

Electronic Supplementary Information

A DFT study of the axial coordination of metomidate to iron-porphyrin

*Jun Su,^a Ruiqun Chen,^a Kaijun Shen,^a Zhelin Zhang,^a Shuxian Xie^a and Yuan Liu^{*a}*

^a School of Chemical Engineering and Light Industry, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China. E-mail: liuyuancc@gdut.edu.cn (Y. Liu).

Computational Details

All quantum chemical calculations were carried out with ORCA 6.1.1, and subsequent wavefunction analyses were performed using the development version of Multiwfn 26.2.2.

Geometry optimization

Geometry optimization are performed to confirm stable conformation. Iron-porphyrins, metomidate and metomidate iron-porphyrin complex are all optimized using the methods below.

Keywords: **! PBE0 D4 def2-SVP GCP(DFT/SVP) def2/J RIJCOSX opt**

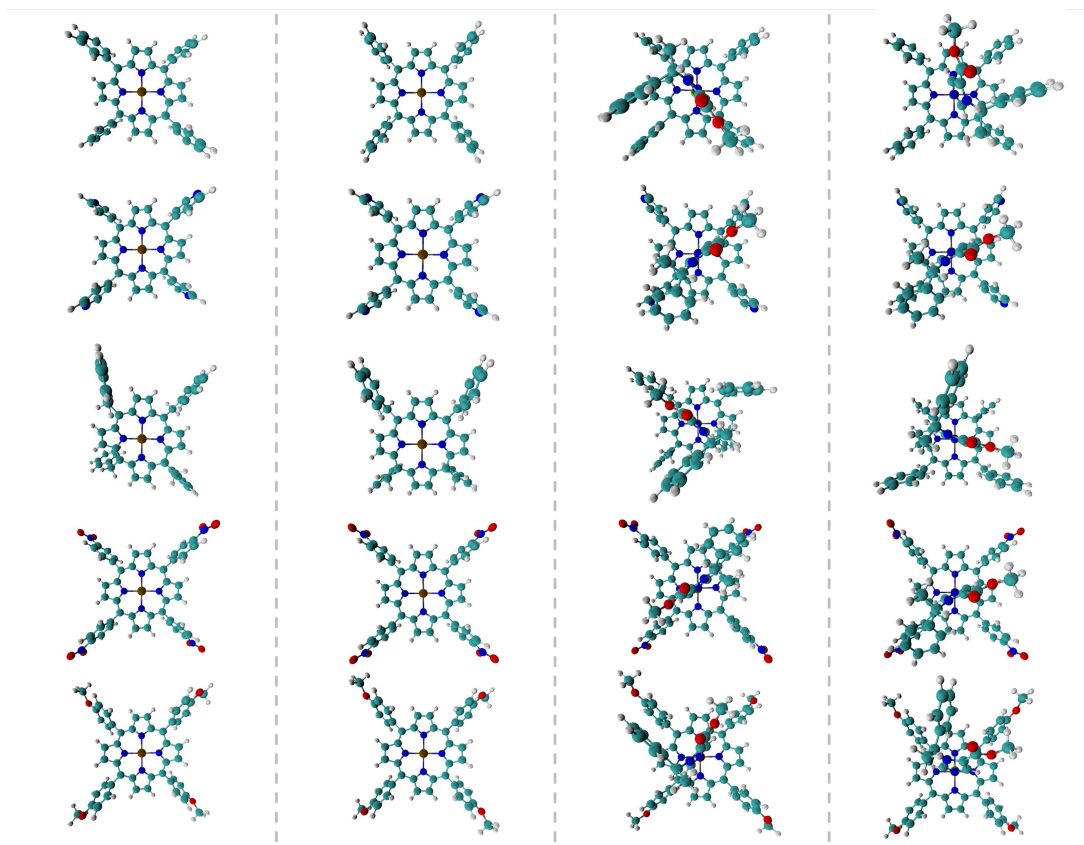


Fig. S1. Top view ball-and-stick diagrams of the optimized geometries for twenty iron-porphyrin complexes. The four columns represent, from left to right: the low-spin iron-porphyrin, high-spin iron-porphyrin, low-spin metomidate iron-porphyrin complex, and high-spin metomidate iron-porphyrin complex. The five rows show, from top to bottom: FeTPPCl, FeTPyPCl, FeTBnPCl, FeT(p-NO₂Ph)PCl, and FeT(p-OMePh)PCl.

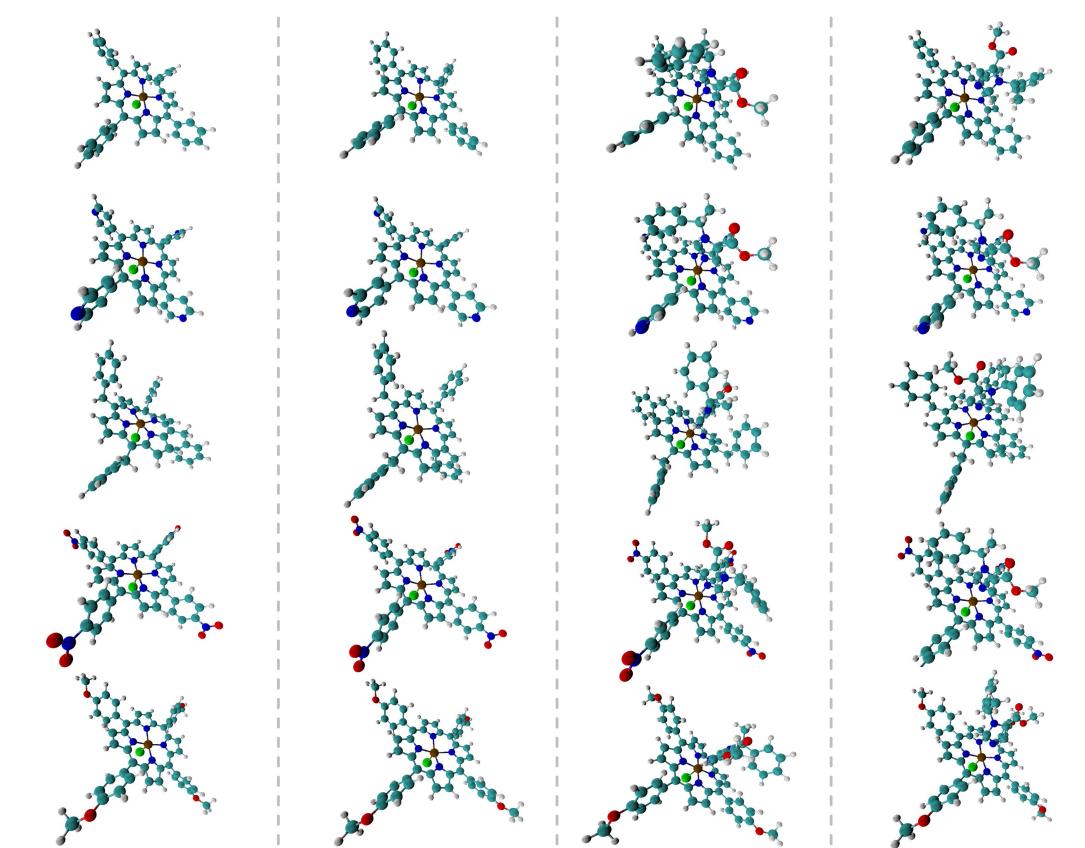


Fig. S2. Perspective view ball-and-stick diagrams of the optimized geometries for twenty iron-porphyrin complexes. The four columns represent, from left to right: the low-spin iron-porphyrin, high-spin iron-porphyrin, low-spin metomidate iron-porphyrin complex, and high-spin metomidate iron-porphyrin complex. The five rows show, from top to bottom: FeTPPCl, FeTPyPCl, FeTBnPCl, FeT(p-NO₂Ph)PCl, and FeT(p-OMePh)PCl.

Single-point calculation

Following geometry optimization, single-point energy calculations were performed to refine the electronic structure results.

Keywords: **! wB97M-V def2-TZVP GCP(DFT/TZ) def2/J RIJCOSX strongSCF noautostart miniprint**

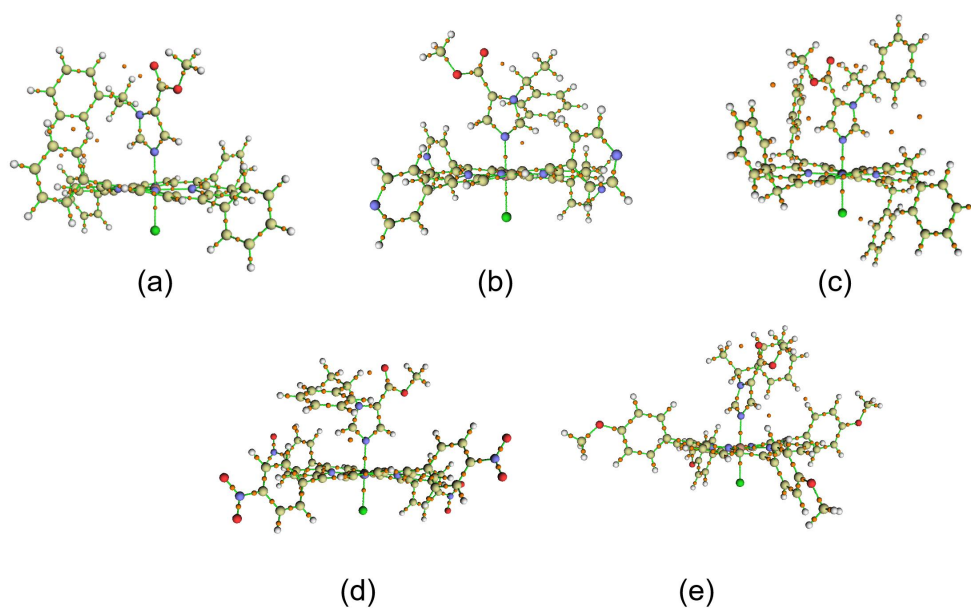


Fig. S3. (3,-1) Bond critical point of metomidate iron-porphyrin complex.

