**任务描述：**

1. 根据给定分子数据，使用高斯进行 **红外光谱和拉曼光谱** 的 DFT计算。考虑到个人PC的计算资源配置，可以选择在密度泛函为B3LYP和基组def2-SVP或者def2-TZVP，设置自洽场收敛标准为tightSCF。构建 配对的分子/光谱配对数据。
2. 根据配对的数据集，训练一个从红外和拉曼光谱**预测分子官能团**的模型**。**
3. 评估模型性能。

**提供资源：**

1. 光谱预测分子官能团的Transformer 架构的**Baseline模型**。
2. 分子数据集以及官能团性质。

**要求：**

1. **跑通整个仿真计算流程和baseline模型**
2. **加分项：在baseline模型上做改进提供性能。**

**Ps 本任务因考虑到大家的计算资源比较稀缺，因此选择的数据量较小，因此对模型性能不做要求。**

**Files Structure：**

**|**

**Core\_source\_code**

**|**

**Models: Transformer baseline model**

**|**

**Utils: Relative tools for models.**

**|**

**Mol: 分子数据集**

**|**

**num**

**|**

**1\_mol.txt: SMILES 表达式**

**1\_mol\_fg.csv : 官能团数据**

**|**

**作业.docx： 作业指南**