

Supplementary Information

Organic Photovoltaics: Determining the Impact of the 1-Chloronaphthalene Additive in the PM6:Y6 Blend from Multi-Scale Simulations

Ziwen Yu^{1†}, Tongrui Zhang^{1†}, Yizhou Li¹, Gao-Feng Han¹, Xingyou Lang¹,

Jean-Luc Brédas^{2*}, Tonghui Wang^{1*}, Qing Jiang^{1*}

1. Key Laboratory of Automobile Materials, Ministry of Education, and School of Materials Science and Engineering, Jilin University, Changchun 130022, China

2. Department of Chemistry and Biochemistry, The University of Arizona, Tucson, Arizona 85721-0041, United States

* Correspondence to: twang@jlu.edu.cn; jlbredas@arizona.edu; jiangq@jlu.edu.cn

† These authors contribute equally to this work

Table S1. Sizes of the largest Y6 clusters and PM6 clusters (in terms of number of molecules and polymer repeat units, respectively) extracted from the CG-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends, and ratios between the volumes that the clusters span and the overall volumes of the blends.

PM6:Y6:1-CN blends	largest Y6 clusters		largest PM6 clusters	
	Y6 molecules	ratios	PM6 repeat units	ratios
0% v/v	864	54.94%	354	40.21%
0.25% v/v	422	24.50%	258	16.59%
0.5% v/v	97	5.21%	186	9.90%
1% v/v	49	2.20%	85	4.84%

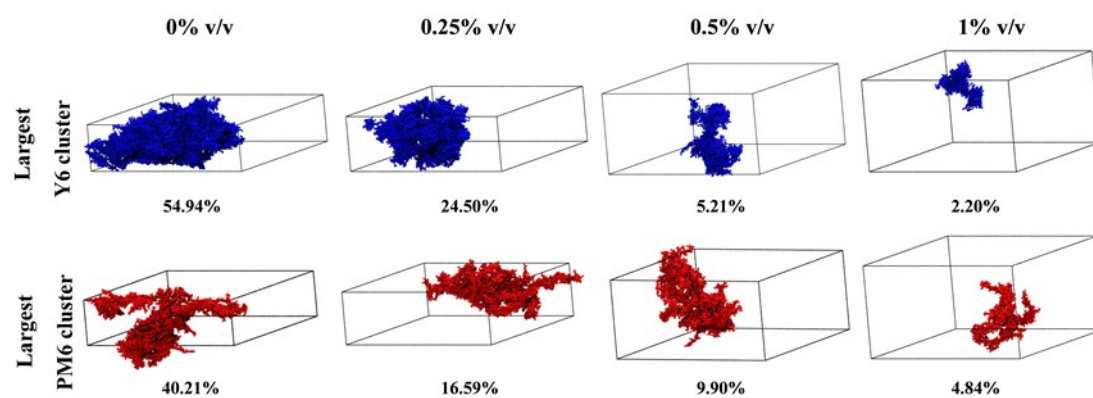


Figure S1. Spatial distributions of the largest Y6 clusters and PM6 clusters extracted from the CG-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends.

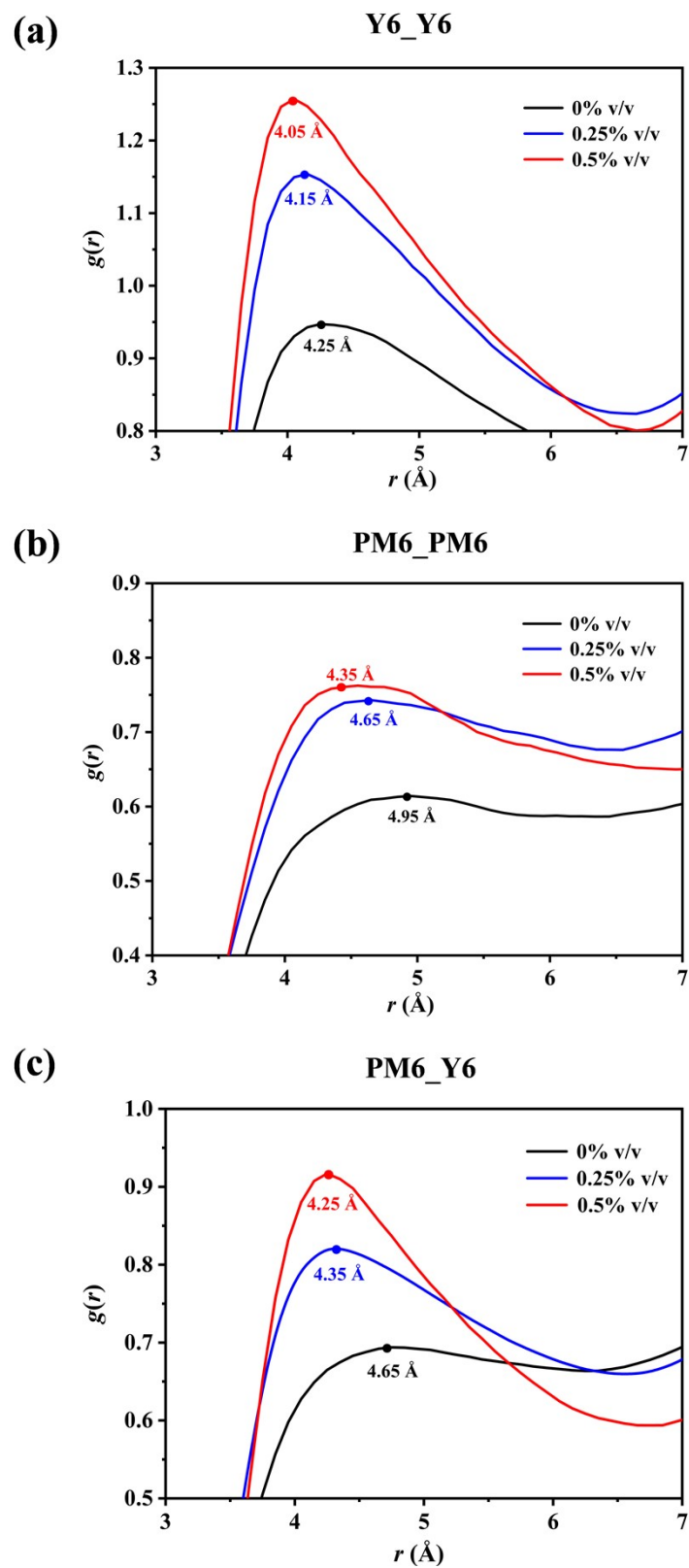


Figure S2. First $g(r)$ peak positions for the radial distribution functions of the: (a) Y6_Y6 backbones, (b) PM6_PM6 backbones, and (c) PM6_Y6 backbones, in the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends.

Table S2. Average interaction energies for the Y6_Y6, PM6_PM6, and PM6_Y6 π - π packing pairs extracted from the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends with different 1-CN concentrations.

PM6:Y6:1-CN blends	Y6_Y6	
	number of π - π pairs	interaction energies (kcal mol ⁻¹)
0% v/v	169	-16.1±6.2
0.25% v/v	155	-20.1±6.8
0.5% v/v	149	-20.3±6.8
PM6:Y6:1-CN blends	PM6_PM6	
	number of π - π pairs	interaction energies (kcal mol ⁻¹)
0% v/v	34	-25.9±7.4
0.25% v/v	33	-27.4±10.8
0.5% v/v	31	-28.3±11.4
PM6:Y6:1-CN blends	PM6_Y6	
	number of π - π pairs	interaction energies (kcal mol ⁻¹)
0% v/v	116	-21.9±8.7
0.25% v/v	135	-25.2±10.1
0.5% v/v	140	-25.9±10.2

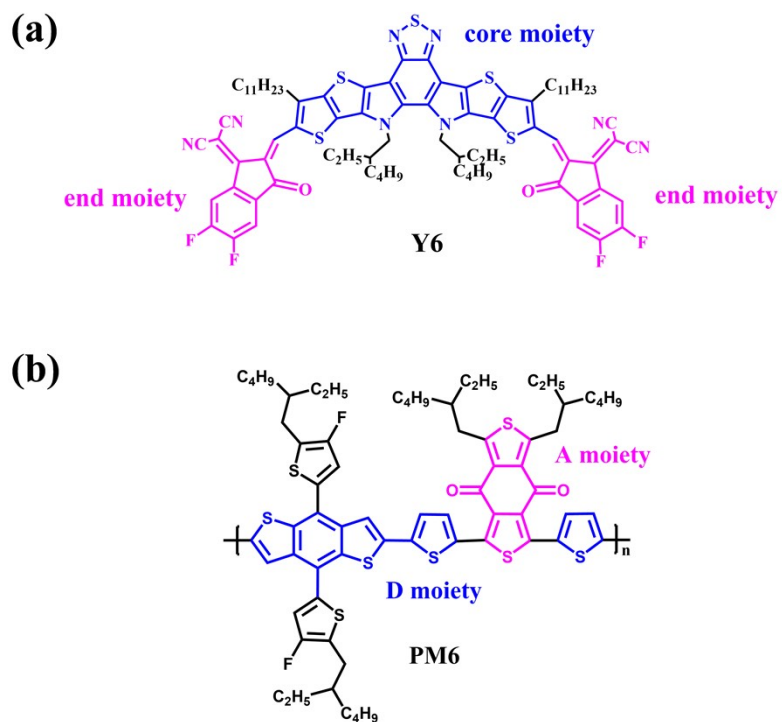


Figure S3. Illustration of: (a) the end and core moieties of Y6 and (b) the D and A moieties of PM6.

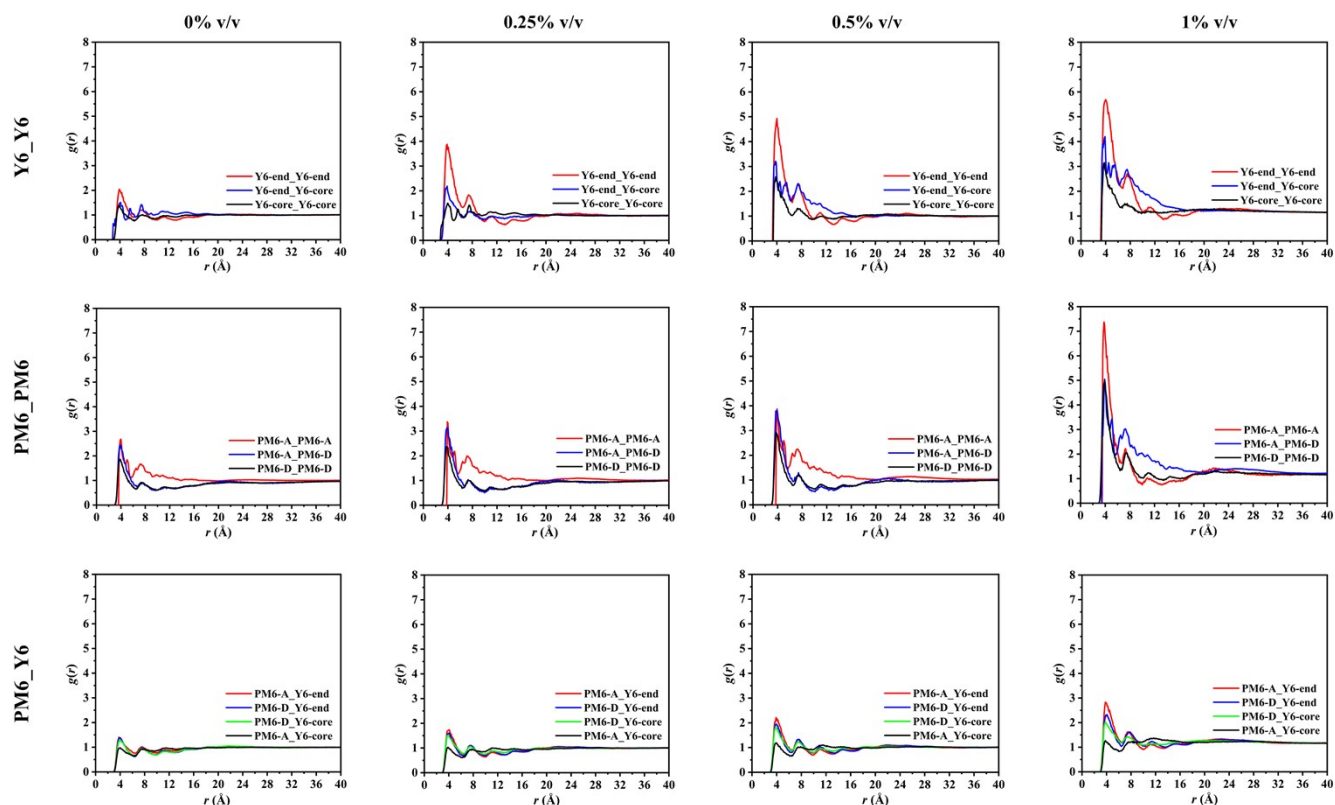


Figure S4. Partial radial distribution functions for the Y6_Y6, PM6_PM6, and PM6_Y6 backbones in the CG-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends.

Table S3. Electron transfer rates, k_e , between Y6 molecules for 169, 155, and 149 Y6_Y6 π - π packing pairs extracted from the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends with a 1-CN concentration of 0%, 0.25%, and 0.5% v/v. Here, “small→large” means electron transfer from a Y6 molecule with a smaller EA to one with a larger EA, and “large→small” means the reverse process.