The iron-porphyrins of these complex are (a) FeTPPCl, (b) FeTPyPCl, (c) FeTBnPCl, (d) FeT(p-NO₂Ph)PCl, and (e) FeT(p-OMePh)PCl.

Excited states calculation

To investigate the optical properties, TDA calculations were performed. 40 states are calculated, covered the Soret bands and Q band. The resulting interfragment charge transfer data for the various iron-porphyrin complexes (FeTPPCl, FeTPyPCl, FeTBnPCl, FeT(p-NO₂Ph)PCl, and FeT(p-OMePh)PCl) in the presence and absence of metomidate are presented in Table S1-S5.

**Keywords: ! B3LYP D4 def2-TZVP def2/J RIJCOSX tightSCF
noautostart miniprint CPCM(CH₂Cl₂)**

Table S1 IFCT Details of FeTPPCl

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	B->C	B<-C
1	0.0913	0.1288	0	0.7516	0.0156	0.0072	0.0005	0.0012	0.0037
2	0.171	0.1	0.0004	0.6051	0.0283	0.0785	0.0009	0.013	0.003
3	0.1587	0.1034	0.0004	0.6155	0.0267	0.0784	0.0008	0.0132	0.003
4	0.1067	0.0037	0	0.8801	0.0005	0.0087	0	0	0.0003
5	0.3406	0.0029	0	0.5756	0.0017	0.0783	0.0002	0.0004	0.0003
6	0.3529	0.0029	0.0001	0.5654	0.0018	0.0759	0.0002	0.0004	0.0004
7	0.2065	0.0723	0.002	0.5607	0.0266	0.1033	0.0041	0.0133	0.0111
8	0.8761	0.0029	0.0001	0.0566	0.0444	0.0048	0.014	0.0002	0.0009
9	0.8686	0.0032	0.0001	0.0652	0.0421	0.0058	0.0137	0.0003	0.001
10	0.2328	0.0025	0	0.6409	0.0009	0.122	0.0001	0.0005	0.0002
11	0.8035	0.0019	0	0.1686	0.0091	0.0152	0.0013	0.0002	0.0003
12	0.8304	0.0018	0	0.143	0.0104	0.0128	0.0012	0.0002	0.0002
13	0.8488	0.0045	0	0.0908	0.0424	0.0059	0.0066	0.0003	0.0007
14	0.8422	0.0047	0.0001	0.0983	0.0403	0.0065	0.0067	0.0003	0.0008
15	0.2769	0.0935	0	0.5756	0.045	0.0037	0.0015	0.0006	0.0031
16	0.0953	0.0204	0.0008	0.7818	0.0025	0.0075	0.0099	0.0002	0.0817
17	0.0956	0.0202	0.0007	0.7855	0.0025	0.0075	0.0095	0.0002	0.0783
18	0.1054	0.0128	0	0.8705	0.0015	0.0083	0.0001	0.0001	0.0012
19	0.325	0.0099	0.0003	0.5773	0.0056	0.0776	0.0011	0.0013	0.0019
20	0.248	0.0132	0.0095	0.545	0.006	0.0733	0.0323	0.0018	0.0709
21	0.2023	0.0148	0.0107	0.5794	0.0052	0.0759	0.0284	0.0019	0.0814
22	0.3267	0.0097	0.0003	0.5766	0.0055	0.0762	0.0014	0.0013	0.0024
23	0.24	0.0136	0.0102	0.5456	0.006	0.0722	0.0338	0.0018	0.0769
24	0.2463	0.0138	0.0077	0.5664	0.006	0.0755	0.025	0.0018	0.0575
25	0.3339	0.0027	0	0.6579	0.0014	0.0034	0.0002	0	0.0004
26	0.4193	0.0143	0.006	0.4024	0.0149	0.0742	0.0338	0.0026	0.0324
27	0.3959	0.0132	0.0072	0.4154	0.0126	0.0773	0.037	0.0025	0.0388
28	0.2661	0.0089	0.0003	0.6024	0.0039	0.1141	0.0008	0.0017	0.0017
29	0.1049	0.0025	0.0002	0.8655	0.0003	0.0083	0.002	0	0.0163
30	0.1064	0.0015	0.0001	0.8706	0.0002	0.0086	0.0014	0	0.0112
31	0.1088	0.0005	0	0.8812	0.0001	0.0091	0	0	0.0003
32	0.1042	0.0465	0.0002	0.8151	0.006	0.0093	0.0021	0.0005	0.0161
33	0.3277	0.0014	0.0011	0.5772	0.0008	0.0788	0.0046	0.0002	0.0081
34	0.3834	0.002	0.0008	0.5286	0.0015	0.0727	0.0045	0.0003	0.0062
35	0.3276	0.0003	0	0.5902	0.0002	0.0815	0	0	0.0001
36	0.3775	0.0026	0.0009	0.5339	0.0018	0.072	0.0046	0.0003	0.0065
37	0.3357	0.0273	0.001	0.5315	0.0172	0.0715	0.0047	0.0037	0.0074
38	0.3392	0.0012	0.0011	0.5672	0.0007	0.0771	0.005	0.0002	0.0083
39	0.3401	0.0079	0.0003	0.5661	0.0047	0.0768	0.0011	0.0011	0.0019
40	0.7135	0.018	0.0003	0.0836	0.1535	0.0126	0.0143	0.0027	0.0017

Table S2 IFCT Details of FeTPPCl-Metomidate

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	redis(D)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	A->D	A<-D	B->C	B<-C	B->D	B<-D	C->D	C<-D
1	0.0139	0.6283	0.0037	0.0007	0.094	0.093	0.0072	0.0071	0.0046	0.0022	0.0483	0.0478	0.0304	0.0151	0.0023	0.0012
2	0.0157	0.6583	0.001	0.0004	0.1019	0.1016	0.0078	0.002	0.005	0.0013	0.0502	0.0129	0.0325	0.0081	0.0006	0.0006
3	0.0118	0.5299	0.0086	0.0019	0.0706	0.0886	0.015	0.0068	0.0107	0.0021	0.1126	0.0404	0.08	0.0124	0.0061	0.0026
4	0.5332	0.0101	0.0006	0.0007	0.3338	0.0161	0.038	0.0079	0.0343	0.0104	0.0011	0.0049	0.001	0.0065	0.0005	0.0007
5	0.0157	0.5441	0.0019	0.0008	0.0899	0.0949	0.0193	0.0016	0.0139	0.0009	0.1165	0.009	0.0842	0.0049	0.0014	0.0011
6	0.8553	0.0013	0.0001	0.0002	0.0831	0.0136	0.0097	0.009	0.0131	0.012	0.0002	0.0009	0.0002	0.0012	0.0001	0.0001
7	0.6542	0.0021	0.0001	0.0002	0.2662	0.0053	0.0304	0.0028	0.0285	0.0057	0.0002	0.0011	0.0002	0.0023	0.0001	0.0003
8	0.6501	0.0054	0.0002	0.0005	0.2554	0.0138	0.017	0.0092	0.0255	0.0126	0.0004	0.0036	0.0005	0.005	0.0004	0.0003
9	0.0153	0.4984	0.0107	0.0018	0.0842	0.0904	0.0185	0.0088	0.013	0.0021	0.1096	0.0485	0.0771	0.0116	0.0075	0.0025
10	0.0412	0.5527	0.0001	0.0001	0.0862	0.2639	0.0005	0.0096	0.0013	0.004	0.0032	0.0201	0.0082	0.0084	0.0003	0
11	0.0393	0.5477	0.0002	0.0002	0.0826	0.2603	0.0005	0.0129	0.0013	0.005	0.0036	0.0271	0.0084	0.0105	0.0004	0.0001
12	0.9568	0.0001	0	0	0.022	0.0049	0.0016	0.0015	0.0065	0.0064	0	0	0	0.0001	0	0
13	0.882	0.0008	0	0.0001	0.0738	0.0093	0.0064	0.0059	0.0113	0.0088	0.0001	0.0005	0.0001	0.0007	0.0001	0.0001
14	0.1055	0.0377	0.0026	0.0022	0.5628	0.0071	0.1372	0.002	0.0965	0.0024	0.0092	0.0108	0.0065	0.0127	0.0018	0.0031
15	0.8011	0.0023	0.0001	0.0002	0.1335	0.0136	0.0059	0.0101	0.0177	0.0112	0.0001	0.0017	0.0003	0.0019	0.0002	0.0001
16	0.583	0.0036	0.0001	0.0003	0.3392	0.0061	0.0183	0.0036	0.0339	0.0056	0.0002	0.0021	0.0004	0.0033	0.0002	0.0002
17	0.0224	0.4504	0.0141	0.0025	0.0932	0.1084	0.0189	0.0167	0.0133	0.0042	0.0912	0.0695	0.0641	0.0176	0.0099	0.0036
18	0.0735	0.4954	0.0001	0.0001	0.1516	0.2401	0.0009	0.0048	0.0026	0.003	0.0031	0.0099	0.0085	0.0063	0.0002	0
19	0.1116	0.0036	0.0002	0.0006	0.6171	0.0006	0.1526	0.0001	0.1063	0.0006	0.0009	0.0007	0.0006	0.0034	0.0001	0.0008
20	0.413	0.0526	0.0059	0.0005	0.1859	0.1168	0.0239	0.1015	0.0222	0.009	0.0068	0.0457	0.0063	0.0041	0.0054	0.0005
21	0.4399	0.0467	0.0047	0.0006	0.1852	0.1108	0.0219	0.0946	0.0214	0.0128	0.0055	0.0398	0.0054	0.0054	0.0046	0.0006
22	0.2806	0.0909	0.0108	0.001	0.2381	0.1071	0.0383	0.0792	0.033	0.0087	0.0146	0.0672	0.0126	0.0074	0.0093	0.0012
23	0.3199	0.0995	0.0035	0.0009	0.274	0.1162	0.0519	0.0214	0.0438	0.0064	0.0189	0.0183	0.0159	0.0055	0.0029	0.001
24	0.242	0.0903	0.006	0.0006	0.1981	0.1103	0.0095	0.1522	0.024	0.0065	0.0043	0.1246	0.0109	0.0053	0.0151	0.0003
25	0.2724	0.0893	0.0022	0.0013	0.3021	0.0805	0.0084	0.0712	0.0483	0.0074	0.0025	0.079	0.0143	0.0082	0.0126	0.0002
26	0.5293	0.0054	0.0004	0.0026	0.3107	0.0092	0.0341	0.0055	0.0367	0.0371	0.0006	0.0032	0.0006	0.0218	0.0004	0.0024
27	0.616	0.0152	0.0014	0.0008	0.1822	0.0515	0.0208	0.0427	0.0261	0.0187	0.0017	0.0126	0.0022	0.0055	0.0018	0.0006
28	0.1118	0.2846	0.0025	0.0015	0.2416	0.1317	0.0497	0.0055	0.0382	0.0043	0.0586	0.012	0.045	0.0093	0.0019	0.0019
29	0.8923	0.0004	0.0001	0.0005	0.0209	0.0166	0.0035	0.0134	0.0382	0.0121	0.0001	0.0003	0.0007	0.0003	0.0006	0
30	0.0775	0.0004	0	0.0137	0.0162	0.0019	0.0006	0.0014	0.8503	0.0012	0	0.0003	0.0206	0.0003	0.0155	0
31	0.1565	0.0022	0	0.0154	0.0559	0.0061	0.0008	0.0031	0.7124	0.0034	0	0.0011	0.0278	0.0012	0.0141	0
32	0.6565	0.0071	0.0002	0.0017	0.0371	0.1263	0.003	0.0527	0.0751	0.0153	0.0006	0.003	0.0144	0.0009	0.006	0.0001
33	0.7433	0.005	0.0002	0.0018	0.055	0.0669	0.0051	0.0268	0.0621	0.0218	0.0005	0.002	0.0056	0.0016	0.0022	0.0001
34	0.6026	0.0178	0.001	0.0004	0.0619	0.1733	0.0073	0.0859	0.0113	0.0204	0.0021	0.0088	0.0032	0.0021	0.0016	0.0002
35	0.8024	0.0038	0.0003	0.0004	0.058	0.0524	0.0065	0.0327	0.0144	0.023	0.0004	0.0024	0.0009	0.0017	0.0006	0.0002
36	0.5613	0.022	0.0017	0.0003	0.0648	0.1907	0.0096	0.0994	0.0126	0.0144	0.0033	0.0115	0.0043	0.0017	0.0022	0.0002
37	0.0757	0.3924	0.003	0.0005	0.1342	0.2212	0.0058	0.0382	0.0059	0.0063	0.0171	0.0678	0.0174	0.0111	0.003	0.0005
38	0.1148	0.0059	0.0005	0.0007	0.6428	0.0011	0.1228	0.0005	0.1002	0.0008	0.0011	0.0025	0.0009	0.0043	0.0004	0.0008
39	0.3117	0.0093	0	0.001	0.502	0.0058	0.0036	0.0043	0.1451	0.0022	0.0001	0.0069	0.0027	0.0035	0.002	0
40	0.4702	0.0369	0.0035	0.0006	0.1575	0.1101	0.0147	0.1123	0.0259	0.011	0.0034	0.0376	0.0061	0.0037	0.0062	0.0003

Table S3 IFCT Details of FeTPyPCl

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	B->C	B<-C
1	0.0088	0.0922	0.1212	0	0.7592	0.0147	0.0075	0.0004	0.0012
2	0.0934	0.1804	0.092	0.0004	0.6028	0.0275	0.0807	0.0009	0.0123
3	0.0938	0.1705	0.0945	0.0004	0.6111	0.0264	0.0809	0.0008	0.0125
4	0.0088	0.1064	0.0034	0	0.8806	0.0004	0.0088	0	0
5	0.0789	0.3588	0.0027	0	0.5573	0.0018	0.0784	0.0002	0.0004
6	0.0775	0.3646	0.0027	0	0.5529	0.0018	0.0771	0.0002	0.0004
7	0.0061	0.8682	0.0032	0.0001	0.0646	0.0426	0.0057	0.0142	0.0003
8	0.0071	0.8619	0.0034	0.0001	0.0721	0.0405	0.0067	0.0139	0.0003
9	0.1212	0.2004	0.069	0.002	0.5704	0.0242	0.1063	0.0038	0.0129
10	0.1249	0.2227	0.0025	0	0.6488	0.0009	0.1243	0.0001	0.0005
11	0.0171	0.7892	0.0021	0	0.181	0.009	0.0169	0.0013	0.0002
12	0.015	0.8122	0.0019	0	0.16	0.0095	0.0148	0.0012	0.0002
13	0.0063	0.8542	0.0041	0	0.0904	0.0383	0.006	0.0061	0.0003
14	0.0068	0.8483	0.0042	0	0.0961	0.0375	0.0064	0.0064	0.0003
15	0.0055	0.2789	0.0872	0	0.5826	0.0417	0.0048	0.0013	0.0007
16	0.0088	0.0931	0.0198	0.001	0.766	0.0024	0.0076	0.0119	0.0002
17	0.0088	0.0939	0.0198	0.0009	0.773	0.0024	0.0077	0.0111	0.0002
18	0.0088	0.1052	0.0132	0	0.8693	0.0016	0.0086	0.0002	0.0001
19	0.0807	0.3304	0.0102	0.0003	0.5696	0.0059	0.079	0.0012	0.0014
20	0.0863	0.2433	0.0132	0.0115	0.529	0.0061	0.073	0.0385	0.0018
21	0.0895	0.2032	0.0149	0.0127	0.5574	0.0054	0.0747	0.0346	0.002
22	0.08	0.3301	0.0099	0.0003	0.5702	0.0058	0.0782	0.0015	0.0014
23	0.0857	0.242	0.0131	0.0122	0.5234	0.0061	0.0718	0.041	0.0018
24	0.0875	0.2408	0.0146	0.0093	0.5533	0.0064	0.0762	0.0295	0.002
25	0.0033	0.3338	0.0027	0	0.6582	0.0014	0.0033	0.0002	0
26	0.0831	0.4155	0.0159	0.007	0.3916	0.0168	0.0731	0.0397	0.003
27	0.0888	0.3828	0.0146	0.0087	0.4113	0.0136	0.0773	0.0429	0.0027
28	0.1177	0.2613	0.0093	0.0004	0.6047	0.004	0.1155	0.0009	0.0018
29	0.0095	0.1001	0.0501	0.0002	0.8141	0.0062	0.0087	0.0022	0.0005
30	0.0166	0.7131	0.0182	0.0003	0.0909	0.1423	0.0136	0.0168	0.0027
31	0.0293	0.6507	0.0271	0.0004	0.182	0.0969	0.0251	0.011	0.0037
32	0.0559	0.4606	0.0506	0.0006	0.3571	0.0652	0.0484	0.0059	0.0069
33	0.0661	0.3997	0.0435	0.001	0.4368	0.0398	0.0593	0.0067	0.0059
34	0.0103	0.8814	0.0017	0.0002	0.0711	0.0208	0.0099	0.0136	0.0002
35	0.0149	0.7961	0.0031	0.0006	0.1245	0.0197	0.0139	0.036	0.0003
36	0.0134	0.775	0.0038	0.0009	0.1181	0.025	0.0121	0.0561	0.0004
37	0.0286	0.6691	0.0127	0.0014	0.2011	0.0422	0.0256	0.0356	0.0016
38	0.0226	0.5962	0.0177	0.0013	0.2697	0.0391	0.0201	0.0376	0.0013
39	0.009	0.1177	0.006	0.0002	0.8462	0.0008	0.0088	0.0025	0.0001
40	0.0107	0.2315	0.0116	0.0002	0.7264	0.0037	0.0103	0.0039	0.0002

