1. KeyValue Library中运行命令加了个回车：创建的文件夹会带有一个空格，被linux认定非法文件名，其他与路径相关的参数加了空格也会造成相应问题

2. 投过渡态失败，命令行提示KeyError：在Display Style-Lattice中设置Original，确认所有原子都在slab上面，把超出范围的原子拖回来，删除标的distance，然后重新标。这个问题是，MS中，某些显示的原子是没有坐标的，而是显示“Image Of …”，Image of后面跟的就是有坐标的原子，它用的是有坐标原子的映像