PM6:Y6:1-CN blend (0% v/v)						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	19.27	-0.055	0.055	0.292	1.77×10^{12}	2.07×10^{11}
2	37.05	-0.050	0.050		6.04×10^{12}	8.60×10^{11}
3	1.38	-0.008	0.008		4.04×10^9	2.94×10^9
4	23.69	-0.072	0.072		3.45×10^{12}	2.12×10^{11}
5	2.44	-0.073	0.073		3.69×10^{10}	2.18×10^9
6	22.97	-0.078	0.078		3.54×10^{12}	1.72×10^{11}
7	0.07	-0.004	0.004		9.29×10^6	8.08×10^6
8	10.83	-0.033	0.033		3.85×10^{11}	1.08×10^{11}
9	0.77	-0.008	0.008		1.26×10^9	9.17×10^8
10	55.98	-0.080	0.080		2.16×10^{13}	9.72×10^{11}
11	9.84	-0.079	0.079		6.57×10^{11}	3.09×10^{10}
12	2.49	-0.113	0.113		6.66×10^{10}	8.03×10^8
13	8.78	-0.002	0.002		1.43×10^{11}	1.35×10^{11}
14	1.87	-0.037	0.037		1.25×10^{10}	2.93×10^9
15	1.85	-0.066	0.066		1.92×10^{10}	1.50×10^9
16	17.90	-0.022	0.022		8.76×10^{11}	3.70×10^{11}
17	0.14	-0.067	0.067		1.19×10^8	8.81×10^6
18	14.06	-0.007	0.007		4.09×10^{11}	3.10×10^{11}
19	18.81	-0.132	0.132		4.67×10^{12}	2.73×10^{10}
20	39.19	-0.028	0.028		4.63×10^{12}	1.58×10^{12}
21	12.67	-0.061	0.061		8.38×10^{11}	7.84×10^{10}
22	27.46	-0.112	0.112		7.95×10^{12}	1.01×10^{11}
23	23.48	-0.053	0.053		2.55×10^{12}	3.21×10^{11}
24	7.41	-0.012	0.012		1.26×10^{11}	7.76×10^{10}
25	4.27	-0.020	0.020		4.77×10^{10}	2.21×10^{10}
26	12.49	-0.094	0.094		1.31×10^{12}	3.36×10^{10}
27	9.16	-0.012	0.012		1.91×10^{11}	1.19×10^{11}
28	36.96	-0.030	0.030		4.28×10^{12}	1.34×10^{12}
29	2.20	-0.012	0.012		1.10×10^{10}	6.83×10^9
30	15.51	-0.015	0.015		5.77×10^{11}	3.22×10^{11}
31	22.08	-0.013	0.013		1.12×10^{12}	6.85×10^{11}

32	12.39	-0.074	0.074		9.69×10^{11}	5.53×10^{10}
33	5.52	-0.010	0.010		6.69×10^{10}	4.49×10^{10}
34	3.65	-0.032	0.032		4.35×10^{10}	1.24×10^{10}
35	3.75	-0.148	0.148		2.19×10^{11}	6.80×10^8
36	3.25	-0.094	0.094		8.78×10^{10}	2.30×10^9
37	0.40	-0.072	0.072		9.83×10^8	5.94×10^7
38	2.47	-0.047	0.047		2.54×10^{10}	4.13×10^9
39	31.68	-0.010	0.010		2.19×10^{12}	1.49×10^{12}
40	11.63	-0.062	0.062		7.13×10^{11}	6.49×10^{10}
41	5.40	-0.049	0.049		1.27×10^{11}	1.86×10^{10}
42	10.38	-0.061	0.061		5.61×10^{11}	5.27×10^{10}
43	8.62	-0.028	0.028		2.26×10^{11}	7.53×10^{10}
44	7.70	-0.018	0.018		1.50×10^{11}	7.47×10^{10}
45	17.49	-0.011	0.011		6.85×10^{11}	4.41×10^{11}
46	12.83	-0.056	0.056		8.01×10^{11}	8.94×10^{10}
47	11.52	-0.034	0.034		4.44×10^{11}	1.20×10^{11}
48	0.33	-0.010	0.010		2.32×10^8	1.58×10^8
49	15.79	-0.059	0.059		1.27×10^{12}	1.26×10^{11}
50	33.07	-0.080	0.080		7.61×10^{12}	3.33×10^{11}
51	3.49	-0.003	0.003		2.33×10^{10}	2.08×10^{10}
52	10.04	-0.028	0.028		3.06×10^{11}	1.03×10^{11}
53	7.84	-0.117	0.117		6.88×10^{11}	7.18×10^9
54	5.54	-0.087	0.087		2.33×10^{11}	8.01×10^9
55	7.65	-0.030	0.030		1.83×10^{11}	5.75×10^{10}
56	4.63	-0.002	0.002		4.05×10^{10}	3.70×10^{10}
57	20.44	-0.045	0.045		1.69×10^{12}	2.96×10^{11}
58	10.36	-0.059	0.059		5.46×10^{11}	5.44×10^{10}
59	1.60	-0.008	0.008		5.33×10^9	3.95×10^9
60	11.49	-0.050	0.050		5.77×10^{11}	8.35×10^{10}
61	3.50	-0.006	0.006		2.47×10^{10}	1.98×10^{10}
62	21.02	-0.080	0.080		3.08×10^{12}	1.34×10^{11}
63	4.68	-0.073	0.073		1.38×10^{11}	7.91×10^9
64	13.35	-0.007	0.007		3.68×10^{11}	2.80×10^{11}
65	21.50	-0.185	0.185		9.76×10^{12}	7.36×10^9
66	0.43	-0.012	0.012		4.24×10^8	2.63×10^8
67	1.10	-0.025	0.025		3.45×10^9	1.31×10^9
68	22.56	-0.039	0.039		1.86×10^{12}	4.11×10^{11}
69	6.02	-0.067	0.067		2.07×10^{11}	1.54×10^{10}
70	20.24	-0.064	0.064		2.26×10^{12}	1.84×10^{11}
71	5.75	-0.051	0.051		1.49×10^{11}	2.00×10^{10}
72	12.29	-0.047	0.047		6.37×10^{11}	1.00×10^{11}
73	12.00	-0.031	0.031		4.61×10^{11}	1.38×10^{11}
74	4.17	-0.038	0.038		6.33×10^{10}	1.42×10^{10}

75	3.97	-0.203	0.203		3.76×10^{11}	1.38×10^8
76	30.68	-0.080	0.080		6.55×10^{12}	2.87×10^{11}
77	0.83	-0.032	0.032		2.22×10^9	6.48×10^8
78	2.87	-0.073	0.073		5.12×10^{10}	3.03×10^9
79	19.45	-0.036	0.036		1.31×10^{12}	3.28×10^{11}
80	6.34	-0.055	0.055		1.92×10^{11}	2.24×10^{10}
81	1.40	-0.102	0.102		1.83×10^{10}	3.45×10^8
82	27.68	-0.011	0.011		1.70×10^{12}	1.12×10^{12}
83	2.87	-0.114	0.114		8.93×10^{10}	1.04×10^9
84	4.04	-0.017	0.017		4.09×10^{10}	2.09×10^{10}
85	19.07	-0.015	0.015		8.80×10^{11}	4.82×10^{11}
86	5.44	-0.049	0.049		1.28×10^{11}	1.91×10^{10}
87	0.12	-0.019	0.019		3.97×10^7	1.88×10^7
88	12.38	-0.056	0.056		7.47×10^{11}	8.29×10^{10}
89	0.99	-0.034	0.034		3.26×10^9	8.75×10^8
90	0.31	-0.100	0.100		8.92×10^8	1.82×10^7
91	10.49	-0.089	0.089		8.61×10^{11}	2.70×10^{10}
92	3.92	-0.124	0.124		1.87×10^{11}	1.47×10^9
93	35.40	-0.029	0.029		3.86×10^{12}	1.26×10^{12}
94	33.61	-0.027	0.027		3.39×10^{12}	1.17×10^{12}
95	0.15	-0.191	0.191		4.90×10^8	2.87×10^5
96	4.97	-0.009	0.009		5.24×10^{10}	3.76×10^{10}
97	19.82	-0.053	0.053		1.82×10^{12}	2.29×10^{11}
98	27.10	-0.131	0.131		9.56×10^{12}	5.90×10^{10}
99	19.92	-0.011	0.011		8.79×10^{11}	5.80×10^{11}
100	19.32	-0.061	0.061		1.96×10^{12}	1.81×10^{11}
101	10.27	-0.047	0.047		4.42×10^{11}	7.09×10^{10}
102	17.17	-0.040	0.040		1.11×10^{12}	2.29×10^{11}
103	61.64	-0.041	0.041		1.44×10^{13}	2.93×10^{12}
104	7.95	-0.020	0.020		1.65×10^{11}	7.67×10^{10}
105	23.39	-0.023	0.023		1.52×10^{12}	6.21×10^{11}
106	5.48	-0.010	0.010		6.54×10^{10}	4.46×10^{10}
107	28.99	-0.048	0.048		3.59×10^{12}	5.48×10^{11}
108	15.11	-0.093	0.093		1.90×10^{12}	5.00×10^{10}
109	26.78	-0.040	0.040		2.65×10^{12}	5.69×10^{11}
110	0.39	-0.083	0.083		1.09×10^9	4.36×10^7
111	29.19	-0.033	0.033		2.80×10^{12}	7.87×10^{11}
112	25.31	-0.125	0.125		7.85×10^{12}	6.00×10^{10}
113	13.77	-0.073	0.073		1.19×10^{12}	6.86×10^{10}
114	27.25	-0.042	0.042		2.84×10^{12}	5.64×10^{11}
115	24.47	-0.002	0.002		1.12×10^{12}	1.04×10^{12}
116	2.06	-0.094	0.094		3.57×10^{10}	9.01×10^8
117	4.63	-0.124	0.124		2.59×10^{11}	2.06×10^9

118	7.97	-0.080	0.080		4.42×10^{11}	1.94×10^{10}
119	30.59	-0.049	0.049		4.04×10^{12}	6.01×10^{11}
120	13.20	-0.137	0.137		2.42×10^{12}	1.17×10^{10}
121	38.66	-0.043	0.043		5.84×10^{12}	1.10×10^{12}
122	31.32	-0.039	0.039		3.61×10^{12}	7.83×10^{11}
123	0.86	-0.080	0.080		5.09×10^9	2.28×10^8
124	6.93	-0.045	0.045		1.93×10^{11}	3.39×10^{10}
125	60.74	-0.045	0.045		1.49×10^{13}	2.60×10^{12}
126	2.61	-0.047	0.047		2.84×10^{10}	4.59×10^9
127	3.41	-0.013	0.013		2.68×10^{10}	1.63×10^{10}
128	1.01	-0.011	0.011		2.30×10^9	1.47×10^9
129	25.12	-0.027	0.027		1.89×10^{12}	6.52×10^{11}
130	14.84	-0.011	0.011		4.92×10^{11}	3.19×10^{11}
131	32.11	-0.075	0.075		6.67×10^{12}	3.56×10^{11}
132	2.33	-0.089	0.089		4.25×10^{10}	1.32×10^9
133	8.75	-0.004	0.004		1.48×10^{11}	1.29×10^{11}
134	47.77	-0.083	0.083		1.65×10^{13}	6.52×10^{11}
135	10.82	-0.034	0.034		3.96×10^{11}	1.04×10^{11}
136	19.49	-0.011	0.011		8.42×10^{11}	5.54×10^{11}
137	27.32	-0.002	0.002		1.40×10^{12}	1.30×10^{12}
138	26.44	-0.071	0.071		4.23×10^{12}	2.70×10^{11}
139	11.58	-0.094	0.094		1.12×10^{12}	2.89×10^{10}
140	0.52	-0.014	0.014		6.26×10^8	3.65×10^8
141	16.03	-0.028	0.028		7.74×10^{11}	2.64×10^{11}
142	10.02	-0.004	0.004		1.96×10^{11}	1.67×10^{11}
143	6.33	-0.099	0.099		3.58×10^{11}	7.57×10^9
144	25.24	-0.100	0.100		5.78×10^{12}	1.18×10^{11}
145	35.99	-0.021	0.021		3.48×10^{12}	1.53×10^{12}
146	8.85	-0.076	0.076		5.10×10^{11}	2.68×10^{10}
147	41.96	-0.015	0.015		4.19×10^{12}	2.38×10^{12}
148	0.71	-0.095	0.095		4.24×10^9	1.06×10^8
149	8.37	-0.034	0.034		2.36×10^{11}	6.28×10^{10}
150	1.24	-0.035	0.035		5.27×10^9	1.34×10^9
151	14.72	-0.202	0.202		5.12×10^{12}	1.97×10^9
152	26.30	-0.048	0.048		2.97×10^{12}	4.49×10^{11}
153	35.82	-0.090	0.090		1.02×10^{13}	3.06×10^{11}
154	40.96	-0.060	0.060		8.69×10^{12}	8.28×10^{11}
155	13.88	-0.031	0.031		6.17×10^{11}	1.84×10^{11}
156	8.82	-0.016	0.016		1.91×10^{11}	1.01×10^{11}
157	1.30	-0.034	0.034		5.72×10^9	1.51×10^9
158	41.37	-0.026	0.026		4.97×10^{12}	1.84×10^{12}
159	1.66	-0.050	0.050		1.23×10^{10}	1.72×10^9
160	0.70	-0.066	0.066		2.74×10^9	2.10×10^8

161	8.68	-0.015	0.015		1.80×10^{11}	1.01×10^{11}
162	14.53	-0.068	0.068		1.22×10^{12}	8.75×10^{10}
163	18.18	-0.093	0.093		2.74×10^{12}	7.26×10^{10}
164	22.09	-0.025	0.025		1.41×10^{12}	5.26×10^{11}
165	52.97	-0.084	0.084		2.04×10^{13}	7.89×10^{11}
166	33.64	-0.055	0.055		5.40×10^{12}	6.31×10^{11}
167	38.58	-0.066	0.066		8.40×10^{12}	6.43×10^{11}
168	10.50	-0.003	0.003		2.11×10^{11}	1.87×10^{11}
169	9.10	-0.022	0.022		2.26×10^{11}	9.61×10^{10}
Avg.	14.81 ± 13.29	-0.053 ± 0.041	0.053 ± 0.041	0.292	$1.99 \pm 3.55 \times 10^{12}$	$2.82 \pm 4.85 \times 10^{11}$

PM6:Y6:1-CN (0.25% v/v)						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→large e	large→small l		small→large	large→small l
1	1.93	-0.034	0.034	0.292	1.25×10^{10}	3.36×10^9
2	0.64	-0.010	0.010		9.02×10^8	6.01×10^8
3	32.05	-0.016	0.016		2.52×10^{12}	1.34×10^{12}
4	5.85	-0.085	0.085		2.54×10^{11}	9.33×10^9
5	15.95	-0.078	0.078		1.71×10^{12}	8.20×10^{10}
6	4.16	-0.110	0.110		1.78×10^{11}	2.42×10^9
7	84.09	-0.001	0.001		1.30×10^{13}	1.26×10^{13}
8	20.54	-0.126	0.126		5.19×10^{12}	3.91×10^{10}
9	54.91	-0.032	0.032		9.86×10^{12}	2.80×10^{12}
10	25.63	-0.093	0.093		5.42×10^{12}	1.46×10^{11}
11	29.71	-0.015	0.015		2.11×10^{12}	1.19×10^{12}
12	6.88	-0.139	0.139		6.73×10^{11}	2.99×10^9
13	17.48	-0.021	0.021		8.11×10^{11}	3.65×10^{11}
14	3.42	-0.065	0.065		6.54×10^{10}	5.15×10^9
15	23.35	-0.146	0.146		8.32×10^{12}	2.79×10^{10}
16	16.49	-0.009	0.009		5.81×10^{11}	4.13×10^{11}
17	31.77	-0.057	0.057		4.92×10^{12}	5.44×10^{11}
18	15.09	-0.053	0.053		1.04×10^{12}	1.35×10^{11}
19	7.52	-0.061	0.061		2.94×10^{11}	2.77×10^{10}
20	5.01	-0.010	0.010		5.45×10^{10}	3.74×10^{10}
21	26.47	-0.038	0.038		2.51×10^{12}	5.79×10^{11}
22	9.62	-0.092	0.092		7.53×10^{11}	2.11×10^{10}
23	40.61	-0.043	0.043		6.46×10^{12}	1.21×10^{12}
24	26.88	-0.033	0.033		2.38×10^{12}	6.66×10^{11}
25	15.41	-0.068	0.068		1.39×10^{12}	9.72×10^{10}
26	40.51	-0.021	0.021		4.36×10^{12}	1.96×10^{12}
27	58.85	-0.012	0.012		7.87×10^{12}	4.92×10^{12}

28	15.59	-0.047	0.047		1.02×10^{12}	1.63×10^{11}
29	12.85	-0.093	0.093		1.37×10^{12}	3.66×10^{10}
30	30.94	-0.047	0.047		3.99×10^{12}	6.46×10^{11}
31	8.46	-0.010	0.010		1.57×10^{11}	1.06×10^{11}
32	6.51	-0.066	0.066		2.38×10^{11}	1.85×10^{10}
33	17.92	-0.104	0.104		3.07×10^{12}	5.31×10^{10}
34	8.63	-0.056	0.056		3.62×10^{11}	4.05×10^{10}
35	41.25	-0.072	0.072		1.04×10^{13}	6.44×10^{11}
36	43.80	-0.079	0.079		1.31×10^{13}	6.01×10^{11}
37	2.09	-0.070	0.070		2.64×10^{10}	1.70×10^9
38	25.96	-0.103	0.103		6.35×10^{12}	1.15×10^{11}
39	16.90	-0.055	0.055		1.36×10^{12}	1.60×10^{11}
40	21.04	-0.021	0.021		1.20×10^{12}	5.18×10^{11}
41	28.79	-0.023	0.023		2.32×10^{12}	9.32×10^{11}
42	6.37	-0.044	0.044		1.61×10^{11}	2.93×10^{10}
43	29.26	-0.040	0.040		3.18×10^{12}	6.76×10^{11}
44	0.24	-0.181	0.181		1.16×10^9	$9.99 \times 10+05$
45	10.57	-0.045	0.045		4.54×10^{11}	7.83×10^{10}
46	4.91	-0.060	0.060		1.24×10^{11}	1.20×10^{10}
47	13.73	-0.039	0.039		6.87×10^{11}	1.53×10^{11}
48	21.22	-0.069	0.069		2.64×10^{12}	1.83×10^{11}
49	1.63	-0.027	0.027		7.90×10^9	2.74×10^9
50	5.42	-0.069	0.069		1.73×10^{11}	1.18×10^{10}
51	17.03	-0.084	0.084		2.12×10^{12}	8.10×10^{10}
52	11.95	-0.046	0.046		5.92×10^{11}	9.72×10^{10}
53	17.27	-0.046	0.046		1.24×10^{12}	2.03×10^{11}
54	31.31	-0.026	0.026		2.89×10^{12}	1.03×10^{12}
55	10.79	-0.091	0.091		9.34×10^{11}	2.74×10^{10}
56	0.02	-0.051	0.051		$1.39 \times 10+06$	$1.93 \times 10+05$
57	13.12	-0.020	0.020		4.56×10^{11}	2.06×10^{11}
58	6.99	-0.070	0.070		2.92×10^{11}	1.92×10^{10}
59	13.70	-0.079	0.079		1.29×10^{12}	5.85×10^{10}
60	5.85	-0.049	0.049		1.48×10^{11}	2.20×10^{10}
61	2.10	-0.085	0.085		3.30×10^{10}	1.19×10^9
62	14.54	-0.009	0.009		4.49×10^{11}	3.22×10^{11}
63	10.96	-0.094	0.094		1.00×10^{12}	2.62×10^{10}
64	16.17	-0.040	0.040		9.81×10^{11}	2.04×10^{11}
65	27.78	-0.067	0.067		4.39×10^{12}	3.29×10^{11}
66	7.21	-0.106	0.106		5.07×10^{11}	8.26×10^9
67	27.04	-0.187	0.187		1.57×10^{13}	1.09×10^{10}
68	7.60	-0.024	0.024		1.65×10^{11}	6.36×10^{10}
69	5.69	-0.017	0.017		8.07×10^{10}	4.16×10^{10}
70	26.65	-0.042	0.042		2.75×10^{12}	5.29×10^{11}

71	3.32	-0.064	0.064		6.04×10^{10}	4.96×10^9
72	21.24	-0.036	0.036		1.57×10^{12}	3.88×10^{11}
73	4.64	-0.056	0.056		1.04×10^{11}	1.18×10^{10}
74	9.88	-0.080	0.080		6.74×10^{11}	3.01×10^{10}
75	3.55	0.000	0.000		2.30×10^{10}	2.26×10^{10}
76	27.51	-0.011	0.011		1.70×10^{12}	1.09×10^{12}
77	89.72	-0.070	0.070		4.85×10^{13}	3.13×10^{12}
78	2.83	-0.018	0.018		2.02×10^{10}	1.01×10^{10}
79	10.42	-0.029	0.029		3.35×10^{11}	1.08×10^{11}
80	18.68	-0.094	0.094		2.92×10^{12}	7.55×10^{10}
81	9.86	-0.017	0.017		2.40×10^{11}	1.26×10^{11}
82	3.33	-0.089	0.089		8.65×10^{10}	2.74×10^9
83	3.15	-0.054	0.054		4.63×10^{10}	5.70×10^9
84	4.07	-0.093	0.093		1.37×10^{11}	3.70×10^9
85	38.10	-0.031	0.031		4.62×10^{12}	1.39×10^{12}
86	24.85	-0.051	0.051		2.75×10^{12}	3.81×10^{11}
87	11.73	-0.037	0.037		4.88×10^{11}	1.15×10^{11}
88	6.01	-0.010	0.010		7.90×10^{10}	5.35×10^{10}
89	2.84	-0.025	0.025		2.31×10^{10}	8.77×10^9
90	32.03	-0.004	0.004		2.00×10^{12}	1.71×10^{12}
91	21.61	-0.167	0.167		8.63×10^{12}	1.27×10^{10}
92	4.91	-0.036	0.036		8.36×10^{10}	2.08×10^{10}
93	4.60	-0.079	0.079		1.44×10^{11}	6.68×10^9
94	15.28	-0.004	0.004		4.56×10^{11}	3.89×10^{11}
95	7.90	-0.011	0.011		1.40×10^{11}	9.02×10^{10}
96	29.30	-0.110	0.110		8.81×10^{12}	1.22×10^{11}
97	41.84	-0.036	0.036		6.12×10^{12}	1.50×10^{12}
98	37.75	-0.026	0.026		4.15×10^{12}	1.53×10^{12}
99	13.63	-0.005	0.005		3.71×10^{11}	3.02×10^{11}
100	69.53	-0.060	0.060		2.49×10^{13}	2.40×10^{12}
101	3.91	-0.065	0.065		8.53×10^{10}	6.74×10^9
102	14.54	-0.144	0.144		3.16×10^{12}	1.15×10^{10}
103	9.72	-0.066	0.066		5.34×10^{11}	4.08×10^{10}
104	9.39	-0.002	0.002		1.67×10^{11}	1.52×10^{11}
105	4.45	-0.006	0.006		4.02×10^{10}	3.16×10^{10}
106	52.62	-0.063	0.063		1.50×10^{13}	1.28×10^{12}
107	26.18	-0.032	0.032		2.22×10^{12}	6.46×10^{11}
108	6.47	-0.014	0.014		9.93×10^{10}	5.66×10^{10}
109	6.90	-0.090	0.090		3.80×10^{11}	1.13×10^{10}
110	1.64	-0.114	0.114		2.89×10^{10}	3.38×10^8
111	3.93	-0.065	0.065		8.61×10^{10}	6.81×10^9
112	23.36	-0.127	0.127		6.85×10^{12}	4.81×10^{10}
113	4.73	-0.050	0.050		9.89×10^{10}	1.40×10^{10}

114	5.77	-0.153	0.153	0.292	5.44×10^{11}	1.38×10^9
115	1.36	-0.064	0.064		1.02×10^{10}	8.42×10^8
116	27.85	-0.041	0.041		2.92×10^{12}	6.01×10^{11}
117	4.20	-0.007	0.007		3.62×10^{10}	2.78×10^{10}
118	15.53	-0.071	0.071		1.46×10^{12}	9.31×10^{10}
119	10.83	-0.079	0.079		8.03×10^{11}	3.67×10^{10}
120	25.74	-0.007	0.007		1.36×10^{12}	1.05×10^{12}
121	26.39	-0.018	0.018		1.77×10^{12}	8.74×10^{11}
122	0.35	-0.110	0.110		1.23×10^9	1.69×10^7
123	1.87	-0.065	0.065		1.93×10^{10}	1.56×10^9
124	15.08	-0.077	0.077		1.52×10^{12}	7.45×10^{10}
125	7.19	-0.085	0.085		3.83×10^{11}	1.41×10^{10}
126	34.25	-0.003	0.003		2.24×10^{12}	2.00×10^{12}
127	14.54	-0.045	0.045		8.61×10^{11}	1.48×10^{11}
128	19.42	-0.114	0.114		4.05×10^{12}	4.84×10^{10}
129	23.78	-0.044	0.044		2.25×10^{12}	4.07×10^{11}
130	29.39	-0.018	0.018		2.20×10^{12}	1.08×10^{12}
131	21.06	-0.316	0.316		1.35×10^{13}	6.17×10^7
132	47.02	-0.062	0.062		1.18×10^{13}	1.04×10^{12}
133	12.65	-0.004	0.004		3.10×10^{11}	2.69×10^{11}
134	57.05	-0.059	0.059		1.65×10^{13}	1.66×10^{12}
135	23.60	-0.032	0.032		1.82×10^{12}	5.17×10^{11}
136	46.29	-0.019	0.019		5.54×10^{12}	2.64×10^{12}
137	2.29	-0.016	0.016		1.28×10^{10}	6.84×10^9
138	28.14	-0.122	0.122		9.38×10^{12}	8.06×10^{10}
139	3.83	-0.072	0.072		9.01×10^{10}	5.53×10^9
140	48.86	-0.166	0.166		4.37×10^{13}	6.74×10^{10}
141	9.62	-0.034	0.034		3.12×10^{11}	8.26×10^{10}
142	59.45	-0.053	0.053		1.63×10^{13}	2.07×10^{12}
143	2.43	-0.089	0.089		4.63×10^{10}	1.45×10^9
144	1.39	-0.084	0.084		1.41×10^{10}	5.30×10^8
145	2.66	-0.015	0.015		1.68×10^{10}	9.51×10^9
146	29.42	-0.056	0.056		4.21×10^{12}	4.69×10^{11}
147	97.59	-0.054	0.054		4.44×10^{13}	5.50×10^{12}
148	25.72	-0.020	0.020		1.74×10^{12}	8.00×10^{11}
149	29.51	-0.113	0.113		9.29×10^{12}	1.13×10^{11}
150	18.17	-0.025	0.025		9.46×10^{11}	3.60×10^{11}
151	4.16	-0.024	0.024		4.86×10^{10}	1.94×10^{10}
152	20.85	-0.054	0.054		2.04×10^{12}	2.49×10^{11}
153	5.26	-0.093	0.093		2.28×10^{11}	6.15×10^9
154	17.31	-0.038	0.038		1.09×10^{12}	2.44×10^{11}
155	27.93	-0.091	0.091		6.27×10^{12}	1.82×10^{11}
Avg.	18.82±	-0.059±	0.059±	0.292	3.43±	5.02±

	17.47	0.045	0.045		7.18×10^{12}	12.7×10^{11}
--	-------	-------	-------	--	-----------------------	-----------------------

PM6:Y6:1-CN (0.5% v/v)						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→larg e	large→small		small→larg e	large→small l
1	4.71	-0.088	0.088	0.292	1.72×10^{11}	5.58×10^9
2	20.81	-0.026	0.026		1.27×10^{12}	4.62×10^{11}
3	24.03	-0.001	0.001		1.06×10^{12}	1.02×10^{12}
4	23.10	-0.062	0.062		2.85×10^{12}	2.51×10^{11}
5	49.08	-0.048	0.048		1.03×10^{13}	1.58×10^{12}
6	23.96	-0.142	0.142		8.40×10^{12}	3.34×10^{10}
7	28.32	-0.056	0.056		3.89×10^{12}	4.37×10^{11}
8	10.71	-0.017	0.017		2.87×10^{11}	1.46×10^{11}
9	18.57	-0.041	0.041		1.30×10^{12}	2.67×10^{11}
10	6.70	-0.002	0.002		8.44×10^{10}	7.79×10^{10}
11	0.22	-0.003	0.003		8.91×10^7	8.06×10^7
12	24.53	-0.004	0.004		1.17×10^{12}	1.01×10^{12}
13	2.61	-0.075	0.075		4.40×10^{10}	2.37×10^9
14	6.74	-0.054	0.054		2.14×10^{11}	2.59×10^{10}
15	6.36	-0.006	0.006		8.18×10^{10}	6.51×10^{10}
16	15.21	-0.004	0.004		4.49×10^{11}	3.87×10^{11}
17	6.45	-0.025	0.025		1.19×10^{11}	4.54×10^{10}
18	30.43	-0.108	0.108		9.33×10^{12}	1.37×10^{11}
19	25.94	-0.110	0.110		6.92×10^{12}	9.52×10^{10}
20	10.32	-0.008	0.008		2.23×10^{11}	1.65×10^{11}
21	9.14	-0.019	0.019		2.16×10^{11}	1.03×10^{11}
22	13.64	-0.071	0.071		1.13×10^{12}	7.11×10^{10}
23	1.10	-0.092	0.092		9.82×10^9	2.73×10^8
24	48.55	-0.041	0.041		9.00×10^{12}	1.80×10^{12}
25	11.99	-0.008	0.008		3.02×10^{11}	2.22×10^{11}
26	9.41	-0.091	0.091		7.17×10^{11}	2.04×10^{10}
27	5.33	-0.006	0.006		5.73×10^{10}	4.58×10^{10}
28	19.75	-0.008	0.008		8.27×10^{11}	5.96×10^{11}
29	15.90	-0.015	0.015		6.08×10^{11}	3.37×10^{11}
30	4.25	-0.011	0.011		4.05×10^{10}	2.61×10^{10}
31	45.79	-0.030	0.030		6.60×10^{12}	2.04×10^{12}
32	17.12	-0.138	0.138		4.12×10^{12}	1.92×10^{10}
33	11.26	-0.114	0.114		1.37×10^{12}	1.61×10^{10}
34	20.61	-0.013	0.013		9.90×10^{11}	5.87×10^{11}
35	0.41	-0.059	0.059		8.53×10^8	8.59×10^7
36	15.03	-0.066	0.066		1.28×10^{12}	9.71×10^{10}
37	12.45	-0.076	0.076		1.02×10^{12}	5.24×10^{10}

38	4.08	-0.034	0.034		5.62×10^{10}	1.48×10^{10}
39	8.50	-0.159	0.159		1.24×10^{12}	2.54×10^9
40	11.75	-0.131	0.131		1.79×10^{12}	1.11×10^{10}
41	11.47	-0.017	0.017		3.26×10^{11}	1.69×10^{11}
42	0.55	-0.013	0.013		6.92×10^8	4.23×10^8
43	12.17	-0.056	0.056		7.20×10^{11}	8.04×10^{10}
44	7.24	-0.051	0.051		2.33×10^{11}	3.25×10^{10}
45	44.55	-0.122	0.122		2.36×10^{13}	2.01×10^{11}
46	22.36	-0.067	0.067		2.88×10^{12}	2.09×10^{11}
47	36.95	-0.008	0.008		2.87×10^{12}	2.11×10^{12}
48	12.60	-0.051	0.051		7.05×10^{11}	9.82×10^{10}
49	7.60	-0.079	0.079		3.96×10^{11}	1.81×10^{10}
50	3.20	-0.025	0.025		2.95×10^{10}	1.11×10^{10}
51	9.88	-0.107	0.107		9.63×10^{11}	1.51×10^{10}
52	17.27	-0.053	0.053		1.37×10^{12}	1.76×10^{11}
53	38.29	-0.031	0.031		4.71×10^{12}	1.39×10^{12}
54	20.04	-0.049	0.049		1.75×10^{12}	2.56×10^{11}
55	54.01	-0.066	0.066		1.63×10^{13}	1.27×10^{12}
56	15.61	-0.106	0.106		2.39×10^{12}	3.81×10^{10}
57	8.21	-0.034	0.034		2.28×10^{11}	6.01×10^{10}
58	35.17	-0.021	0.021		3.31×10^{12}	1.46×10^{12}
59	14.84	-0.061	0.061		1.15×10^{12}	1.07×10^{11}
60	33.85	-0.062	0.062		6.05×10^{12}	5.48×10^{11}
61	31.08	-0.072	0.072		5.93×10^{12}	3.64×10^{11}
62	9.83	-0.054	0.054		4.50×10^{11}	5.60×10^{10}
63	50.96	-0.098	0.098		2.29×10^{13}	5.08×10^{11}
64	6.62	-0.153	0.153		7.14×10^{11}	1.84×10^9
65	14.57	-0.032	0.032		6.85×10^{11}	2.01×10^{11}
66	5.74	-0.078	0.078		2.21×10^{11}	1.07×10^{10}
67	46.16	-0.003	0.003		4.07×10^{12}	3.64×10^{12}
68	17.32	-0.013	0.013		6.93×10^{11}	4.18×10^{11}
69	39.72	-0.014	0.014		3.72×10^{12}	2.15×10^{12}
70	19.77	-0.060	0.060		2.02×10^{12}	1.94×10^{11}
71	24.15	-0.023	0.023		1.61×10^{12}	6.68×10^{11}
72	30.82	-0.027	0.027		2.84×10^{12}	9.84×10^{11}
73	1.07	-0.042	0.042		4.47×10^9	8.58×10^8
74	7.83	-0.010	0.010		1.33×10^{11}	9.17×10^{10}
75	16.82	-0.019	0.019		7.32×10^{11}	3.47×10^{11}
76	9.74	-0.003	0.003		1.80×10^{11}	1.63×10^{11}
77	27.76	-0.027	0.027		2.29×10^{12}	8.08×10^{11}
78	7.06	-0.002	0.002		9.27×10^{10}	8.73×10^{10}
79	25.67	-0.085	0.085		4.92×10^{12}	1.77×10^{11}
80	5.88	-0.060	0.060		1.79×10^{11}	1.70×10^{10}

81	6.00	-0.054	0.054		1.70×10^{11}	2.05×10^{10}
82	22.38	-0.074	0.074		3.18×10^{12}	1.78×10^{11}
83	27.03	-0.007	0.007		1.52×10^{12}	1.14×10^{12}
84	6.65	-0.047	0.047		1.85×10^{11}	2.98×10^{10}
85	2.57	-0.061	0.061		3.42×10^{10}	3.22×10^9
86	9.07	-0.075	0.075		5.27×10^{11}	2.89×10^{10}
87	23.67	-0.033	0.033		1.87×10^{12}	5.08×10^{11}
88	4.53	-0.014	0.014		4.86×10^{10}	2.78×10^{10}
89	60.50	-0.029	0.029		1.14×10^{13}	3.62×10^{12}
90	95.08	-0.079	0.079		6.19×10^{13}	2.83×10^{12}
91	40.51	-0.167	0.167		3.02×10^{13}	4.54×10^{10}
92	5.24	-0.066	0.066		1.54×10^{11}	1.20×10^{10}
93	51.94	-0.017	0.017		6.66×10^{12}	3.49×10^{12}
94	8.79	-0.041	0.041		2.92×10^{11}	5.96×10^{10}
95	9.11	-0.209	0.209		2.04×10^{12}	6.08×10^8
96	4.63	-0.053	0.053		9.91×10^{10}	1.25×10^{10}
97	7.98	-0.024	0.024		1.80×10^{11}	7.06×10^{10}
98	5.45	-0.003	0.003		5.66×10^{10}	5.06×10^{10}
99	3.37	-0.056	0.056		5.47×10^{10}	6.23×10^9
100	5.06	-0.022	0.022		6.92×10^{10}	2.99×10^{10}
101	13.43	-0.134	0.134		2.44×10^{12}	1.30×10^{10}
102	23.76	-0.010	0.010		1.23×10^{12}	8.37×10^{11}
103	2.66	-0.097	0.097		6.15×10^{10}	1.41×10^9
104	7.65	-0.044	0.044		2.34×10^{11}	4.17×10^{10}
105	35.60	-0.124	0.124		1.53×10^{13}	1.23×10^{11}
106	6.31	-0.053	0.053		1.83×10^{11}	2.35×10^{10}
107	1.11	-0.049	0.049		5.35×10^9	8.00×10^8
108	30.40	-0.188	0.188		1.99×10^{13}	1.33×10^{10}
109	46.32	-0.075	0.075		1.38×10^{13}	7.44×10^{11}
110	8.01	-0.042	0.042		2.47×10^{11}	4.84×10^{10}
111	19.53	-0.040	0.040		1.43×10^{12}	2.97×10^{11}
112	12.49	-0.014	0.014		3.67×10^{11}	2.13×10^{11}
113	17.53	-0.002	0.002		5.72×10^{11}	5.38×10^{11}
114	11.27	-0.053	0.053		5.85×10^{11}	7.46×10^{10}
115	38.06	-0.055	0.055		6.85×10^{12}	8.18×10^{11}
116	51.96	-0.035	0.035		9.32×10^{12}	2.34×10^{12}
117	3.06	-0.045	0.045		3.80×10^{10}	6.54×10^9
118	21.13	-0.009	0.009		9.66×10^{11}	6.69×10^{11}
119	1.55	-0.088	0.088		1.88×10^{10}	5.98×10^8
120	7.86	-0.006	0.006		1.24×10^{11}	1.00×10^{11}
121	0.41	-0.037	0.037		5.83×10^8	1.37×10^8
122	13.41	-0.052	0.052		8.19×10^{11}	1.07×10^{11}
123	11.88	-0.031	0.031		4.54×10^{11}	1.34×10^{11}

124	62.93	-0.081	0.081		2.77×10^{13}	1.19×10^{12}
125	5.44	-0.090	0.090		2.37×10^{11}	7.00×10^9
126	32.75	-0.086	0.086		8.06×10^{12}	2.84×10^{11}
127	33.95	-0.081	0.081		8.06×10^{12}	3.48×10^{11}
128	4.75	-0.078	0.078		1.51×10^{11}	7.35×10^9
129	29.79	-0.016	0.016		2.16×10^{12}	1.17×10^{12}
130	47.82	-0.005	0.005		4.54×10^{12}	3.75×10^{12}
131	9.71	-0.224	0.224		2.51×10^{12}	4.06×10^8
132	29.47	-0.110	0.110		8.90×10^{12}	1.24×10^{11}
133	51.58	-0.001	0.001		4.92×10^{12}	4.68×10^{12}
134	41.21	-0.061	0.061		8.89×10^{12}	8.25×10^{11}
135	14.19	-0.022	0.022		5.45×10^{11}	2.35×10^{11}
136	0.83	-0.080	0.080		4.84×10^9	2.12×10^8
137	44.68	-0.149	0.149		3.13×10^{13}	9.46×10^{10}
138	47.25	-0.082	0.082		1.59×10^{13}	6.55×10^{11}
139	35.89	-0.012	0.012		2.94×10^{12}	1.82×10^{12}
140	2.37	-0.059	0.059		2.87×10^{10}	2.84×10^9
141	1.31	-0.064	0.064		9.42×10^9	7.88×10^8
142	54.62	-0.005	0.005		5.98×10^{12}	4.84×10^{12}
143	36.84	-0.038	0.038		4.86×10^{12}	1.12×10^{12}
144	0.63	-0.205	0.205		9.53×10^9	3.21×10^6
145	29.61	-0.075	0.075		5.62×10^{12}	3.07×10^{11}
146	0.02	-0.102	0.102		2.12×10^6	4.03×10^4
147	23.53	-0.030	0.030		1.75×10^{12}	5.38×10^{11}
148	7.75	-0.014	0.014		1.42×10^{11}	8.20×10^{10}
149	7.45	-0.073	0.073		3.48×10^{11}	2.02×10^{10}
Avg	$19.27 \pm$ 16.71	$-0.056 \pm$ 0.046	$0.056 \pm$ 0.046	0.292	$3.66 \pm 7.51 \times$ 10^{12}	$4.89 \pm$ 9.02×10^{11}

Table S4. Proportions of Y6_Y6 π - π packing pairs with different orders of magnitude in the electron transfer rates for PM6:Y6:1-CN blends as a function of 1-CN concentrations of 0%, 0.25%, and 0.5% v/v. Here, “small→large” means electron transfer from a Y6 molecule with a smaller EA to one with a larger EA, and “large→small” means the reverse process.

electron-transfer rate [s ⁻¹]	0% v/v		0.25% v/v		0.5% v/v	
	small→ large	large→ small	small→ large	small→ large	small→ large	small→ large
$\geq 10^{13}$	3.55%		6.74%		6.94%	
$\geq 10^{12}$	37.87%	8.28%	45.16%	10.32%	45.83%	13.89%
$\geq 10^{11}$	72.19%	44.97%	75.48%	46.45%	76.39%	43.06%
$\geq 10^{10}$	86.98%	72.78%	96.77%	79.35%	92.62%	74.31%
$\geq 10^9$		87.57%		94.84%		90.28%

Table S5. Hole transfer rates, k_h , between PM6 chains for 34, 33, and 31 PM6_PM6 π - π packing pairs extracted from the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends with a 1-CN concentration of 0%, 0.25%, and 0.5% v/v. Here, “small→large” means hole transfer from a PM6 chain with a smaller IP to one with a larger IP, and “large→small” means the reverse process.

PM6:Y6:1-CN blend (0% v/v)						
pairs	$ V_h $ (meV)	ΔE_h (eV)		λ_h (eV)	k_h (s ⁻¹)	
		small→large e	large→small l		small→large e	large→small l
1	17.55	-0.101	0.101	0.349	1.59×10^{12}	3.07×10^{10}
2	24.42	-0.149	0.149		5.55×10^{12}	1.70×10^{10}
3	33.73	-0.027	0.027		1.80×10^{12}	6.29×10^{11}
4	9.69	-0.176	0.176		1.16×10^{12}	1.23×10^9
5	32.60	-0.181	0.181		1.38×10^{13}	1.20×10^{10}
6	21.52	-0.146	0.146		4.16×10^{12}	1.44×10^{10}
7	14.68	-0.155	0.155		2.15×10^{12}	5.15×10^9
8	26.26	-0.027	0.027		1.09×10^{12}	3.81×10^{11}
9	25.09	-0.116	0.116		3.96×10^{12}	4.29×10^{10}
10	3.56	-0.045	0.045		2.73×10^{10}	4.81×10^9
11	6.31	-0.011	0.011		4.72×10^{10}	3.04×10^{10}
12	1.76	-0.173	0.173		3.74×10^{10}	4.40×10^7
13	7.28	-0.047	0.047		1.18×10^{11}	1.92×10^{10}
14	3.18	-0.221	0.221		1.82×10^{11}	3.38×10^7
15	5.93	-0.024	0.024		5.22×10^{10}	2.08×10^{10}
16	4.45	-0.173	0.173		2.38×10^{11}	2.82×10^8
17	1.97	-0.154	0.154		3.84×10^{10}	9.53×10^7
18	5.55	-0.097	0.097		1.49×10^{11}	3.43×10^9
19	6.18	-0.065	0.065		1.14×10^{11}	9.21×10^9
20	6.07	-0.047	0.047		8.19×10^{10}	1.34×10^{10}
21	29.86	-0.007	0.007		9.73×10^{11}	7.42×10^{11}
22	22.47	-0.049	0.049		1.18×10^{12}	1.72×10^{11}
23	24.18	-0.057	0.057		1.55×10^{12}	1.67×10^{11}
24	4.88	-0.084	0.084		9.66×10^{10}	3.60×10^9
25	1.46	-0.156	0.156		2.15×10^{10}	5.02×10^7
26	0.60	-0.087	0.087		1.52×10^9	5.20×10^7
27	7.16	-0.050	0.050		1.21×10^{11}	1.72×10^{10}
28	10.37	-0.053	0.053		2.67×10^{11}	3.37×10^{10}
29	3.68	-0.066	0.066		4.15×10^{10}	3.17×10^9
30	2.23	-0.096	0.096		2.37×10^{10}	5.63×10^8
31	26.80	-0.113	0.113		4.33×10^{12}	5.32×10^{10}

32	6.62	-0.005	0.005		4.64×10^{10}	3.77×10^{10}
33	9.71	-0.045	0.045		2.05×10^{11}	3.54×10^{10}
34	9.67	-0.146	0.146		8.40×10^{11}	2.91×10^9
Avg.	12.28 ± 10.13	-0.093 ± 0.059	0.093 ± 0.059	0.349	$1.35 \pm 2.59 \times 10^{12}$	$7.36 \pm 16.9 \times 10^{10}$

PM6:Y6:1-CN (0.25% v/v)						
pairs	$ V_h $ (meV)	ΔE_h (eV)		λ_h (eV)	k_h (s ⁻¹)	
		small→large e	large→small l		small→large	large→small l
1	0.70	-0.113	0.113	0.349	2.97×10^9	3.69×10^7
2	18.31	-0.044	0.044		7.12×10^{11}	1.29×10^{11}
3	2.93	-0.077	0.077		3.10×10^{10}	1.56×10^9
4	4.81	-0.071	0.071		7.68×10^{10}	4.78×10^9
5	0.79	-0.033	0.033		1.09×10^9	3.02×10^8
6	5.12	-0.129	0.129		1.95×10^{11}	1.26×10^9
7	14.08	-0.027	0.027		3.11×10^{11}	1.11×10^{11}
8	37.12	-0.010	0.010		1.58×10^{12}	1.09×10^{12}
9	14.09	-0.052	0.052		4.82×10^{11}	6.41×10^{10}
10	13.83	-0.029	0.029		3.14×10^{11}	1.01×10^{11}
11	19.76	-0.080	0.080		1.48×10^{12}	6.56×10^{10}
12	16.98	-0.110	0.110		1.67×10^{12}	2.31×10^{10}
13	2.46	-0.002	0.002		5.97×10^9	5.61×10^9
14	25.29	-0.143	0.143		5.59×10^{12}	2.12×10^{10}
15	24.08	-0.058	0.058		1.56×10^{12}	1.63×10^{11}
16	43.95	-0.136	0.136		1.56×10^{13}	7.70×10^{10}
17	41.68	-0.138	0.138		1.43×10^{13}	6.64×10^{10}
18	11.92	-0.130	0.130		1.06×10^{12}	6.79×10^9
19	5.44	-0.085	0.085		1.20×10^{11}	4.43×10^9
20	1.24	-0.086	0.086		6.30×10^9	2.25×10^8
21	6.04	-0.115	0.115		2.26×10^{11}	2.57×10^9
22	37.02	-0.108	0.108		7.72×10^{12}	1.16×10^{11}
23	2.28	-0.043	0.043		1.09×10^{10}	2.04×10^9
24	3.35	-0.040	0.040		2.22×10^{10}	4.70×10^9
25	31.61	-0.089	0.089		4.34×10^{12}	1.34×10^{11}
26	21.87	-0.093	0.093		2.20×10^{12}	5.83×10^{10}
27	4.24	-0.050	0.050		4.24×10^{10}	6.05×10^9
28	1.37	-0.114	0.114		1.14×10^{10}	1.36×10^8
29	0.39	-0.088	0.088		6.38×10^8	2.04×10^7
30	0.94	-0.031	0.031		1.51×10^9	4.54×10^8
31	2.65	-0.084	0.084		2.82×10^{10}	1.07×10^9
32	3.73	-0.075	0.075		4.92×10^{10}	2.62×10^9

33	19.73	-0.002	0.002		3.83×10^{11}	3.60×10^{11}
Avg.	13.33± 13.00	-0.075± 0.040	0.075± 0.040	0.349	1.82± 3.76×10^{12}	7.94± 19.2×10^{10}

PM6:Y6:1-CN (0.5% v/v)						
pairs	$ V_h $ (meV)	ΔE_h (eV)		λ_h (eV)	k_h (s ⁻¹)	
		small→large e	large→small		small→large	large→small l
1	15.14	-0.073	0.073	0.349	7.81×10^{11}	4.54×10^{10}
2	32.60	-0.035	0.035		1.95×10^{12}	4.93×10^{11}
3	17.11	-0.088	0.088		1.25×10^{12}	4.07×10^{10}
4	0.09	-0.148	0.148		6.98×10^7	2.22×10^5
5	25.04	-0.011	0.011		7.40×10^{11}	4.81×10^{11}
6	40.20	-0.069	0.069		5.19×10^{12}	3.51×10^{11}
7	11.80	-0.066	0.066		4.27×10^{11}	3.25×10^{10}
8	26.10	-0.060	0.060		1.89×10^{12}	1.83×10^{11}
9	0.24	-0.088	0.088		2.47×10^8	7.89×10^6
10	14.26	-0.018	0.018		2.75×10^{11}	1.35×10^{11}
11	6.96	-0.102	0.102		2.50×10^{11}	4.80×10^9
12	4.71	-0.067	0.067		6.85×10^{10}	5.10×10^9
13	33.95	-0.042	0.042		2.36×10^{12}	4.65×10^{11}
14	17.93	-0.153	0.153		3.12×10^{12}	8.22×10^9
15	14.11	-0.135	0.135		1.59×10^{12}	8.21×10^9
16	40.33	-0.229	0.229		3.09×10^{13}	4.21×10^9
17	6.59	-0.240	0.240		8.91×10^{11}	7.64×10^7
18	6.77	-0.044	0.044		9.79×10^{10}	1.75×10^{10}
19	6.83	-0.221	0.221		8.39×10^{11}	1.56×10^8
20	11.22	-0.173	0.173		1.52×10^{12}	1.78×10^9
21	1.47	-0.033	0.033		3.80×10^9	1.06×10^9
22	0.07	-0.141	0.141		4.72×10^7	1.95×10^5
23	15.87	-0.068	0.068		7.92×10^{11}	5.63×10^{10}
24	11.28	-0.035	0.035		2.30×10^{11}	6.00×10^{10}
25	11.39	-0.004	0.004		1.33×10^{11}	1.15×10^{11}
26	8.67	-0.099	0.099		3.74×10^{11}	7.98×10^9
27	5.37	-0.119	0.119		1.88×10^{11}	1.82×10^9
28	18.10	-0.071	0.071		1.09×10^{12}	6.77×10^{10}
29	0.08	-0.023	0.023		9.89×10^6	4.06×10^6
30	14.51	-0.163	0.163		2.29×10^{12}	4.01×10^9
31	8.21	-0.099	0.099		3.34×10^{11}	7.20×10^9
Avg.	13.77± 11.10	-0.094± 0.063	0.094± 0.063	0.349	1.92± 5.41×10^{12}	8.38± 14.8×10^{10}

Table S6. Proportions of PM6-PM6 π - π packing pairs with different orders of magnitude in the hole transfer rates for PM6:Y6:1-CN blends as a function of 1-CN concentrations of 0%, 0.25%, and 0.5% v/v. Here, “small→large” means hole transfer from a PM6 chain with a smaller IP to one with a larger IP, and “large→small” means the reverse process.

hole-transfer rate [s ⁻¹]	0% v/v		0.25% v/v		0.5% v/v	
	small→ large	large→ small	small→ large	small→ large	small→ large	small→ large
$\geq 10^{13}$	2.94%		6.06%		6.45%	
$\geq 10^{12}$	32.35%	0%	33.33%	3.03%	35.48%	0%
$\geq 10^{11}$	64.71%	14.71%	57.58%	24.24%	77.42%	25.81%
$\geq 10^{10}$	85.29%	55.88%	87.88%	45.45%	90.32%	54.84%
$\geq 10^9$		79.41%		81.82%		87.10%

Table S7. Averaged E_{CT} , E_{gap} , and E_{el} values for the three PM6_Y6_Y6 complexes and their corresponding PM6_Y6 pairs extracted from the AA-MD-simulated PM6:Y6 blend.

	E_{CT} (eV)	E_{gap} (eV)	E_{el} (eV)
PM6_Y6_Y6	1.598	2.065	-0.467
PM6_Y6	1.618	2.108	-0.490

Table S8. Parameters used to calculate the non-radiative recombination rates, k_{nr} , for the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends with different 1-CN concentrations.

PM6:Y6:1-CN blends	E_{CT}^{ad} (eV)	$ V_{el}^{avg} $ (meV)	λ_{intra} (eV)	λ_{inter} (eV)	ω_{qm} (cm ⁻¹)
0% v/v	1.308	297.8	0.228	0.1	1200
0.25% v/v	1.293	366.8			
0.5 % v/v	1.291	339.2			

Table S9. Parameters used to calculate the radiative recombination rates, k_r , for the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blends with different 1-CN concentrations.

PM6:Y6:1-CN blends	E_{CT}^{ad} (eV)	$\mu_{CT \rightarrow S0}(D)$
0% v/v	1.308	0.839
0.25% v/v	1.293	0.979
0.5 % v/v	1.291	0.904

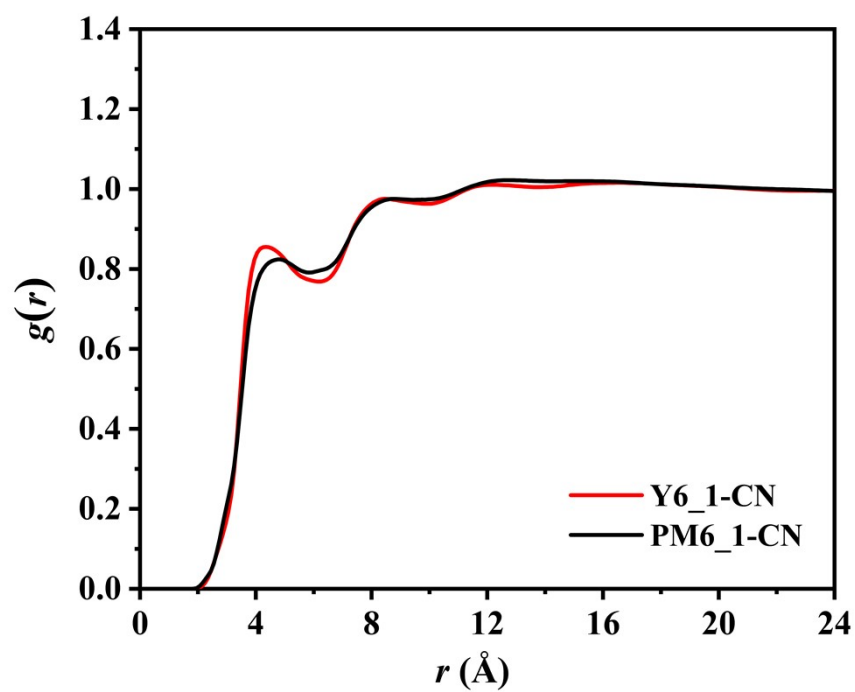


Figure S5. Radial distribution functions for PM6 / Y6_1-CN backbones in the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blend (0.5% v/v).

Table S10. Hole transfer rates, k_h , between PM6 and 1-CN for 207 PM6_1-CN π - π packing pairs extracted from the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blend (0.5% v/v).

pairs	$ V_h $ (meV)	ΔE_h (eV)		λ_h (eV)	k_h (s ⁻¹)	
		PM6→ 1-CN	1-CN→ PM6		PM6→ 1-CN	1-CN→ PM6
1	7.44	-0.417	0.417	0.346	1.37×10^{12}	1.21×10^5
2	3.70	-0.565	0.565		1.02×10^{11}	2.90×10^1
3	5.36	-0.396	0.396		7.64×10^{11}	1.51×10^5
4	61.34	-0.621	0.621		1.27×10^{13}	3.95×10^2
5	7.48	-0.292	0.292		1.47×10^{12}	1.73×10^7
6	18.17	-0.464	0.464		6.37×10^{12}	9.08×10^4
7	7.61	-0.248	0.248		1.26×10^{12}	8.05×10^7
8	3.98	-0.365	0.365		4.47×10^{11}	3.07×10^5
9	4.83	-0.388	0.388		6.35×10^{11}	1.77×10^5
10	34.47	-0.554	0.554		1.01×10^{13}	4.33×10^3
11	18.17	-0.470	0.470		6.14×10^{12}	7.03×10^4
12	1.35	-0.572	0.572		1.24×10^{10}	2.67
13	6.23	-0.465	0.465		7.44×10^{11}	1.02×10^4
14	18.96	-0.527	0.527		4.09×10^{12}	4.99×10^3
15	2.96	-0.748	0.748		2.66×10^9	5.95×10^{-4}
16	26.26	-0.539	0.539		6.96×10^{12}	5.45×10^3
17	12.82	-0.551	0.551		1.45×10^{12}	7.00×10^2
18	30.40	-0.656	0.656		1.76×10^{12}	1.40×10
19	21.08	-0.384	0.384		1.22×10^{13}	3.84×10^6
20	10.31	-0.495	0.495		1.62×10^{12}	6.88×10^3
21	8.14	-0.614	0.614		2.53×10^{11}	1.06×10^1
22	23.33	-0.473	0.473		9.90×10^{12}	1.01×10^5
23	2.22	-0.491	0.491		7.79×10^{10}	3.90×10^2
24	11.86	-0.340	0.340		4.01×10^{12}	7.09×10^6
25	23.96	-0.580	0.580		3.55×10^{12}	5.63×10^2
26	0.13	-0.370	0.370		4.60×10^8	2.57×10^2
27	6.43	-0.446	0.446		8.90×10^{11}	2.53×10^4
28	31.59	-0.737	0.737		3.93×10^{11}	1.38×10^{-1}
29	9.84	-0.622	0.622		3.27×10^{11}	1.00×10^1
30	2.71	-0.598	0.598		3.52×10^{10}	2.74
31	28.66	-0.624	0.624		2.70×10^{12}	7.72×10^1
32	10.30	-0.456	0.456		2.16×10^{12}	4.25×10^4
33	1.98	-0.464	0.464		7.54×10^{10}	1.06×10^3
34	3.54	-0.523	0.523		1.48×10^{11}	2.10×10^2

35	35.38	-0.526	0.526		1.44×10^{13}	1.84×10^4
36	39.99	-0.522	0.522		1.91×10^{13}	2.80×10^4
37	25.58	-0.351	0.351		1.87×10^{13}	2.13×10^7
38	20.37	-0.340	0.340		1.18×10^{13}	2.10×10^7
39	37.27	-0.528	0.528		1.56×10^{13}	1.84×10^4
40	10.06	-0.586	0.586		5.70×10^{11}	6.94×10^1
41	3.39	-0.624	0.624		3.77×10^{10}	1.07
42	33.32	-0.435	0.435		2.54×10^{13}	1.14×10^6
43	1.06	-0.487	0.487		1.83×10^{10}	1.06×10^2
44	4.36	-0.627	0.627		5.93×10^{10}	1.50
45	4.01	-0.644	0.644		3.81×10^{10}	4.97×10^{-1}
46	10.63	-0.549	0.549		1.01×10^{12}	5.23×10^2
47	10.42	-0.568	0.568		7.75×10^{11}	1.91×10^2
48	8.12	-0.328	0.328		1.86×10^{12}	5.20×10^6
49	1.69	-0.565	0.565		2.12×10^{10}	5.96
50	7.53	-0.532	0.532		6.14×10^{11}	6.23×10^2
51	40.40	-0.595	0.595		8.18×10^{12}	7.13×10^2
52	1.17	-0.532	0.532		1.48×10^{10}	1.48×10^1
53	9.78	-0.526	0.526		1.10×10^{12}	1.43×10^3
54	21.01	-0.627	0.627		1.36×10^{12}	3.36×10^1
55	3.36	-0.455	0.455		2.30×10^{11}	4.63×10^3
56	7.00	-0.282	0.282		1.25×10^{12}	2.11×10^7
57	42.49	-0.409	0.409		4.61×10^{13}	5.64×10^6
58	32.21	-0.652	0.652		2.15×10^{12}	2.06×10^1
59	13.42	-0.335	0.335		5.12×10^{12}	1.10×10^7
60	9.57	-0.691	0.691		9.21×10^{10}	1.89×10^{-1}
61	24.09	-0.393	0.393		1.56×10^{13}	3.53×10^6
62	25.58	-0.553	0.553		5.58×10^{12}	2.45×10^3
63	15.01	-0.540	0.540		2.24×10^{12}	1.66×10^3
64	12.79	-0.427	0.427		3.88×10^{12}	2.34×10^5
65	39.85	-0.335	0.335		4.52×10^{13}	9.75×10^7
66	4.91	-0.648	0.648		5.29×10^{10}	5.75×10^{-1}
67	13.23	-0.697	0.697		1.57×10^{11}	2.57×10^{-1}
68	50.83	-0.659	0.659		4.69×10^{12}	3.34×10^1
69	2.25	-0.384	0.384		1.39×10^{11}	4.39×10^4
70	47.30	-0.601	0.601		1.03×10^{13}	7.22×10^2
71	1.08	-0.341	0.341		3.31×10^{10}	5.77×10^4
72	34.36	-0.684	0.684		1.37×10^{12}	3.81
73	37.63	-0.645	0.645		3.30×10^{12}	4.16×10^1

74	10.02	-0.447	0.447		2.15×10^{12}	6.03×10^4
75	2.80	-0.505	0.505		1.10×10^{11}	3.17×10^2
76	4.00	-0.582	0.582		9.53×10^{10}	1.36×10^1
77	17.32	-0.488	0.488		4.87×10^{12}	2.76×10^4
78	24.59	-0.635	0.635		1.66×10^{12}	3.09×10^1
79	23.64	-0.565	0.565		4.15×10^{12}	1.16×10^3
80	3.18	-0.486	0.486		1.66×10^{11}	9.91×10^2
81	3.27	-0.412	0.412		2.71×10^{11}	2.94×10^4
82	15.24	-0.398	0.398		6.14×10^{12}	1.14×10^6
83	1.30	-0.595	0.595		8.41×10^9	7.18×10^{-1}
84	3.57	-0.551	0.551		1.11×10^{11}	5.28×10^1
85	14.39	-0.412	0.412		5.23×10^{12}	5.59×10^5
86	24.38	-0.803	0.803		4.83×10^{10}	1.28×10^{-3}
87	29.05	-0.750	0.750		2.48×10^{11}	5.25×10^{-2}
88	1.71	-0.608	0.608		1.22×10^{10}	6.50×10^{-1}
89	8.42	-0.608	0.608		2.94×10^{11}	1.53×10^1
90	5.76	-0.534	0.534		3.53×10^{11}	3.35×10^2
91	15.20	-0.423	0.423		5.59×10^{12}	3.97×10^5
92	18.33	-0.448	0.448		7.18×10^{12}	1.93×10^5
93	20.91	-0.551	0.551		3.83×10^{12}	1.84×10^3
94	46.40	-0.575	0.575		1.41×10^{13}	2.66×10^3
95	33.26	-0.430	0.430		2.59×10^{13}	1.40×10^6
96	57.23	-0.593	0.593		1.69×10^{13}	1.59×10^3
97	4.43	-0.488	0.488		3.17×10^{11}	1.78×10^3
98	34.46	-0.438	0.438		2.67×10^{13}	1.03×10^6
99	3.94	-0.551	0.551		1.37×10^{11}	6.69×10^1
100	1.77	-0.474	0.474		5.66×10^{10}	5.48×10^2
101	46.05	-0.459	0.459		4.24×10^{13}	7.39×10^5
102	1.25	-0.593	0.593		8.07×10^9	7.51×10^{-1}
103	4.80	-0.571	0.571		1.58×10^{11}	3.46×10^1
104	1.01	-0.729	0.729		4.73×10^8	2.23×10^{-4}
105	7.94	-0.623	0.623		2.07×10^{11}	5.94
106	4.61	-0.644	0.644		5.01×10^{10}	6.49×10^{-1}
107	11.68	-0.633	0.633		3.88×10^{11}	7.82
108	0.20	-0.645	0.645		8.86×10^7	1.10×10^{-3}
109	0.40	-0.526	0.526		1.88×10^9	2.41
110	29.90	-0.626	0.626		2.83×10^{12}	7.35×10^1
111	50.63	-0.657	0.657		4.86×10^{12}	3.81×10^1
112	12.88	-0.604	0.604		7.28×10^{11}	4.40×10^1

113	19.22	-0.450	0.450		7.80×10^{12}	1.94×10^5
114	18.12	-0.591	0.591		1.74×10^{12}	1.77×10^2
115	17.15	-0.593	0.593		1.51×10^{12}	1.41×10^2
116	10.36	-0.457	0.457		2.17×10^{12}	4.03×10^4
117	9.84	-0.593	0.593		4.95×10^{11}	4.58×10^1
118	3.00	-0.610	0.610		3.64×10^{10}	1.75
119	79.89	-0.498	0.498		9.56×10^{13}	3.68×10^5
120	40.84	-0.457	0.457		3.36×10^{13}	6.24×10^5
121	5.24	-0.595	0.595		1.37×10^{11}	1.18×10^1
122	45.30	-0.536	0.536		2.14×10^{13}	1.88×10^4
123	6.78	-0.458	0.458		9.24×10^{11}	1.66×10^4
124	8.88	-0.524	0.524		9.25×10^{11}	1.27×10^3
125	2.91	-0.446	0.446		1.82×10^{11}	5.14×10^3
126	13.47	-0.419	0.419		4.47×10^{12}	3.72×10^5
127	29.97	-0.605	0.605		3.90×10^{12}	2.30×10^2
128	8.05	-0.267	0.267		1.55×10^{12}	4.71×10^7
129	14.04	-0.482	0.482		3.34×10^{12}	2.33×10^4
130	15.99	-0.495	0.495		3.93×10^{12}	1.70×10^4
131	29.39	-0.394	0.394		2.31×10^{13}	5.09×10^6
132	2.39	-0.411	0.411		1.45×10^{11}	1.60×10^4
133	6.31	-0.463	0.463		7.73×10^{11}	1.14×10^4
134	15.31	-0.479	0.479		4.07×10^{12}	3.21×10^4
135	9.74	-0.471	0.471		1.75×10^{12}	1.89×10^4
136	1.37	-0.637	0.637		4.97×10^9	8.58×10^{-2}
137	13.82	-0.493	0.493		2.97×10^{12}	1.35×10^4
138	47.44	-0.448	0.448		4.79×10^{13}	1.26×10^6
139	1.36	-0.540	0.540		1.85×10^{10}	1.40×10^1
140	20.58	-0.501	0.501		6.14×10^{12}	2.03×10^4
141	34.21	-0.526	0.526		1.34×10^{13}	1.68×10^4
142	62.78	-0.577	0.577		2.51×10^{13}	4.37×10^3
143	29.85	-0.493	0.493		1.39×10^{13}	6.38×10^4
144	43.76	-0.371	0.371		5.37×10^{13}	2.89×10^7
145	24.96	-0.531	0.531		6.79×10^{12}	7.08×10^3
146	18.24	-0.589	0.589		1.80×10^{12}	1.96×10^2
147	20.51	-0.596	0.596		2.07×10^{12}	1.73×10^2
148	124.24	-0.578	0.578		9.77×10^{13}	1.67×10^4
149	15.60	-0.436	0.436		5.53×10^{12}	2.34×10^5
150	0.11	-0.565	0.565		8.36×10^7	2.38×10^{-2}
151	8.56	-0.635	0.635		2.02×10^{11}	3.76

152	44.08	-0.383	0.383		5.34×10^{13}	1.79×10^7
153	9.97	-0.581	0.581		6.03×10^{11}	9.09×10^1
154	5.68	-0.394	0.394		8.64×10^{11}	1.91×10^5
155	31.41	-0.669	0.669		1.50×10^{12}	7.30
156	18.48	-0.429	0.429		8.06×10^{12}	4.56×10^5
157	32.00	-0.689	0.689		1.07×10^{12}	2.40
158	78.78	-0.543	0.543		5.95×10^{13}	3.88×10^4
159	7.19	-0.567	0.567		3.75×10^{11}	9.67×10^1
160	7.03	-0.453	0.453		1.03×10^{12}	2.28×10^4
161	33.21	-0.553	0.553		9.50×10^{12}	4.30×10^3
162	7.99	-0.719	0.719		3.69×10^{10}	2.60×10^{-2}
163	16.78	-0.580	0.580		1.72×10^{12}	2.62×10^2
164	18.71	-0.511	0.511		4.65×10^{12}	1.06×10^4
165	19.36	-0.379	0.379		1.04×10^{13}	4.07×10^6
166	26.29	-0.452	0.452		1.44×10^{13}	3.26×10^5
167	41.39	-0.467	0.467		3.25×10^{13}	4.17×10^5
168	3.47	-0.467	0.467		2.28×10^{11}	2.88×10^3
169	27.06	-0.349	0.349		2.09×10^{13}	2.65×10^7
170	20.35	-0.472	0.472		7.58×10^{12}	7.95×10^4
171	2.41	-0.763	0.763		1.26×10^9	1.60×10^{-4}
172	25.53	-0.418	0.418		1.61×10^{13}	1.38×10^6
173	8.59	-0.488	0.488		1.20×10^{12}	6.69×10^3
174	51.13	-0.374	0.374		7.30×10^{13}	3.44×10^7
175	27.38	-0.439	0.439		1.68×10^{13}	6.21×10^5
176	14.02	-0.543	0.543		1.88×10^{12}	1.22×10^3
177	4.14	-0.543	0.543		1.64×10^{11}	1.06×10^2
178	42.37	-0.560	0.560		1.41×10^{13}	4.69×10^3
179	2.53	-0.398	0.398		1.70×10^{11}	3.20×10^4
180	19.20	-0.671	0.671		5.43×10^{11}	2.47
181	30.64	-0.475	0.475		1.68×10^{13}	1.53×10^5
182	29.71	-0.558	0.558		7.18×10^{12}	2.68×10^3
183	8.35	-0.461	0.461		1.38×10^{12}	2.25×10^4
184	53.32	-0.518	0.518		3.53×10^{13}	6.11×10^4
185	67.55	-0.529	0.529		5.11×10^{13}	5.89×10^4
186	10.85	-0.374	0.374		3.29×10^{12}	1.56×10^6
187	20.37	-0.548	0.548		3.78×10^{12}	2.07×10^3
188	43.94	-0.464	0.464		3.72×10^{13}	5.26×10^5
189	33.99	-0.569	0.569		8.18×10^{12}	1.97×10^3
190	29.77	-0.538	0.538		9.00×10^{12}	7.21×10^3

191	2.44	-0.636	0.636		1.61×10^{10}	2.85×10^{-1}
192	3.28	-0.397	0.397		2.85×10^{11}	5.62×10^4
193	46.61	-0.414	0.414		5.45×10^{13}	5.52×10^6
194	17.67	-0.651	0.651		6.53×10^{11}	6.40
195	10.58	-0.487	0.487		1.83×10^{12}	1.07×10^4
196	68.78	-0.716	0.716		2.90×10^{12}	2.28
197	0.48	-0.553	0.553		1.98×10^9	8.83×10^{-1}
198	123.34	-0.397	0.397		4.04×10^{14}	7.92×10^7
199	70.20	-0.408	0.408		1.26×10^{14}	1.62×10^7
200	0.49	-0.537	0.537		2.47×10^9	2.07
201	17.00	-0.558	0.558		2.34×10^{12}	8.64×10^2
202	8.28	-0.543	0.543		6.57×10^{11}	4.27×10^2
203	16.62	-0.514	0.514		3.58×10^{12}	7.31×10^3
204	24.67	-0.436	0.436		1.39×10^{13}	6.00×10^5
205	93.32	-0.627	0.627		2.69×10^{13}	6.62×10^2
206	6.97	-0.513	0.513		6.32×10^{11}	1.32×10^3
207	18.08	-0.402	0.402		8.55×10^{12}	1.37×10^6
Avg.	$20.34 \pm$	$-0.519 \pm$	$0.519 \pm$	0.346	$1.08 \pm$	$2.79 \pm$
	20.33	0.103	0.103		3.25×10^{13}	11.6×10^6

Table S11. Electron transfer rates, k_e , between Y6 and 1-CN for 375 Y6_1-CN π - π packing pairs extracted from the AA-MD-simulated PM6:Y6:1-CN blend (0.5% v/v).

pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		Y6→ 1-CN	1-CN→ Y6		Y6→ 1-CN	1-CN→ Y6
1	21.08	1.986	-1.986	0.338	3.88×10^{-55}	1.51×10^{-21}
2	15.13	2.090	-2.090		1.46×10^{-61}	3.17×10^{-26}
3	0.31	1.998	-1.998		1.80×10^{-59}	1.11×10^{-25}
4	10.95	1.927	-1.927		2.57×10^{-52}	1.00×10^{-19}
5	33.93	2.133	-2.133		1.76×10^{-63}	2.03×10^{-27}
6	31.45	1.895	-1.895		1.40×10^{-49}	1.55×10^{-17}
7	3.64	2.188	-2.188		6.98×10^{-69}	6.96×10^{-32}
8	19.92	1.985	-1.985		4.01×10^{-55}	1.49×10^{-21}
9	4.78	2.065	-2.065		4.83×10^{-61}	3.94×10^{-26}
10	9.12	2.014	-2.014		1.75×10^{-57}	2.00×10^{-23}
11	17.45	1.886	-1.886		1.35×10^{-49}	1.05×10^{-17}
12	13.47	2.129	-2.129		4.77×10^{-64}	4.73×10^{-28}
13	25.88	1.996	-1.996		1.68×10^{-55}	9.41×10^{-22}
14	28.36	1.864	-1.864		6.16×10^{-48}	2.01×10^{-16}
15	19.08	1.939	-1.939		1.73×10^{-52}	1.06×10^{-19}
16	0.76	2.130	-2.130		1.22×10^{-66}	1.29×10^{-30}
17	3.67	1.930	-1.930		2.05×10^{-53}	8.82×10^{-21}
18	9.73	1.951	-1.951		8.97×10^{-54}	8.82×10^{-21}
19	5.80	1.978	-1.978		9.11×10^{-56}	2.55×10^{-22}
20	17.20	1.971	-1.971		2.05×10^{-54}	4.35×10^{-21}
21	4.27	2.196	-2.196		3.04×10^{-69}	4.13×10^{-32}
22	11.18	1.780	-1.780		3.30×10^{-44}	4.08×10^{-14}
23	24.30	1.865	-1.865		3.65×10^{-48}	1.27×10^{-16}
24	92.01	1.862	-1.862		8.04×10^{-47}	2.46×10^{-15}
25	7.11	1.990	-1.990		2.61×10^{-56}	1.18×10^{-22}
26	28.00	1.930	-1.930		1.12×10^{-51}	4.92×10^{-19}
27	12.10	1.907	-1.907		4.64×10^{-51}	8.05×10^{-19}
28	31.88	1.911	-1.911		1.87×10^{-50}	3.82×10^{-18}
29	4.81	2.128	-2.128		6.95×10^{-65}	6.65×10^{-29}
30	41.65	1.978	-1.978		4.92×10^{-54}	1.36×10^{-20}
31	45.92	2.091	-2.091		1.17×10^{-60}	2.64×10^{-25}
32	7.96	1.983	-1.983		8.21×10^{-56}	2.85×10^{-22}
33	3.03	2.057	-2.057		5.58×10^{-61}	3.38×10^{-26}
34	25.15	1.878	-1.878		7.72×10^{-49}	4.42×10^{-17}

35	35.29	2.204	-2.204		6.02×10^{-68}	1.14×10^{-30}
36	9.57	1.908	-1.908		2.41×10^{-51}	4.42×10^{-19}
37	16.11	2.120	-2.120		2.24×10^{-63}	1.60×10^{-27}
38	3.85	2.071	-2.071		1.24×10^{-61}	1.31×10^{-26}
39	3.91	1.920	-1.920		8.13×10^{-53}	2.41×10^{-20}
40	0.41	1.898	-1.898		1.57×10^{-53}	1.97×10^{-21}
41	14.95	2.065	-2.065		4.68×10^{-60}	3.83×10^{-25}
42	22.49	2.074	-2.074		2.99×10^{-60}	3.49×10^{-25}
43	21.79	1.925	-1.925		1.35×10^{-51}	4.82×10^{-19}
44	24.78	1.982	-1.982		1.02×10^{-54}	3.30×10^{-21}
45	39.35	2.021	-2.021		1.37×10^{-56}	2.01×10^{-22}
46	9.37	2.036	-2.036		1.00×10^{-58}	2.64×10^{-24}
47	35.12	1.930	-1.930		1.75×10^{-51}	7.70×10^{-19}
48	13.64	2.046	-2.046		5.15×10^{-59}	2.03×10^{-24}
49	8.36	2.025	-2.025		3.35×10^{-58}	5.85×10^{-24}
50	40.56	1.636	-1.636		9.31×10^{-36}	4.33×10^{-8}
51	30.39	2.086	-2.086		1.06×10^{-60}	1.96×10^{-25}
52	58.71	1.931	-1.931		4.63×10^{-51}	2.07×10^{-18}
53	6.38	1.864	-1.864		3.13×10^{-49}	1.02×10^{-17}
54	1.97	1.932	-1.932		4.40×10^{-54}	2.07×10^{-21}
55	4.74	1.957	-1.957		9.27×10^{-55}	1.17×10^{-21}
56	16.82	1.997	-1.997		6.13×10^{-56}	3.57×10^{-22}
57	18.81	1.898	-1.898		3.42×10^{-50}	4.23×10^{-18}
58	23.61	2.002	-2.002		5.88×10^{-56}	4.22×10^{-22}
59	15.13	1.966	-1.966		3.12×10^{-54}	5.43×10^{-21}
60	28.19	1.783	-1.783		1.41×10^{-43}	1.98×10^{-13}
61	0.78	1.988	-1.988		4.41×10^{-58}	1.81×10^{-24}
62	18.94	1.884	-1.884		2.09×10^{-49}	1.50×10^{-17}
63	24.16	2.000	-2.000		7.75×10^{-56}	5.21×10^{-22}
64	12.48	1.906	-1.906		5.56×10^{-51}	9.30×10^{-19}
65	21.85	2.023	-2.023		2.86×10^{-57}	4.69×10^{-23}
66	6.32	1.808	-1.808		3.04×10^{-46}	1.16×10^{-15}
67	9.27	2.098	-2.098		1.78×10^{-62}	5.29×10^{-27}
68	9.12	2.280	-2.280		5.47×10^{-74}	1.95×10^{-35}
69	20.30	1.927	-1.927		9.66×10^{-52}	3.66×10^{-19}
70	29.17	1.890	-1.890		2.38×10^{-49}	2.14×10^{-17}
71	33.46	1.910	-1.910		2.15×10^{-50}	4.34×10^{-18}
72	14.30	1.969	-1.969		1.87×10^{-54}	3.66×10^{-21}
73	3.48	1.817	-1.817		3.22×10^{-47}	1.71×10^{-16}

74	4.38	2.331	-2.331		5.72×10^{-78}	1.47×10^{-38}
75	4.72	1.975	-1.975		9.49×10^{-56}	2.32×10^{-22}
76	28.05	1.970	-1.970		6.05×10^{-54}	1.25×10^{-20}
77	32.00	1.949	-1.949		1.29×10^{-52}	1.17×10^{-19}
78	41.27	1.879	-1.879		1.94×10^{-48}	1.14×10^{-16}
79	16.40	2.005	-2.005		1.82×10^{-56}	1.49×10^{-22}
80	1.81	1.873	-1.873		7.59×10^{-51}	3.58×10^{-19}
81	8.71	2.002	-2.002		8.74×10^{-57}	6.11×10^{-23}
82	23.41	1.958	-1.958		1.97×10^{-53}	2.58×10^{-20}
83	12.65	1.778	-1.778		5.03×10^{-44}	5.88×10^{-14}
84	31.99	1.973	-1.973		5.60×10^{-54}	1.27×10^{-20}
85	56.08	2.230	-2.230		3.62×10^{-69}	1.84×10^{-31}
86	5.17	1.992	-1.992		1.07×10^{-56}	5.21×10^{-23}
87	0.98	2.065	-2.065		2.02×10^{-62}	1.65×10^{-27}
88	6.20	1.886	-1.886		1.74×10^{-50}	1.35×10^{-18}
89	18.06	2.000	-2.000		4.79×10^{-56}	3.13×10^{-22}
90	12.08	1.904	-1.904		6.39×10^{-51}	1.01×10^{-18}
91	11.08	1.941	-1.941		4.43×10^{-53}	2.93×10^{-20}
92	3.41	1.976	-1.976		4.01×10^{-56}	1.04×10^{-22}
93	5.35	2.014	-2.014		6.53×10^{-58}	7.29×10^{-24}
94	30.53	1.850	-1.850		4.19×10^{-47}	7.92×10^{-16}
95	6.04	1.966	-1.966		5.10×10^{-55}	8.82×10^{-22}
96	6.07	1.825	-1.825		3.82×10^{-47}	2.72×10^{-16}
97	20.41	1.820	-1.820		7.48×10^{-46}	4.49×10^{-15}
98	8.73	1.750	-1.750		6.95×10^{-43}	2.75×10^{-13}
99	63.81	1.940	-1.940		1.73×10^{-51}	1.09×10^{-18}
100	24.40	1.872	-1.872		1.51×10^{-48}	6.92×10^{-17}
101	44.79	2.078	-2.078		6.34×10^{-60}	8.82×10^{-25}
102	22.92	2.030	-2.030		1.34×10^{-57}	2.80×10^{-23}
103	13.72	1.916	-1.916		1.86×10^{-51}	4.58×10^{-19}
104	12.94	2.057	-2.057		1.02×10^{-59}	6.17×10^{-25}
105	10.49	1.999	-1.999		1.70×10^{-56}	1.09×10^{-22}
106	11.40	1.939	-1.939		6.08×10^{-53}	3.72×10^{-20}
107	4.90	2.031	-2.031		5.20×10^{-59}	1.14×10^{-24}
108	18.83	2.081	-2.081		7.25×10^{-61}	1.14×10^{-25}
109	8.89	1.935	-1.935		6.24×10^{-53}	3.27×10^{-20}
110	15.86	1.829	-1.829		1.49×10^{-46}	1.26×10^{-15}
111	20.16	2.102	-2.102		4.50×10^{-62}	1.59×10^{-26}
112	28.60	2.007	-2.007		4.32×10^{-56}	3.79×10^{-22}

113	0.39	1.991	-1.991		7.25×10^{-59}	3.36×10^{-25}
114	30.40	1.966	-1.966		1.25×10^{-53}	2.18×10^{-20}
115	10.72	2.045	-2.045		3.67×10^{-59}	1.39×10^{-24}
116	32.53	2.041	-2.041		5.74×10^{-58}	1.87×10^{-23}
117	52.94	1.837	-1.837		6.06×10^{-46}	7.04×10^{-15}
118	30.40	2.070	-2.070		9.55×10^{-60}	9.53×10^{-25}
119	27.37	2.015	-2.015		1.32×10^{-56}	1.59×10^{-22}
120	7.39	2.058	-2.058		3.06×10^{-60}	1.89×10^{-25}
121	5.17	2.053	-2.053		2.85×10^{-60}	1.47×10^{-25}
122	3.88	1.719	-1.719		5.61×10^{-42}	6.61×10^{-13}
123	78.84	1.785	-1.785		8.06×10^{-43}	1.25×10^{-12}
124	19.64	1.662	-1.662		1.11×10^{-37}	1.42×10^{-9}
125	9.54	1.968	-1.968		9.51×10^{-55}	1.79×10^{-21}
126	17.02	1.928	-1.928		6.00×10^{-52}	2.36×10^{-19}
127	0.71	1.966	-1.966		6.90×10^{-57}	1.20×10^{-23}
128	24.54	1.968	-1.968		6.42×10^{-54}	1.20×10^{-20}
129	26.27	2.076	-2.076		3.05×10^{-60}	3.86×10^{-25}
130	38.91	1.901	-1.901		9.23×10^{-50}	1.31×10^{-17}
131	0.92	1.941	-1.941		3.11×10^{-55}	2.05×10^{-22}
132	20.20	2.025	-2.025		1.96×10^{-57}	3.42×10^{-23}
133	43.78	1.963	-1.963		3.72×10^{-53}	5.84×10^{-20}
134	24.82	1.784	-1.784		1.01×10^{-43}	1.45×10^{-13}
135	48.25	1.940	-1.940		9.11×10^{-52}	5.89×10^{-19}
136	7.76	1.979	-1.979		1.38×10^{-55}	4.06×10^{-22}
137	2.59	1.922	-1.922		2.90×10^{-53}	9.15×10^{-21}
138	21.37	2.033	-2.033		7.19×10^{-58}	1.73×10^{-23}
139	40.00	1.910	-1.910		3.30×10^{-50}	6.52×10^{-18}
140	30.30	1.992	-1.992		3.74×10^{-55}	1.82×10^{-21}
141	39.20	2.131	-2.131		2.79×10^{-63}	3.06×10^{-27}
142	9.96	1.915	-1.915		1.04×10^{-51}	2.52×10^{-19}
143	12.23	1.781	-1.781		3.41×10^{-44}	4.42×10^{-14}
144	79.61	2.069	-2.069		7.33×10^{-59}	7.08×10^{-24}
145	29.22	2.054	-2.054		8.11×10^{-59}	4.33×10^{-24}
146	9.53	1.995	-1.995		2.48×10^{-56}	1.35×10^{-22}
147	60.79	1.995	-1.995		1.01×10^{-54}	5.50×10^{-21}
148	59.94	1.951	-1.951		3.42×10^{-52}	3.36×10^{-19}
149	1.06	2.019	-2.019		1.29×10^{-59}	1.76×10^{-25}
150	24.52	1.857	-1.857		1.03×10^{-47}	2.63×10^{-16}
151	1.14	2.302	-2.302		3.04×10^{-77}	2.57×10^{-38}

152	47.68	2.048	-2.048		4.86×10^{-58}	2.06×10^{-23}
153	54.25	1.837	-1.837		6.84×10^{-46}	7.77×10^{-15}
154	26.53	1.923	-1.923		2.71×10^{-51}	8.86×10^{-19}
155	18.00	1.744	-1.744		6.55×10^{-42}	2.00×10^{-12}
156	21.63	1.954	-1.954		2.90×10^{-53}	3.23×10^{-20}
157	33.34	1.891	-1.891		2.72×10^{-49}	2.54×10^{-17}
158	26.70	1.868	-1.868		3.10×10^{-48}	1.20×10^{-16}
159	34.61	1.873	-1.873		2.74×10^{-48}	1.30×10^{-16}
160	79.89	2.002	-2.002		7.33×10^{-55}	5.14×10^{-21}
161	112.93	1.929	-1.929		2.18×10^{-50}	9.08×10^{-18}
162	5.00	1.746	-1.746		3.65×10^{-43}	1.24×10^{-13}
163	20.48	1.993	-1.993		1.60×10^{-55}	7.92×10^{-22}
164	111.93	1.778	-1.778		4.11×10^{-42}	4.74×10^{-12}
165	45.28	1.913	-1.913		2.79×10^{-50}	6.25×10^{-18}
166	47.98	2.037	-2.037		2.12×10^{-57}	5.94×10^{-23}
167	18.29	1.828	-1.828		2.21×10^{-46}	1.81×10^{-15}
168	22.57	2.081	-2.081		1.16×10^{-60}	1.76×10^{-25}
169	35.08	2.025	-2.025		6.10×10^{-57}	1.06×10^{-22}
170	3.31	2.017	-2.017		1.64×10^{-58}	2.07×10^{-24}
171	28.53	2.004	-2.004		6.65×10^{-56}	5.14×10^{-22}
172	28.88	1.880	-1.880		8.28×10^{-49}	5.05×10^{-17}
173	39.08	1.827	-1.827		1.20×10^{-45}	9.32×10^{-15}
174	55.11	1.866	-1.866		1.68×10^{-47}	6.05×10^{-16}
175	24.20	1.882	-1.882		4.18×10^{-49}	2.82×10^{-17}
176	15.33	2.000	-2.000		3.48×10^{-56}	2.27×10^{-22}
177	83.66	1.841	-1.841		9.74×10^{-46}	1.30×10^{-14}
178	59.74	1.950	-1.950		4.06×10^{-52}	3.78×10^{-19}
179	20.48	1.872	-1.872		1.15×10^{-48}	5.16×10^{-17}
180	53.82	1.980	-1.980		5.73×10^{-54}	1.76×10^{-20}
181	30.18	1.863	-1.863		7.71×10^{-48}	2.44×10^{-16}
182	36.03	1.750	-1.750		1.30×10^{-41}	5.00×10^{-12}
183	6.12	1.866	-1.866		2.25×10^{-49}	7.93×10^{-18}
184	21.70	1.790	-1.790		3.61×10^{-44}	6.62×10^{-14}
185	12.13	1.858	-1.858		2.26×10^{-48}	5.96×10^{-17}
186	70.80	1.983	-1.983		6.58×10^{-54}	2.27×10^{-20}
187	2.04	1.931	-1.931		5.56×10^{-54}	2.49×10^{-21}
188	8.43	2.094	-2.094		2.35×10^{-62}	6.14×10^{-27}
189	100.42	1.933	-1.933		1.03×10^{-50}	4.99×10^{-18}
190	53.00	1.897	-1.897		3.15×10^{-49}	3.73×10^{-17}

191	64.25	1.760	-1.760		1.12×10^{-41}	6.56×10^{-12}
192	0.01	2.044	-2.044		4.58×10^{-65}	1.66×10^{-30}
193	90.15	2.029	-2.029		2.13×10^{-56}	4.42×10^{-22}
194	38.96	1.963	-1.963		2.83×10^{-53}	4.50×10^{-20}
195	7.95	1.974	-1.974		2.93×10^{-55}	7.00×10^{-22}
196	35.84	1.775	-1.775		5.60×10^{-43}	5.90×10^{-13}
197	49.83	1.839	-1.839		4.27×10^{-46}	5.33×10^{-15}
198	40.97	1.859	-1.859		2.46×10^{-47}	6.58×10^{-16}
199	43.77	1.914	-1.914		2.31×10^{-50}	5.37×10^{-18}
200	86.41	1.999	-1.999		1.16×10^{-54}	7.43×10^{-21}
201	10.49	1.897	-1.897		1.13×10^{-50}	1.37×10^{-18}
202	21.49	1.956	-1.956		2.29×10^{-53}	2.73×10^{-20}
203	46.04	2.156	-2.156		1.17×10^{-64}	3.33×10^{-28}
204	15.64	1.964	-1.964		4.14×10^{-54}	6.76×10^{-21}
205	58.44	1.987	-1.987		2.73×10^{-54}	1.09×10^{-20}
206	8.61	2.121	-2.121		6.26×10^{-64}	4.51×10^{-28}
207	8.11	1.982	-1.982		1.00×10^{-55}	3.31×10^{-22}
208	35.92	1.824	-1.824		1.53×10^{-45}	1.04×10^{-14}
209	4.07	1.862	-1.862		1.59×10^{-49}	4.85×10^{-18}
210	53.88	1.850	-1.850		1.24×10^{-46}	2.39×10^{-15}
211	20.19	2.041	-2.041		2.11×10^{-58}	6.96×10^{-24}
212	55.39	2.096	-2.096		8.76×10^{-61}	2.38×10^{-25}
213	14.59	1.951	-1.951		2.14×10^{-53}	2.07×10^{-20}
214	62.50	1.846	-1.846		2.76×10^{-46}	4.54×10^{-15}
215	8.15	2.171	-2.171		3.92×10^{-67}	2.04×10^{-30}
216	7.64	2.055	-2.055		4.69×10^{-60}	2.62×10^{-25}
217	53.71	1.960	-1.960		8.08×10^{-53}	1.14×10^{-19}
218	13.68	1.930	-1.930		2.87×10^{-52}	1.23×10^{-19}
219	30.12	1.932	-1.932		1.07×10^{-51}	4.96×10^{-19}
220	58.73	2.006	-2.006		2.12×10^{-55}	1.78×10^{-21}
221	38.46	1.913	-1.913		2.04×10^{-50}	4.55×10^{-18}
222	48.77	1.876	-1.876		3.91×10^{-48}	2.04×10^{-16}
223	17.50	1.822	-1.822		4.51×10^{-46}	2.88×10^{-15}
224	42.22	1.844	-1.844		1.72×10^{-46}	2.56×10^{-15}
225	3.87	1.902	-1.902		9.02×10^{-52}	1.29×10^{-19}
226	46.81	1.893	-1.893		4.11×10^{-49}	4.16×10^{-17}
227	28.46	1.970	-1.970		6.13×10^{-54}	1.27×10^{-20}
228	1.97	1.913	-1.913		5.53×10^{-53}	1.22×10^{-20}
229	19.64	2.089	-2.089		2.67×10^{-61}	5.68×10^{-26}