Table S4 IFCT Details of FeTPyPCl-Metomidate

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	redis(D)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	A->D	A<-D	B->C	B<-C	B->D	B<-D	C->D	C<-D
1	0.0138	0.626	0.0039	0.0008	0.093	0.0929	0.0073	0.0073	0.0045	0.0024	0.0493	0.0493	0.0301	0.0159	0.0024	0.0012
2	0.0153	0.6596	0.001	0.0004	0.0983	0.1025	0.0076	0.002	0.0049	0.0013	0.0512	0.013	0.033	0.0086	0.0006	0.0007
3	0.0118	0.5295	0.0087	0.002	0.0704	0.0884	0.0148	0.0069	0.0106	0.0022	0.1113	0.0416	0.0799	0.0129	0.0063	0.0027
4	0.563	0.009	0.0006	0.0007	0.3053	0.0166	0.0363	0.0097	0.032	0.0118	0.0011	0.0053	0.0009	0.0064	0.0006	0.0008
5	0.015	0.5485	0.002	0.0008	0.0865	0.0953	0.0185	0.0016	0.0132	0.0009	0.1174	0.0092	0.0835	0.0052	0.0014	0.0011
6	0.8192	0.0017	0.0001	0.0002	0.1152	0.0122	0.0142	0.0079	0.0157	0.0102	0.0002	0.0011	0.0002	0.0014	0.0002	0.0002
7	0.7243	0.0021	0.0002	0.0002	0.2042	0.0074	0.0242	0.0045	0.0222	0.0067	0.0002	0.0013	0.0002	0.0019	0.0001	0.0002
8	0.5051	0.0513	0.0003	0.0005	0.2702	0.0959	0.013	0.0116	0.0212	0.0114	0.0025	0.0062	0.004	0.0061	0.0005	0.0003
9	0.0443	0.5267	0.0002	0.0002	0.0906	0.2577	0.0005	0.0158	0.0014	0.0062	0.0031	0.0322	0.008	0.0126	0.0005	0.0001
10	0.0964	0.4309	0.0001	0.0002	0.1547	0.2686	0.0013	0.0072	0.0031	0.0051	0.0038	0.0116	0.0085	0.0082	0.0002	0.0001
11	0.0152	0.4956	0.0112	0.0019	0.0841	0.0895	0.0187	0.0091	0.013	0.0022	0.1101	0.0505	0.0765	0.012	0.0078	0.0027
12	0.9439	0.0002	0	0	0.0327	0.0055	0.0024	0.0023	0.0068	0.0059	0	0.0001	0	0.0002	0	0
13	0.8658	0.0009	0.0001	0.0001	0.0891	0.009	0.0078	0.0057	0.012	0.0078	0.0001	0.0006	0.0001	0.0008	0.0001	0.0001
14	0.7769	0.0027	0.0001	0.0002	0.1555	0.0137	0.0078	0.0099	0.0181	0.0103	0.0001	0.002	0.0003	0.0021	0.0002	0.0001
15	0.1116	0.0379	0.003	0.0022	0.5571	0.0076	0.1361	0.0025	0.0928	0.0027	0.0093	0.0123	0.0063	0.0133	0.0021	0.0033
16	0.5628	0.004	0.0001	0.0003	0.3559	0.0064	0.0202	0.0037	0.0349	0.0051	0.0002	0.0024	0.0004	0.0032	0.0002	0.0002
17	0.0222	0.4496	0.0148	0.0024	0.0895	0.1117	0.0178	0.0184	0.0123	0.0044	0.0896	0.0741	0.0618	0.0177	0.0102	0.0035
18	0.0635	0.5181	0	0.0001	0.1311	0.2508	0.0006	0.0049	0.0017	0.0031	0.0024	0.0101	0.0069	0.0065	0.0001	0
19	0.1136	0.0027	0.0002	0.0004	0.6189	0.0005	0.154	0.0002	0.1034	0.0005	0.0007	0.0009	0.0005	0.0027	0.0002	0.0007
20	0.4462	0.0453	0.0042	0.0008	0.1453	0.139	0.0177	0.1069	0.0168	0.0205	0.0055	0.0348	0.0052	0.0067	0.004	0.0008
21	0.4828	0.0455	0.003	0.0003	0.1355	0.1622	0.0168	0.0873	0.0156	0.0097	0.0056	0.0245	0.0053	0.0027	0.0028	0.0003
22	0.3745	0.0532	0.0062	0.0006	0.1292	0.1541	0.0147	0.1577	0.015	0.0158	0.0061	0.0544	0.0062	0.0054	0.0063	0.0006
23	0.1484	0.0862	0.0151	0.0003	0.0761	0.1681	0.0075	0.299	0.0068	0.0057	0.0085	0.1534	0.0078	0.0029	0.0138	0.0003
24	0.1143	0.2043	0.0033	0.0013	0.3704	0.0631	0.0767	0.005	0.0566	0.0027	0.0423	0.0161	0.0312	0.0086	0.0025	0.0018
25	0.5003	0.0072	0.0007	0.0042	0.2819	0.0128	0.0331	0.0101	0.0314	0.0676	0.0009	0.0057	0.0008	0.0381	0.0006	0.0045
26	0.313	0.0563	0.0001	0.0009	0.5117	0.0344	0.0037	0.0079	0.0315	0.0086	0.0004	0.013	0.0035	0.0141	0.0008	0.0001
27	0.595	0.0174	0.0013	0.001	0.1956	0.0529	0.0187	0.0423	0.0238	0.0239	0.0017	0.0139	0.0021	0.0079	0.0017	0.0008
28	0.5749	0.0259	0.0017	0.0008	0.0953	0.1561	0.0166	0.0584	0.0188	0.0253	0.0045	0.0097	0.0051	0.0042	0.0019	0.0007
29	0.4084	0.0753	0.0029	0.0009	0.1848	0.1663	0.035	0.0344	0.029	0.0124	0.0142	0.0155	0.0118	0.0056	0.0024	0.0011
30	0.91	0.0004	0	0.0002	0.0146	0.0243	0.0022	0.02	0.0106	0.0165	0.0001	0.0003	0.0003	0.0003	0.0002	0
31	0.7335	0.0075	0.0003	0.0009	0.0644	0.0859	0.007	0.033	0.0164	0.0407	0.0008	0.0029	0.0019	0.0036	0.0007	0.0004
32	0.6002	0.0144	0.001	0.0004	0.046	0.188	0.0065	0.0948	0.0091	0.0238	0.002	0.0073	0.0029	0.0018	0.0014	0.0003
33	0.4055	0.0639	0.0046	0.0011	0.1446	0.1792	0.0255	0.0739	0.0236	0.0182	0.0113	0.0264	0.0104	0.0065	0.0043	0.0011
34	0.7386	0.0071	0.0005	0.0006	0.0671	0.0786	0.0098	0.0408	0.0156	0.0308	0.001	0.0037	0.0017	0.0028	0.0009	0.0004
35	0.1048	0.2628	0.0031	0.0041	0.133	0.2072	0.0072	0.0444	0.0073	0.059	0.0143	0.0563	0.0144	0.0749	0.0031	0.0041
36	0.1436	0.0478	0.0017	0.0219	0.0964	0.0712	0.0091	0.0262	0.0101	0.3131	0.0045	0.0176	0.005	0.2101	0.0018	0.0199
37	0.4074	0.0471	0.0045	0.0006	0.1082	0.1774	0.0122	0.1504	0.0144	0.0161	0.0053	0.04	0.0063	0.0043	0.0053	0.0005
38	0.1101	0.003	0.0002	0.0005	0.6549	0.0005	0.1263	0.0002	0.0975	0.0006	0.0006	0.0011	0.0005	0.0033	0.0002	0.0006
39	0.3334	0.0042	0	0.0018	0.5239	0.0027	0.0032	0.0029	0.1068	0.0057	0	0.0045	0.0009	0.009	0.0009	0.0001
40	0.0567	0.0015	0	0.0138	0.062	0.0014	0.001	0.001	0.8252	0.0009	0	0.0011	0.0197	0.001	0.0147	0

