25
6	302.39	7.5	336.87	7.5	40.318667	56.25	44.916000	56.25
7	341.94	8.5	378.35	8.5	40.228235	72.25	44.511765	72.25
8	381.49	9.5	404.39	9.5	40.156842	90.25	42.567368	90.25
9	421.27	10.5	433.09	10.5	40.120952	110.25	NaN	NaN
10	445.14	11.5	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN

In [43]:

```
sp_data = pd.read_excel('Vse_Narabotki.xlsx', skiprows=86, usecols=[14,15,17,18])
```

Оценка частоты w

In [45]:

```
sp_data.head(13)
```

Out[45]:

	v_P, cm ⁻¹	J'+1	v_R, cm ⁻¹	J''+1
0	2864.51	1.0	2905.74	1.0
1	2843.05	2.0	2925.27	2.0
2	2820.86	3.0	2944.32	3.0
3	2798.19	4.0	2962.41	4.0
4	2775.04	5.0	2980.50	5.0
5	2751.41	6.0	2997.62	6.0
6	2727.30	7.0	3014.01	7.0
7	2702.46	8.0	3029.69	8.0
8	2677.14	9.0	3044.40	9.0
9	2651.34	10.0	3058.63	10.0
10	2640.01	11.0	3072.61	11.0
11	2625.54	12.0	3085.15	12.0
12	2615.17	13.0	NaN	NaN

In [76]:

```
sp_names = ['v_P, cm-1', 'v_R, cm-1', 'DF'_2', 'w(1-2x)', '']  
sp_data = pd.read_excel('Vse_Narabotki.xlsx', header=None, names=sp_names, skiprows=48, usecols=5)
```


In [77]:

```
sp_data.head(13)
```

Out[77]:

	v_P, cm ⁻¹	v_R, cm ⁻¹	DF'_2	w(1-2x)	
0	2864.51	2905.74	0.006076	415.200000	0.002
1	2843.05	2925.27	0.010127	425.400000	0.004
2	2820.86	2944.32	0.014155	2031.000000	0.002
3	2798.19	2962.41	0.018231	1246.200000	0.006
4	2775.04	2980.5	0.022258	3651.600000	0.002
5	2751.41	2997.62	0.026260	2052.000000	0.008
6	2727.3	3014.01	0.030239	5247.800000	0.002
7	2702.46	3029.69	0.034194	2838.800000	0.010
8	2677.14	3044.4	0.038149	2829.800000	0.012
9	2651.34	3058.63	0.042127	2825.400000	0.014
10	2640.01	3072.61	0.044514	2502.800000	0.016
11	2625.54	3085.15	NaN	2369.636364	NaN
12	2615.17	NaN	NaN	NaN	NaN

mean w(1-2x)

In [82]:

```
print(2369.636364, ', cm-1', sep='')
```

2369.636364, cm-1

In []: