

Electronic Supplementary Information

Table S1. A summary of the optical energy gap ($E_g(\text{optical})$) electrochemical energy gap ($E_g(\text{electrochemical})$) for the major compounds shown in the main manuscript.

Compound No.	$E_g(\text{optical})$ /eV	E_g (electrochemical) / eV	Reference
2	1.45	-	21
7	1.55	-	21
13	1.61	1.63	20, 23
17	1.46	1.58	24
26	1.46	-	27
30	1.83	-	28
31	1.48	-	28
42	1.57	-	29
49	1.52	1.26	30
51b	1.57	1.58	32
57	1.35	1.38	33
62	1.37	-	34
73	1.32	1.32	35
84a	1.2	-	38
87a	1.80	1.64	41a
87b	1.56	-	41b
111	-	1.56	55
112a	1.82	-	60
120	1.45	-	60
121	1.39	-	60
130	1.35	1.26	65
131a	1.73	1.51	66
131b	1.74	1.49	66
131c	1.62	1.10	66
132	-	1.57	67
135	1.72	1.55	68
137	1.72	1.62	68
148	1.18	1.05	72
153	1.94	1.49	75
163	1.55	-	84
164	1.62	-	86
170	-	2.10	94
180a	1.58	1.54	104
180b	1.02	0.94	104
181(n=2)	2.26	-	106
181(n=3)	1.89	-	106
181(n=4)	1.57	-	106
181(n=5)	1.36	-	106
181(n=6)	1.22	-	106
195d	1.64	1.20	129

196b	1.43	1.04	132
197	1.26	0.98	134
204	1.81	1.54	142
205	1.40	0.99	143
207	1.82	1.46	144
209	1.50	1.13	144
210a	1.98	-	146
210b	1.91	-	146
211a	2.12	1.89	147
211b	2.15	1.93	147
211c	2.13	1.94	147
211d	2.13	1.92	147
211e	2.11	1.85	147
211f	2.10	1.87	147
211g	2.11	1.87	147
211h	2.11	1.87	147
211i	2.08	-	147
212a	2.17	1.96	148a
212b	2.05	1.82	148a
212c	2.29	2.22	148a
212d	2.12	1.92	148a
212e	2.16	1.95	148a
212f	2.14	1.93	148a
212g	2.12	1.93	148a
212h	2.16	2.06	148a
212i	2.16	2.08	148a
212j	2.20	2.17	148a
212k	2.34	-	148b
212l	2.20	-	148b
212m	1.94	-	148b
213	1.79	1.69	149
214a	1.75	-	150
214b	1.61	-	150
214c	1.61	-	150
214d	1.58	-	150