Table S5 IFCT Details of FeTBnPCl

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	B->C	B<-C
1	0.0906	0.1419	0	0.7372	0.0174	0.0069	0.0005	0.0013	0.0041
2	0.1617	0.1129	0.0004	0.6034	0.0303	0.0731	0.0009	0.0137	0.0035
3	0.1588	0.1141	0.0004	0.6058	0.0299	0.073	0.0009	0.0137	0.0034
4	0.1103	0.0032	0	0.8774	0.0004	0.0083	0	0	0.0003
5	0.3659	0.0027	0	0.5575	0.0018	0.0712	0.0002	0.0003	0.0003
6	0.3636	0.0028	0	0.5594	0.0018	0.0714	0.0002	0.0004	0.0003
7	0.285	0.0653	0.002	0.4905	0.0379	0.0902	0.0063	0.012	0.0108
8	0.8616	0.0036	0.0001	0.0654	0.0469	0.0059	0.0151	0.0003	0.0011
9	0.7906	0.0074	0.0003	0.1196	0.0486	0.0162	0.0142	0.001	0.0021
10	0.2506	0.0025	0.0001	0.6251	0.001	0.1198	0.0001	0.0005	0.0003
11	0.8053	0.0022	0	0.1655	0.0108	0.0143	0.0013	0.0002	0.0003
12	0.8114	0.0021	0	0.1604	0.0105	0.0139	0.0013	0.0002	0.0002
13	0.8258	0.0059	0.0001	0.1088	0.0445	0.0066	0.007	0.0004	0.0009
14	0.811	0.0067	0.0001	0.1223	0.0446	0.0065	0.0073	0.0004	0.0011
15	0.2948	0.0967	0	0.5471	0.0521	0.0037	0.0018	0.0006	0.0033
16	0.1062	0.0159	0.0003	0.8334	0.002	0.0081	0.0038	0.0002	0.0301
17	0.0986	0.02	0.0007	0.7879	0.0025	0.0076	0.0092	0.0002	0.0733
18	0.1015	0.0161	0.0005	0.8148	0.002	0.0077	0.0063	0.0002	0.051
19	0.3276	0.0091	0.0007	0.5749	0.0052	0.0724	0.0032	0.0012	0.0057
20	0.3187	0.0096	0.0014	0.5749	0.0053	0.0719	0.0061	0.0012	0.0109
21	0.2447	0.013	0.0079	0.5662	0.0056	0.0708	0.0272	0.0016	0.0629
22	0.2665	0.0124	0.0077	0.5463	0.0061	0.069	0.0296	0.0016	0.0607
23	0.2512	0.0135	0.0086	0.5502	0.0062	0.0692	0.0311	0.0017	0.0682
24	0.3227	0.0129	0.0062	0.5053	0.0082	0.0699	0.0285	0.0018	0.0446
25	0.1145	0.0006	0	0.874	0.0001	0.0096	0.0001	0	0.0011
26	0.4223	0.0113	0.0022	0.4632	0.0103	0.0491	0.0193	0.0012	0.0211
27	0.3724	0.0134	0.0055	0.4599	0.0109	0.0733	0.028	0.0021	0.0345
28	0.1138	0.0014	0	0.875	0.0002	0.009	0.0001	0	0.0006
29	0.3672	0.0064	0.0006	0.5718	0.0041	0.0276	0.0086	0.0003	0.0133
30	0.3269	0.0007	0.0001	0.5946	0.0004	0.0766	0.0002	0.0001	0.0004
31	0.3413	0.001	0.0001	0.5802	0.0006	0.0753	0.0005	0.0001	0.0008
32	0.3289	0.0031	0.0003	0.5847	0.0018	0.0767	0.0015	0.0004	0.0026
33	0.1757	0.0025	0.0002	0.7776	0.0006	0.0385	0.0009	0.0001	0.004
34	0.2356	0.0046	0.0003	0.681	0.0016	0.0724	0.001	0.0005	0.0029
35	0.3063	0.0052	0.0011	0.5876	0.0027	0.0854	0.0038	0.0008	0.0073
36	0.1216	0.0023	0.0001	0.8573	0.0003	0.0117	0.0008	0	0.0058
37	0.3143	0.0013	0.0009	0.5966	0.0007	0.0752	0.0038	0.0002	0.0071
38	0.3314	0.0022	0.001	0.5775	0.0013	0.0744	0.0043	0.0003	0.0075
39	0.3703	0.0077	0.0007	0.538	0.0053	0.0679	0.0037	0.001	0.0054
40	0.3767	0.0088	0.0007	0.5292	0.0063	0.0681	0.0038	0.0011	0.0053

Table S6 IFCT Details of FeTBnPCl-Metomidate

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	redis(D)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	A->D	A<-D	B->C	B<-C	B->D	B<-D	C->D	C<-D
1	0.0219	0.6272	0.0009	0.0003	0.1282	0.1073	0.009	0.0022	0.0064	0.0011	0.0439	0.013	0.0312	0.0063	0.0006	0.0004
2	0.0167	0.6182	0.003	0.0008	0.1022	0.1012	0.0071	0.0072	0.0051	0.0025	0.0428	0.0439	0.0311	0.0151	0.0022	0.001
3	0.0132	0.5258	0.0077	0.0019	0.0783	0.0888	0.0161	0.0063	0.0121	0.0021	0.1084	0.0374	0.0812	0.0124	0.0058	0.0026
4	0.5976	0.0136	0.0004	0.0005	0.2711	0.03	0.0286	0.009	0.0256	0.0109	0.0014	0.0041	0.0013	0.0049	0.0004	0.0005
5	0.0222	0.5088	0.0021	0.0007	0.1208	0.0937	0.0255	0.0018	0.019	0.0008	0.1076	0.01	0.0799	0.0045	0.0016	0.0009
6	0.8858	0.0014	0.0001	0.0001	0.0452	0.0283	0.0046	0.0126	0.008	0.012	0.0001	0.0006	0.0003	0.0006	0.0001	0.0001
7	0.627	0.0019	0.0001	0.0002	0.2983	0.004	0.0313	0.0015	0.0291	0.0035	0.0002	0.0007	0.0002	0.0017	0.0001	0.0002
8	0.5994	0.0092	0.0003	0.0005	0.2938	0.0188	0.019	0.0082	0.0283	0.011	0.0006	0.004	0.0009	0.0054	0.0004	0.0003
9	0.0173	0.4925	0.0096	0.0018	0.0941	0.0906	0.0203	0.0082	0.0148	0.002	0.1064	0.0443	0.0776	0.0111	0.007	0.0024
10	0.9431	0.0003	0	0	0.0328	0.0081	0.0021	0.002	0.006	0.0051	0	0.0001	0.0001	0.0002	0	0
11	0.0563	0.5296	0	0.0001	0.1107	0.2695	0.0004	0.0044	0.0014	0.0033	0.002	0.0086	0.0069	0.0065	0.0001	0
12	0.047	0.5155	0.0002	0.0002	0.0929	0.2606	0.0007	0.0171	0.0013	0.0064	0.0037	0.0338	0.0073	0.0127	0.0005	0.0001
13	0.9054	0.0008	0	0.0001	0.0499	0.0151	0.0042	0.0072	0.0079	0.0082	0.0001	0.0004	0.0001	0.0005	0.0001	0
14	0.4785	0.0223	0.0009	0.0008	0.3216	0.0332	0.0587	0.0073	0.0502	0.0074	0.0041	0.0049	0.0035	0.005	0.0008	0.0009
15	0.3709	0.0322	0.0013	0.0011	0.3829	0.0311	0.0794	0.0059	0.0622	0.0063	0.0067	0.0061	0.0052	0.0065	0.001	0.0014
16	0.5436	0.0053	0.0001	0.0003	0.373	0.0077	0.0191	0.0033	0.0375	0.0041	0.0003	0.0022	0.0005	0.0028	0.0002	0.0001
17	0.025	0.4435	0.0126	0.0026	0.1068	0.1039	0.0221	0.0142	0.0159	0.0041	0.092	0.0608	0.0661	0.0176	0.0091	0.0036
18	0.1081	0.4208	0	0.0002	0.203	0.2242	0.0008	0.0056	0.0046	0.0037	0.0016	0.0105	0.0096	0.007	0.0002	0
19	0.1663	0.0204	0.0012	0.0006	0.5577	0.0061	0.1331	0.0015	0.0937	0.001	0.0049	0.005	0.0034	0.0034	0.0008	0.0008
20	0.494	0.0502	0.0021	0.0003	0.129	0.1922	0.0206	0.0508	0.0188	0.0088	0.008	0.0133	0.0073	0.0023	0.0019	0.0004
21	0.4281	0.0622	0.004	0.0005	0.1878	0.1418	0.0265	0.0641	0.0241	0.0082	0.0088	0.0281	0.008	0.0036	0.0036	0.0005
22	0.1741	0.1126	0.0105	0.0013	0.3812	0.0514	0.07	0.0262	0.0554	0.0041	0.0207	0.0573	0.0164	0.009	0.0083	0.0016
23	0.4448	0.05	0.0038	0.0004	0.1333	0.1668	0.0156	0.1073	0.0164	0.0102	0.0059	0.0321	0.0061	0.0031	0.0039	0.0004
24	0.3529	0.0383	0.0086	0.0009	0.2052	0.0658	0.0195	0.1554	0.0215	0.015	0.0036	0.0903	0.004	0.0087	0.0095	0.0008
25	0.7945	0.0041	0.0004	0.0003	0.0716	0.0452	0.0088	0.0395	0.0137	0.015	0.0005	0.0036	0.0008	0.0014	0.0007	0.0002
26	0.4891	0.0235	0.0045	0.0005	0.1763	0.0651	0.017	0.1292	0.0199	0.0131	0.0023	0.0466	0.0026	0.0047	0.0053	0.0005
27	0.6394	0.0174	0.0011	0.0005	0.1314	0.0847	0.0128	0.0566	0.0198	0.0151	0.0017	0.0116	0.0026	0.0031	0.0018	0.0003
28	0.0777	0.0077	0	0.0128	0.1032	0.0058	0.0008	0.0012	0.7216	0.0014	0.0001	0.0015	0.0538	0.0018	0.0108	0
29	0.0385	0.0006	0	0.0113	0.0145	0.0015	0.0009	0.0007	0.88	0.0005	0	0.0003	0.0342	0.0002	0.0168	0
30	0.7026	0.012	0.0004	0.0005	0.0673	0.1252	0.008	0.0335	0.025	0.0138	0.0014	0.0032	0.0044	0.0013	0.0012	0.0002
31	0.5407	0.0395	0.0013	0.0004	0.1143	0.1867	0.019	0.0374	0.0234	0.0104	0.0066	0.0079	0.0081	0.0022	0.0016	0.0004
32	0.3398	0.1039	0.0028	0.001	0.2172	0.1626	0.0402	0.0239	0.038	0.0086	0.0192	0.0153	0.0182	0.0055	0.0027	0.001
33	0.6491	0.0168	0.0007	0.0005	0.0946	0.115	0.0076	0.0608	0.0238	0.0126	0.0013	0.0089	0.0042	0.0018	0.0022	0.0001
34	0.2986	0.0804	0.0001	0.0023	0.3812	0.063	0.0036	0.0086	0.1097	0.0063	0.0008	0.0109	0.0231	0.0081	0.0031	0.0001
35	0.8038	0.0038	0.0003	0.0004	0.0758	0.04	0.0078	0.0267	0.0136	0.0216	0.0004	0.0025	0.0007	0.002	0.0004	0.0002
36	0.4446	0.0557	0.0038	0.0005	0.1456	0.1701	0.0224	0.0759	0.0219	0.01	0.0086	0.0249	0.0084	0.0033	0.0037	0.0005
37	0.6184	0.0085	0.001	0.0002	0.2541	0.0208	0.0264	0.0245	0.026	0.005	0.0009	0.01	0.0009	0.0021	0.001	0.0002
38	0.6368	0.0231	0.0006	0.0002	0.172	0.0854	0.0182	0.0223	0.019	0.0082	0.0024	0.006	0.0025	0.0022	0.0007	0.0002
39	0.4237	0.048	0.0061	0.0005	0.2079	0.0978	0.031	0.0831	0.0301	0.0072	0.0071	0.0408	0.0069	0.0035	0.0059	0.0005
40	0.2876	0.0343	0.0041	0.0006	0.4411	0.0224	0.0795	0.0149	0.0697	0.0026	0.0062	0.0229	0.0054	0.0041	0.0036	0.0007

Table S7 IFCT Details of FeT(p-NO₂Ph)PCl

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	B->C	B<-C
1	0.0926	0.119	0	0.7617	0.0145	0.0074	0.0004	0.0012	0.0034
2	0.1848	0.0895	0.0004	0.6007	0.0275	0.0813	0.0009	0.0121	0.0029
3	0.1743	0.0921	0.0004	0.6096	0.0263	0.0814	0.0008	0.0123	0.0029
4	0.1065	0.0036	0	0.8805	0.0004	0.0086	0	0	0.0003
5	0.3553	0.0028	0.0001	0.5596	0.0018	0.0793	0.0002	0.0004	0.0004
6	0.3781	0.0027	0	0.5402	0.0019	0.0762	0.0002	0.0004	0.0003
7	0.8684	0.0031	0.0001	0.0647	0.0417	0.0058	0.0148	0.0003	0.0011
8	0.8623	0.0033	0.0001	0.0735	0.0387	0.0069	0.0137	0.0003	0.0012
9	0.2029	0.0674	0.002	0.5702	0.024	0.1063	0.0038	0.0126	0.0108
10	0.2252	0.0026	0	0.6466	0.0009	0.1239	0.0001	0.0005	0.0002
11	0.7813	0.0021	0	0.1879	0.0088	0.0179	0.0014	0.0002	0.0003
12	0.8093	0.0019	0	0.1622	0.0095	0.0153	0.0013	0.0002	0.0003
13	0.8541	0.004	0.0001	0.0893	0.0384	0.0061	0.0071	0.0003	0.0007
14	0.8574	0.0039	0	0.0866	0.0386	0.0059	0.0067	0.0003	0.0007
15	0.9542	0	0	0.0005	0.0262	0.0001	0.019	0	0
16	0.9527	0	0	0.0016	0.0265	0.0002	0.019	0	0
17	0.9473	0.0002	0	0.0091	0.0239	0.0011	0.0181	0	0.0002
18	0.9514	0.0002	0	0.0066	0.0236	0.0007	0.0175	0	0.0001
19	0.2816	0.085	0	0.5824	0.0411	0.0051	0.0013	0.0007	0.0027
20	0.0954	0.0196	0.001	0.7615	0.0025	0.0074	0.0125	0.0002	0.0999
21	0.0955	0.0196	0.0009	0.7686	0.0024	0.0074	0.0116	0.0002	0.0937
22	0.1055	0.0132	0	0.8697	0.0016	0.0084	0.0002	0.0001	0.0013
23	0.7875	0.0077	0.0001	0.1321	0.0458	0.0181	0.0065	0.0011	0.0011
24	0.8744	0.0033	0.0001	0.0502	0.0572	0.0065	0.0075	0.0004	0.0004
25	0.9016	0.0003	0	0.0028	0.0862	0.0003	0.0086	0	0
26	0.8935	0.0009	0	0.0091	0.0852	0.0015	0.0096	0.0001	0.0001
27	0.9926	0	0	0.0021	0.0042	0.0003	0.0007	0	0
28	0.9825	0	0	0.0099	0.0041	0.0015	0.0019	0	0
29	0.2748	0.0124	0.0106	0.5063	0.0067	0.071	0.041	0.0017	0.0756
30	0.5076	0.0115	0.0005	0.4004	0.0145	0.0566	0.0041	0.0016	0.0032
31	0.4111	0.0084	0.0064	0.4145	0.0083	0.0556	0.0472	0.0011	0.0476
32	0.9806	0.0001	0	0.0096	0.0075	0.0013	0.0009	0	0
33	0.7359	0.0018	0.0012	0.1861	0.0071	0.0253	0.0338	0.0002	0.0085
34	0.9595	0.0003	0	0.0219	0.0136	0.0029	0.0017	0	0
35	0.989	0	0	0.0052	0.004	0.0011	0.0006	0	0
36	0.8134	0.0044	0.0001	0.131	0.0273	0.0178	0.0046	0.0006	0.0007
37	0.9535	0.0004	0	0.0246	0.0156	0.0032	0.0025	0.0001	0.0001
38	0.2478	0.0128	0.0123	0.516	0.0061	0.0714	0.0427	0.0018	0.089
39	0.5357	0.0049	0.0001	0.3953	0.0066	0.0551	0.001	0.0007	0.0007
40	0.2458	0.0144	0.0095	0.5469	0.0065	0.076	0.0307	0.002	0.0683

Table S8 IFCT Details of FeT(p-NO₂Ph)PCl-Metomidate

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	redis(D)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	A->D	A<-D	B->C	B<-C	B->D	B<-D	C->D	C<-D
1	0.014	0.6227	0.004	0.0008	0.0935	0.0933	0.0074	0.0075	0.0046	0.0024	0.0492	0.0501	0.0308	0.0159	0.0025	0.0013
2	0.015	0.6624	0.001	0.0004	0.0983	0.1009	0.0076	0.002	0.0046	0.0015	0.0513	0.0129	0.0312	0.0095	0.0006	0.0007
3	0.0116	0.5279	0.0091	0.0019	0.069	0.0889	0.0147	0.0072	0.0104	0.0021	0.1124	0.0429	0.0798	0.0128	0.0065	0.0027
4	0.5855	0.0079	0.0006	0.0006	0.2887	0.0161	0.0352	0.0098	0.0296	0.0122	0.001	0.0048	0.0008	0.006	0.0005	0.0007
5	0.0183	0.5303	0.002	0.0009	0.0934	0.104	0.0203	0.0018	0.0142	0.0011	0.1154	0.009	0.0807	0.0058	0.0014	0.0013
6	0.8235	0.003	0.0001	0.0002	0.0972	0.0255	0.0132	0.0093	0.0137	0.0109	0.0004	0.0011	0.0004	0.0013	0.0002	0.0002
7	0.7202	0.0019	0.0001	0.0002	0.2098	0.0065	0.0257	0.0038	0.0223	0.0059	0.0002	0.0011	0.0002	0.0017	0.0001	0.0002
8	0.6375	0.0103	0.0003	0.0005	0.2498	0.0264	0.0173	0.0099	0.0245	0.0123	0.0007	0.0039	0.001	0.0048	0.0004	0.0003
9	0.039	0.5414	0.0002	0.0002	0.0822	0.257	0.0005	0.0158	0.0012	0.0057	0.0032	0.0333	0.0079	0.012	0.0005	0.0001
10	0.0463	0.5446	0.0001	0.0001	0.0941	0.268	0.0005	0.0069	0.0013	0.0043	0.003	0.014	0.0078	0.0087	0.0002	0
11	0.0153	0.4949	0.0114	0.0019	0.0833	0.091	0.0184	0.0095	0.0128	0.0022	0.1093	0.0514	0.0759	0.0122	0.0079	0.0027
12	0.9445	0.0002	0	0	0.0319	0.0062	0.0023	0.0025	0.0059	0.0061	0	0.0001	0	0.0002	0	0
13	0.9048	0.0007	0	0.0001	0.0517	0.0116	0.0049	0.0079	0.0075	0.0095	0.0001	0.0005	0.0001	0.0005	0.0001	0.0001
14	0.8416	0.0019	0.0001	0.0001	0.0983	0.0163	0.0049	0.0121	0.0097	0.0117	0.0001	0.0014	0.0002	0.0014	0.0001	0.0001
15	0.9512	0	0	0	0.0006	0.0184	0.0001	0.0142	0.0008	0.0145	0	0	0	0	0	0
16	0.7296	0.0026	0.0001	0.0002	0.2066	0.0091	0.0137	0.006	0.0194	0.0079	0.0002	0.0017	0.0002	0.0022	0.0002	0.0001
17	0.9443	0.0001	0	0	0.006	0.0184	0.0006	0.0141	0.0016	0.0146	0	0.0001	0	0.0001	0	0
18	0.9507	0	0	0	0.0012	0.0187	0.0001	0.0145	0.0005	0.0142	0	0	0	0	0	0
19	0.9413	0.0002	0	0	0.01	0.0174	0.0005	0.0136	0.0012	0.0154	0	0.0001	0	0.0002	0	0
20	0.9464	0.0001	0	0	0.004	0.0186	0.0004	0.0144	0.0014	0.0143	0	0.0001	0	0.0001	0	0
21	0.9224	0.0004	0.0001	0.0001	0.0194	0.0193	0.004	0.0144	0.0045	0.0144	0.0001	0.0003	0.0001	0.0003	0.0001	0.0001
22	0.703	0.0047	0.0005	0.0004	0.1784	0.0185	0.0374	0.0099	0.0287	0.0106	0.001	0.0025	0.0008	0.0027	0.0004	0.0006
23	0.3309	0.0207	0.002	0.0014	0.4167	0.0165	0.1015	0.0064	0.0685	0.0069	0.0051	0.008	0.0034	0.0087	0.0013	0.0021
24	0.8267	0.0013	0	0.0001	0.1282	0.0087	0.0071	0.0055	0.0122	0.0078	0.0001	0.0009	0.0001	0.0012	0.0001	0.0001
25	0.9886	0	0	0	0.0004	0.0047	0.0001	0.0011	0.0007	0.0045	0	0	0	0	0	0
26	0.9883	0	0	0	0.0009	0.0045	0.0001	0.0011	0.0006	0.0044	0	0	0	0	0	0
27	0.0241	0.4434	0.0146	0.0024	0.0914	0.1167	0.0182	0.0192	0.0124	0.0046	0.0885	0.073	0.0603	0.0175	0.0099	0.0035
28	0.9855	0	0	0	0.0026	0.0046	0.0004	0.0012	0.0011	0.0046	0	0	0	0	0	0
29	0.9716	0.0001	0	0	0.0087	0.0106	0.0004	0.0016	0.0019	0.005	0	0	0	0	0	0
30	0.8355	0.0063	0	0	0.065	0.0807	0.0005	0.0033	0.0019	0.0059	0	0.0003	0.0002	0.0005	0	0
31	0.1466	0.3552	0	0.0001	0.1829	0.2847	0.0009	0.0054	0.0024	0.0039	0.0017	0.0067	0.0047	0.0049	0.0001	0
32	0.9153	0.0013	0	0	0.0347	0.0354	0.0009	0.0027	0.003	0.0061	0	0.0001	0.0001	0.0002	0	0
33	0.9003	0.0006	0	0.0001	0.0711	0.0072	0.0035	0.0028	0.0076	0.0061	0	0.0002	0.0001	0.0005	0	0
34	0.928	0.0008	0	0	0.0316	0.0226	0.0015	0.0036	0.0041	0.0072	0	0.0001	0.0001	0.0002	0	0
35	0.4606	0.0461	0.0028	0.0005	0.0954	0.2224	0.0143	0.0901	0.0131	0.0166	0.0069	0.0187	0.0063	0.0034	0.0026	0.0005
36	0.5082	0.0436	0.0023	0.0004	0.1322	0.1677	0.0172	0.0677	0.015	0.0119	0.0057	0.0176	0.005	0.0031	0.002	0.0004
37	0.1597	0.0141	0.0012	0.0006	0.5674	0.004	0.1413	0.0013	0.0938	0.001	0.0035	0.0048	0.0023	0.0034	0.0008	0.0008
38	0.3577	0.0449	0.0089	0.0007	0.1632	0.0985	0.0185	0.1713	0.0161	0.0164	0.0051	0.0781	0.0044	0.0075	0.0077	0.0008
39	0.1452	0.0827	0.0173	0.0003	0.082	0.1465	0.0083	0.3006	0.0073	0.0057	0.0084	0.1697	0.0073	0.0032	0.0151	0.0003
40	0.1203	0.2085	0.0036	0.0015	0.3531	0.071	0.0734	0.0058	0.0532	0.0033	0.0433	0.0171	0.0314	0.0098	0.0026	0.002

Table S9 IFCT Details of FeT(p-OMePh)PCl

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	B->C	B<-C
1	0.0915	0.1311	0	0.7487	0.016	0.0072	0.0005	0.0013	0.0038
2	0.1707	0.1016	0.0004	0.6041	0.0287	0.0774	0.0009	0.013	0.0031
3	0.1534	0.1065	0.0004	0.6192	0.0264	0.077	0.0008	0.0132	0.0031
4	0.1086	0.0051	0	0.8752	0.0006	0.0099	0.0001	0.0001	0.0005
5	0.3381	0.0032	0.0001	0.5781	0.0019	0.0776	0.0002	0.0004	0.0004
6	0.3579	0.0033	0.0001	0.5617	0.0021	0.0737	0.0003	0.0004	0.0004
7	0.2094	0.0708	0.002	0.5618	0.0264	0.1018	0.0041	0.0128	0.011
8	0.8798	0.0028	0.0001	0.0535	0.0453	0.0044	0.0131	0.0002	0.0008
9	0.8667	0.0033	0.0001	0.0675	0.0422	0.0061	0.0128	0.0003	0.001
10	0.2382	0.0028	0	0.6362	0.0011	0.1208	0.0001	0.0005	0.0003
11	0.8075	0.0019	0	0.1647	0.0095	0.0147	0.0012	0.0002	0.0003
12	0.8489	0.0019	0	0.123	0.0131	0.0109	0.0017	0.0002	0.0002
13	0.8327	0.0053	0.0001	0.1038	0.0425	0.0075	0.0069	0.0004	0.0009
14	0.8294	0.0055	0.0001	0.1073	0.0421	0.0078	0.0065	0.0004	0.0008
15	0.1081	0.0004	0	0.8825	0.0001	0.0087	0	0	0.0002
16	0.1078	0.0012	0	0.8816	0.0001	0.0086	0.0001	0	0.0005
17	0.1076	0.001	0	0.8816	0.0001	0.0085	0.0001	0	0.001
18	0.3187	0.0002	0	0.5994	0.0001	0.0814	0	0	0
19	0.3165	0.0007	0	0.6006	0.0004	0.0812	0.0002	0.0001	0.0003
20	0.3179	0.0005	0	0.5992	0.0003	0.0815	0.0002	0.0001	0.0003
21	0.2771	0.0939	0	0.5739	0.0454	0.0042	0.0016	0.0007	0.0033
22	0.3162	0.0002	0	0.6033	0.0001	0.0801	0	0	0
23	0.3088	0.0007	0	0.6094	0.0003	0.0801	0.0002	0.0001	0.0004
24	0.3115	0.0013	0.0001	0.6064	0.0006	0.0794	0.0002	0.0002	0.0004
25	0.1077	0.0077	0	0.8739	0.0009	0.0089	0.0001	0.0001	0.0008
26	0.3254	0.0043	0	0.5872	0.0024	0.0796	0.0002	0.0006	0.0003
27	0.1061	0.0132	0	0.869	0.0016	0.0084	0.0002	0.0001	0.0014
28	0.1657	0.014	0.0021	0.7199	0.0032	0.0279	0.0125	0.0005	0.0542
29	0.102	0.0195	0.001	0.7767	0.0026	0.0099	0.0102	0.0002	0.0779
30	0.2362	0.008	0.0021	0.6613	0.0029	0.0557	0.0087	0.0007	0.0244
31	0.2442	0.0003	0	0.6355	0.0001	0.1196	0	0.0001	0.0001
32	0.2464	0.0009	0.0001	0.6325	0.0003	0.1189	0.0002	0.0002	0.0005
33	0.2529	0.0011	0.0001	0.63	0.0005	0.1142	0.0003	0.0002	0.0007
34	0.3399	0.0094	0.0002	0.5658	0.0056	0.0752	0.001	0.0012	0.0017
35	0.2489	0.0135	0.0097	0.5409	0.0062	0.0719	0.0338	0.0018	0.0734
36	0.2061	0.0145	0.0107	0.5747	0.0052	0.075	0.0295	0.0019	0.0823
37	0.3456	0.0094	0.0003	0.5614	0.0058	0.0722	0.0016	0.0012	0.0025
38	0.2464	0.0134	0.0102	0.5371	0.0061	0.0695	0.0363	0.0017	0.0791
39	0.2602	0.0064	0.0012	0.61	0.0027	0.1084	0.003	0.0011	0.007
40	0.877	0.0003	0.0001	0.0967	0.0031	0.0111	0.0105	0	0.0012

Table S10 IFCT Details of FeT(p-OMePh)PCl-Metomidate

state	redis(A)	redis(B)	redis(C)	redis(D)	A->B	A<-B	A->C	A<-C	A->D	A<-D	B->C	B<-C	B->D	B<-D	C->D	C<-D
1	0.0154	0.624	0.0033	0.0007	0.099	0.0968	0.0075	0.0068	0.0049	0.0022	0.0476	0.0436	0.0307	0.0143	0.0021	0.0011
2	0.0172	0.6452	0.0014	0.0004	0.106	0.1044	0.008	0.003	0.0052	0.0013	0.0484	0.0182	0.0315	0.0083	0.0009	0.0006
3	0.0125	0.5262	0.0084	0.0019	0.0743	0.0888	0.0156	0.0067	0.0114	0.0021	0.1109	0.0399	0.0805	0.0123	0.0061	0.0026
4	0.5281	0.012	0.0005	0.0006	0.3376	0.0188	0.0374	0.0072	0.0327	0.0102	0.0013	0.0046	0.0012	0.0065	0.0004	0.0007
5	0.0191	0.5233	0.002	0.0008	0.1039	0.0965	0.0224	0.0017	0.0164	0.0009	0.113	0.0094	0.0827	0.0051	0.0015	0.0011
6	0.8789	0.0014	0.0001	0.0001	0.0544	0.0228	0.0065	0.0113	0.0098	0.0127	0.0002	0.0007	0.0003	0.0008	0.0001	0.0001
7	0.6162	0.002	0.0001	0.0002	0.3036	0.004	0.0342	0.0016	0.0305	0.0041	0.0002	0.0008	0.0002	0.002	0.0001	0.0002
8	0.6495	0.0059	0.0002	0.0004	0.259	0.0147	0.0172	0.008	0.0237	0.012	0.0004	0.0032	0.0005	0.0048	0.0003	0.0003
9	0.016	0.4929	0.0108	0.0018	0.0885	0.0889	0.0196	0.0088	0.0139	0.002	0.1091	0.0486	0.0776	0.0113	0.0077	0.0025
10	0.0441	0.5583	0	0.0001	0.0915	0.2688	0.0004	0.0052	0.0013	0.003	0.0025	0.0108	0.0076	0.0063	0.0001	0
11	0.0403	0.5322	0.0002	0.0002	0.0831	0.2578	0.0005	0.0178	0.0012	0.0061	0.0033	0.0367	0.0074	0.0126	0.0005	0.0001
12	0.9603	0.0001	0	0	0.0203	0.0054	0.0015	0.0014	0.0054	0.0054	0	0	0	0.0001	0	0
13	0.9013	0.0007	0	0.0001	0.057	0.0107	0.0056	0.0058	0.0094	0.0082	0.0001	0.0004	0.0001	0.0005	0.0001	0.0001
14	0.1084	0.0438	0.0023	0.002	0.5557	0.0085	0.1349	0.0018	0.0963	0.0023	0.0106	0.0095	0.0076	0.0117	0.0016	0.0028
15	0.7957	0.0027	0.0001	0.0002	0.1394	0.0153	0.0063	0.0087	0.0178	0.0097	0.0001	0.0015	0.0003	0.0017	0.0002	0.0001
16	0.5708	0.0037	0.0001	0.0002	0.3546	0.0059	0.0197	0.0029	0.0323	0.0044	0.0002	0.0018	0.0003	0.0027	0.0002	0.0002
17	0.0232	0.4464	0.0141	0.0025	0.097	0.1066	0.02	0.0164	0.014	0.0041	0.0922	0.0685	0.0646	0.017	0.0099	0.0035
18	0.0872	0.4647	0.0001	0.0001	0.1761	0.2301	0.0011	0.0052	0.0033	0.0034	0.0028	0.0104	0.0086	0.0068	0.0002	0
19	0.1163	0.003	0.0003	0.0005	0.6142	0.0006	0.1515	0.0002	0.1064	0.0006	0.0007	0.001	0.0005	0.0031	0.0002	0.0008
20	0.5416	0.0021	0.0008	0.0001	0.3527	0.0032	0.0423	0.0104	0.0357	0.0019	0.0002	0.0068	0.0002	0.0012	0.0007	0.0001
21	0.5414	0.013	0.0005	0.0001	0.3353	0.021	0.0384	0.007	0.0327	0.0018	0.0015	0.0043	0.0013	0.0011	0.0004	0.0001
22	0.529	0.0056	0.001	0.0002	0.351	0.0085	0.0418	0.0125	0.0356	0.0026	0.0007	0.0083	0.0006	0.0017	0.0008	0.0002
23	0.3027	0.1013	0.0044	0.0008	0.2899	0.1058	0.0524	0.0257	0.044	0.0052	0.0183	0.0246	0.0154	0.005	0.0037	0.0009
24	0.486	0.04	0.0034	0.0003	0.2089	0.0932	0.0237	0.0704	0.0218	0.0068	0.0045	0.0303	0.0042	0.0029	0.0032	0.0003
25	0.34	0.0429	0.0053	0.0009	0.3671	0.0398	0.0584	0.0311	0.0501	0.006	0.0068	0.0335	0.0059	0.0065	0.0046	0.001
26	0.5116	0.0328	0.0012	0.0003	0.2814	0.0596	0.0382	0.0159	0.0334	0.0046	0.0045	0.0087	0.0039	0.0025	0.001	0.0003
27	0.4228	0.0452	0.0053	0.0005	0.162	0.1181	0.0174	0.1296	0.0177	0.0115	0.0048	0.0497	0.0049	0.0044	0.0054	0.0005
28	0.2502	0.0843	0.0025	0.0018	0.2862	0.0737	0.0084	0.0727	0.0771	0.0057	0.0025	0.0832	0.0227	0.0065	0.0224	0.0002
29	0.5768	0.0082	0.0006	0.0015	0.2721	0.0173	0.028	0.0124	0.0302	0.0294	0.0008	0.0058	0.0009	0.0139	0.0006	0.0014
30	0.2534	0.0789	0.0054	0.0013	0.1944	0.1029	0.0105	0.1307	0.0557	0.006	0.0043	0.1002	0.0226	0.0046	0.0287	0.0002
31	0.7186	0.0075	0.0006	0.0006	0.1322	0.0405	0.0139	0.03	0.0298	0.0142	0.0008	0.0055	0.0017	0.0026	0.0012	0.0003
32	0.7929	0.0071	0.0001	0.0002	0.0747	0.0751	0.0139	0.0081	0.0157	0.0077	0.0013	0.0008	0.0015	0.0007	0.0002	0.0001
33	0.1922	0.0861	0.0013	0.0047	0.2004	0.0826	0.0408	0.006	0.242	0.0037	0.0175	0.0063	0.104	0.0039	0.0076	0.0008
34	0.4746	0.0019	0.0002	0.0042	0.049	0.0182	0.0071	0.0103	0.4035	0.005	0.0003	0.0011	0.0155	0.0005	0.0087	0.0001
35	0.4422	0.0304	0.0003	0.0026	0.1526	0.0882	0.0298	0.0047	0.1926	0.006	0.0059	0.0016	0.0384	0.0021	0.002	0.0004
36	0.2278	0.0058	0.0001	0.0123	0.1289	0.0103	0.0044	0.0031	0.5645	0.0049	0.0002	0.0017	0.0256	0.0028	0.0076	0.0001
37	0.6782	0.0025	0.0001	0.0037	0.085	0.02	0.007	0.0077	0.1708	0.0149	0.0002	0.001	0.005	0.0019	0.0019	0.0002
38	0.9177	0.0005	0	0.0001	0.0287	0.0164	0.0033	0.011	0.0174	0.0038	0.0001	0.0003	0.0003	0.0001	0.0002	0
39	0.83	0.0028	0.0001	0.0001	0.0235	0.1005	0.0024	0.0217	0.0105	0.0058	0.0003	0.0006	0.0013	0.0002	0.0003	0
40	0.9238	0.0003	0	0.0001	0.0394	0.0081	0.005	0.0085	0.0082	0.0057	0	0.0004	0.0001	0.0002	0.0001	0