230	16.31	1.906	-1.906		9.03×10^{-51}	1.53×10^{-18}
231	98.91	1.998	-1.998		1.92×10^{-54}	1.15×10^{-20}
232	50.42	2.039	-2.039		1.79×10^{-57}	5.40×10^{-23}
233	79.94	1.901	-1.901		4.40×10^{-49}	6.04×10^{-17}
234	34.14	1.872	-1.872		3.29×10^{-48}	1.46×10^{-16}
235	41.90	1.865	-1.865		1.12×10^{-47}	3.87×10^{-16}
236	39.13	1.827	-1.827		1.22×10^{-45}	9.46×10^{-15}
237	76.70	1.835	-1.835		1.67×10^{-45}	1.78×10^{-14}
238	14.17	2.065	-2.065		3.88×10^{-60}	3.25×10^{-25}
239	84.89	1.990	-1.990		3.98×10^{-54}	1.77×10^{-20}
240	15.63	1.862	-1.862		2.30×10^{-48}	7.04×10^{-17}
241	12.02	2.068	-2.068		1.94×10^{-60}	1.80×10^{-25}
242	11.04	1.952	-1.952		1.04×10^{-53}	1.05×10^{-20}
243	33.67	1.995	-1.995		2.95×10^{-55}	1.63×10^{-21}
244	24.87	1.958	-1.958		2.22×10^{-53}	2.90×10^{-20}
245	65.60	1.863	-1.863		3.48×10^{-47}	1.12×10^{-15}
246	42.99	1.868	-1.868		7.97×10^{-48}	3.10×10^{-16}
247	4.65	2.071	-2.071		1.95×10^{-61}	2.02×10^{-26}
248	27.72	1.969	-1.969		7.06×10^{-54}	1.38×10^{-20}
249	47.38	1.876	-1.876		3.79×10^{-48}	1.97×10^{-16}
250	73.11	1.988	-1.988		4.02×10^{-54}	1.63×10^{-20}
251	127.09	1.686	-1.686		3.06×10^{-37}	9.79×10^{-9}
252	5.08	2.005	-2.005		1.84×10^{-57}	1.48×10^{-23}
253	70.54	2.027	-2.027		1.85×10^{-56}	3.48×10^{-22}
254	0.34	1.848	-1.848		6.40×10^{-51}	1.14×10^{-19}
255	35.82	1.884	-1.884		7.55×10^{-49}	5.40×10^{-17}
256	16.44	1.952	-1.952		2.20×10^{-53}	2.26×10^{-20}
257	37.82	1.933	-1.933		1.38×10^{-51}	6.83×10^{-19}
258	126.51	1.903	-1.903		8.15×10^{-49}	1.22×10^{-16}
259	34.48	2.075	-2.075		5.58×10^{-60}	6.94×10^{-25}
260	9.17	1.906	-1.906		2.78×10^{-51}	4.76×10^{-19}
261	45.31	1.999	-1.999		3.16×10^{-55}	2.03×10^{-21}
262	43.10	1.980	-1.980		3.59×10^{-54}	1.11×10^{-20}
263	36.30	2.067	-2.067		1.87×10^{-59}	1.70×10^{-24}
264	10.83	1.732	-1.732		9.37×10^{-42}	1.83×10^{-12}
265	34.61	2.016	-2.016		1.99×10^{-56}	2.44×10^{-22}
266	4.97	1.990	-1.990		1.35×10^{-56}	6.01×10^{-23}
267	24.86	1.821	-1.821		1.01×10^{-45}	6.25×10^{-15}
268	29.36	1.894	-1.894		1.46×10^{-49}	1.53×10^{-17}

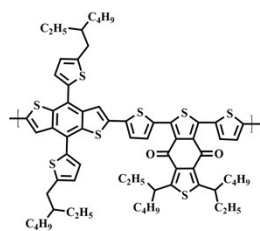
269	42.08	2.087	-2.087		1.70×10^{-60}	3.30×10^{-25}
270	64.95	1.908	-1.908		1.18×10^{-49}	2.12×10^{-17}
271	39.95	1.815	-1.815		5.11×10^{-45}	2.56×10^{-14}
272	23.66	2.036	-2.036		6.35×10^{-58}	1.68×10^{-23}
273	1.05	2.008	-2.008		5.03×10^{-59}	4.59×10^{-25}
274	53.75	2.053	-2.053		3.11×10^{-58}	1.60×10^{-23}
275	30.86	2.045	-2.045		3.04×10^{-58}	1.15×10^{-23}
276	48.62	1.845	-1.845		1.93×10^{-46}	3.04×10^{-15}
277	21.11	1.945	-1.945		9.47×10^{-53}	7.33×10^{-20}
278	89.87	2.050	-2.050		1.35×10^{-57}	6.14×10^{-23}
279	64.46	1.910	-1.910		8.01×10^{-50}	1.61×10^{-17}
280	15.71	1.873	-1.873		5.46×10^{-49}	2.61×10^{-17}
281	72.35	1.962	-1.962		1.12×10^{-52}	1.71×10^{-19}
282	13.56	1.836	-1.836		4.33×10^{-47}	4.90×10^{-16}
283	65.04	1.968	-1.968		4.31×10^{-53}	8.17×10^{-20}
284	21.95	1.829	-1.829		2.79×10^{-46}	2.38×10^{-15}
285	71.66	2.086	-2.086		5.22×10^{-60}	9.97×10^{-25}
286	45.16	1.915	-1.915		2.16×10^{-50}	5.21×10^{-18}
287	23.05	1.842	-1.842		6.13×10^{-47}	8.65×10^{-16}
288	8.44	1.616	-1.616		3.76×10^{-36}	8.11×10^{-9}
289	39.88	1.712	-1.712		1.41×10^{-39}	1.25×10^{-10}
290	29.35	2.040	-2.040		5.10×10^{-58}	1.62×10^{-23}
291	8.64	2.052	-2.052		8.42×10^{-60}	4.28×10^{-25}
292	80.57	1.969	-1.969		5.83×10^{-53}	1.15×10^{-19}
293	1.62	2.017	-2.017		3.72×10^{-59}	4.77×10^{-25}
294	16.06	1.766	-1.766		3.69×10^{-43}	2.65×10^{-13}
295	18.15	2.182	-2.182		3.95×10^{-67}	3.16×10^{-30}
296	4.52	2.003	-2.003		2.02×10^{-57}	1.48×10^{-23}
297	94.73	2.004	-2.004		7.52×10^{-55}	5.77×10^{-21}
298	21.80	2.057	-2.057		2.74×10^{-59}	1.69×10^{-24}
299	9.79	1.967	-1.967		1.09×10^{-54}	2.00×10^{-21}
300	41.48	1.927	-1.927		3.94×10^{-51}	1.50×10^{-18}
301	3.90	1.909	-1.909		3.59×10^{-52}	6.80×10^{-20}
302	11.79	2.107	-2.107		8.12×10^{-63}	3.43×10^{-27}
303	0.83	1.995	-1.995		1.87×10^{-58}	1.02×10^{-24}
304	89.68	1.846	-1.846		5.73×10^{-46}	9.40×10^{-15}
305	2.22	1.888	-1.888		1.77×10^{-51}	1.47×10^{-19}
306	81.84	2.103	-2.103		6.33×10^{-61}	2.34×10^{-25}
307	31.07	1.992	-1.992		4.26×10^{-55}	2.02×10^{-21}

308	45.35	2.059	-2.059		9.93×10^{-59}	6.41×10^{-24}
309	8.78	1.792	-1.792		4.66×10^{-45}	9.21×10^{-15}
310	51.82	1.891	-1.891		6.45×10^{-49}	6.06×10^{-17}
311	51.74	2.010	-2.010		9.53×10^{-56}	9.36×10^{-22}
312	22.38	1.800	-1.800		1.04×10^{-44}	2.89×10^{-14}
313	81.95	1.879	-1.879		7.72×10^{-48}	4.51×10^{-16}
314	2.84	2.055	-2.055		6.53×10^{-61}	3.65×10^{-26}
315	20.31	1.825	-1.825		4.08×10^{-46}	2.95×10^{-15}
316	44.78	1.675	-1.675		1.29×10^{-37}	2.74×10^{-9}
317	23.70	1.964	-1.964		9.26×10^{-54}	1.52×10^{-20}
318	8.24	2.055	-2.055		5.74×10^{-60}	3.17×10^{-25}
319	10.62	2.029	-2.029		3.24×10^{-58}	6.56×10^{-24}
320	23.59	2.124	-2.124		2.88×10^{-63}	2.37×10^{-27}
321	67.96	2.081	-2.081		9.90×10^{-60}	1.53×10^{-24}
322	38.14	1.969	-1.969		1.26×10^{-53}	2.51×10^{-20}
323	41.09	1.940	-1.940		6.75×10^{-52}	4.33×10^{-19}
324	78.06	1.806	-1.806		6.06×10^{-44}	2.12×10^{-13}
325	42.94	1.942	-1.942		5.73×10^{-52}	3.96×10^{-19}
326	41.86	1.868	-1.868		7.70×10^{-48}	2.98×10^{-16}
327	48.86	1.938	-1.938		1.22×10^{-51}	7.30×10^{-19}
328	33.77	1.959	-1.959		3.73×10^{-53}	5.02×10^{-20}
329	16.03	1.940	-1.940		1.01×10^{-52}	6.50×10^{-20}
330	38.68	1.945	-1.945		3.19×10^{-52}	2.47×10^{-19}
331	31.08	1.956	-1.956		4.91×10^{-53}	5.80×10^{-20}
332	24.25	1.953	-1.953		4.53×10^{-53}	4.74×10^{-20}
333	35.13	2.092	-2.092		6.13×10^{-61}	1.43×10^{-25}
334	28.90	2.260	-2.260		1.03×10^{-71}	1.72×10^{-33}
335	70.09	1.872	-1.872		1.27×10^{-47}	5.80×10^{-16}
336	45.03	2.036	-2.036		2.10×10^{-57}	5.68×10^{-23}
337	43.62	2.067	-2.067		2.88×10^{-59}	2.58×10^{-24}
338	36.24	2.036	-2.036		1.33×10^{-57}	3.62×10^{-23}
339	96.24	1.815	-1.815		3.25×10^{-44}	1.58×10^{-13}
340	4.27	1.936	-1.936		1.26×10^{-53}	6.86×10^{-21}
341	12.30	2.052	-2.052		1.89×10^{-59}	9.33×10^{-25}
342	16.73	2.080	-2.080		6.73×10^{-61}	1.01×10^{-25}
343	65.37	1.850	-1.850		1.92×10^{-46}	3.63×10^{-15}
344	1.07	2.099	-2.099		2.04×10^{-64}	6.33×10^{-29}
345	67.94	1.958	-1.958		1.82×10^{-52}	2.31×10^{-19}
346	9.68	2.015	-2.015		1.84×10^{-57}	2.14×10^{-23}

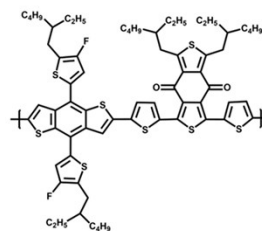
347	2.02	1.929	-1.929		6.75×10^{-54}	2.84×10^{-21}
348	75.19	1.824	-1.824		6.08×10^{-45}	4.28×10^{-14}
349	59.58	1.815	-1.815		1.24×10^{-44}	6.02×10^{-14}
350	4.29	1.993	-1.993		7.00×10^{-57}	3.47×10^{-23}
351	63.61	1.802	-1.802		6.58×10^{-44}	1.97×10^{-13}
352	20.68	1.770	-1.770		3.49×10^{-43}	3.00×10^{-13}
353	18.05	2.031	-2.031		6.70×10^{-58}	1.49×10^{-23}
354	19.98	2.043	-2.043		1.61×10^{-58}	5.70×10^{-24}
355	60.34	1.914	-1.914		4.43×10^{-50}	1.03×10^{-17}
356	16.61	1.887	-1.887		1.05×10^{-49}	8.59×10^{-18}
357	51.31	1.953	-1.953		1.92×10^{-52}	2.04×10^{-19}
358	75.95	2.115	-2.115		1.07×10^{-61}	6.21×10^{-26}
359	134.36	1.786	-1.786		2.10×10^{-42}	3.37×10^{-12}
360	41.20	1.852	-1.852		5.93×10^{-47}	1.21×10^{-15}
361	64.69	1.965	-1.965		6.63×10^{-53}	1.10×10^{-19}
362	58.94	2.015	-2.015		6.60×10^{-56}	7.77×10^{-22}
363	79.18	1.877	-1.877		8.62×10^{-48}	4.76×10^{-16}
364	18.47	2.192	-2.192		9.51×10^{-68}	1.13×10^{-30}
365	25.91	2.018	-2.018		7.89×10^{-57}	1.07×10^{-22}
366	4.85	1.967	-1.967		2.73×10^{-55}	4.98×10^{-22}
367	12.19	1.955	-1.955		8.91×10^{-54}	1.00×10^{-20}
368	81.77	1.904	-1.904		2.89×10^{-49}	4.56×10^{-17}
369	52.59	1.784	-1.784		4.14×10^{-43}	6.14×10^{-13}
370	26.08	1.997	-1.997		1.35×10^{-55}	8.09×10^{-22}
371	66.36	1.905	-1.905		1.78×10^{-49}	2.87×10^{-17}
372	18.32	1.916	-1.916		3.31×10^{-51}	8.15×10^{-19}
373	41.43	2.037	-2.037		1.52×10^{-57}	4.31×10^{-23}
374	15.23	2.116	-2.116		3.96×10^{-63}	2.35×10^{-27}
375	36.94	2.012	-2.012		3.86×10^{-56}	4.05×10^{-22}
Avg.	30.66 ± 25.51	1.954 ± 0.108	-1.954 ± 0.108	0.338	$3.63 \pm 51.8 \times 10^{-38}$	$1.75 \pm 23.3 \times 10^{-10}$

(a)

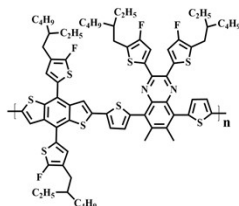
donors



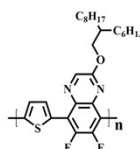
PBDB-T



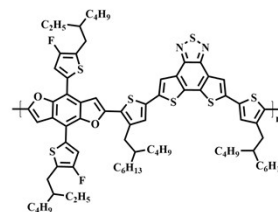
PM6



PBQ6

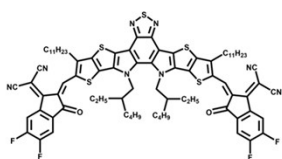


PTQ10

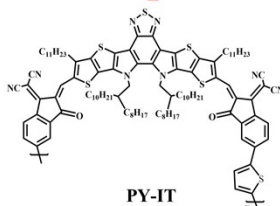


D18-Fu

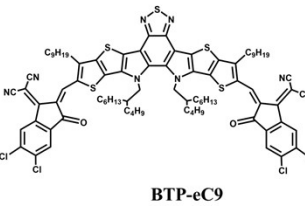
acceptors



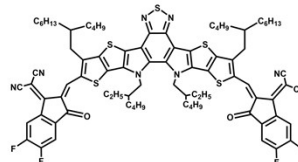
Y6



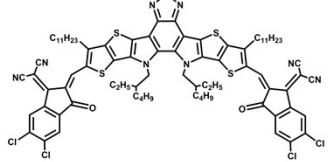
PY-IT



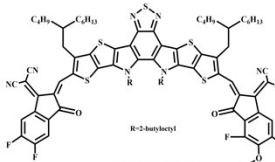
BTP-eC9



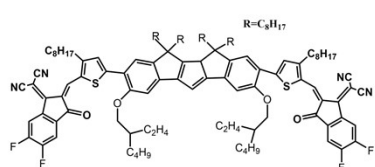
LB-BO



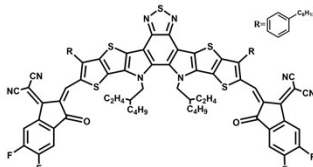
Y7



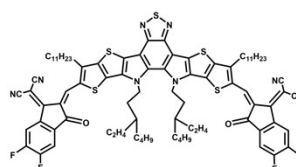
BTP-BO-4FO



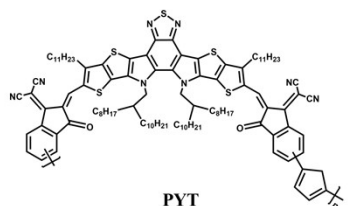
BO-C2C6-C8-2F



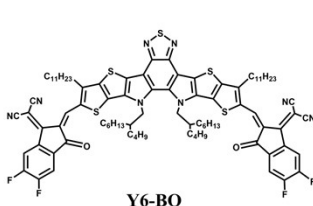
m-BTP-PhC6



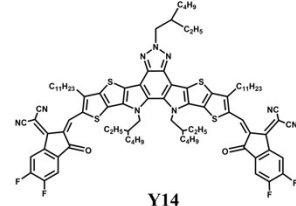
N3



PYT



Y6-BO



Y14

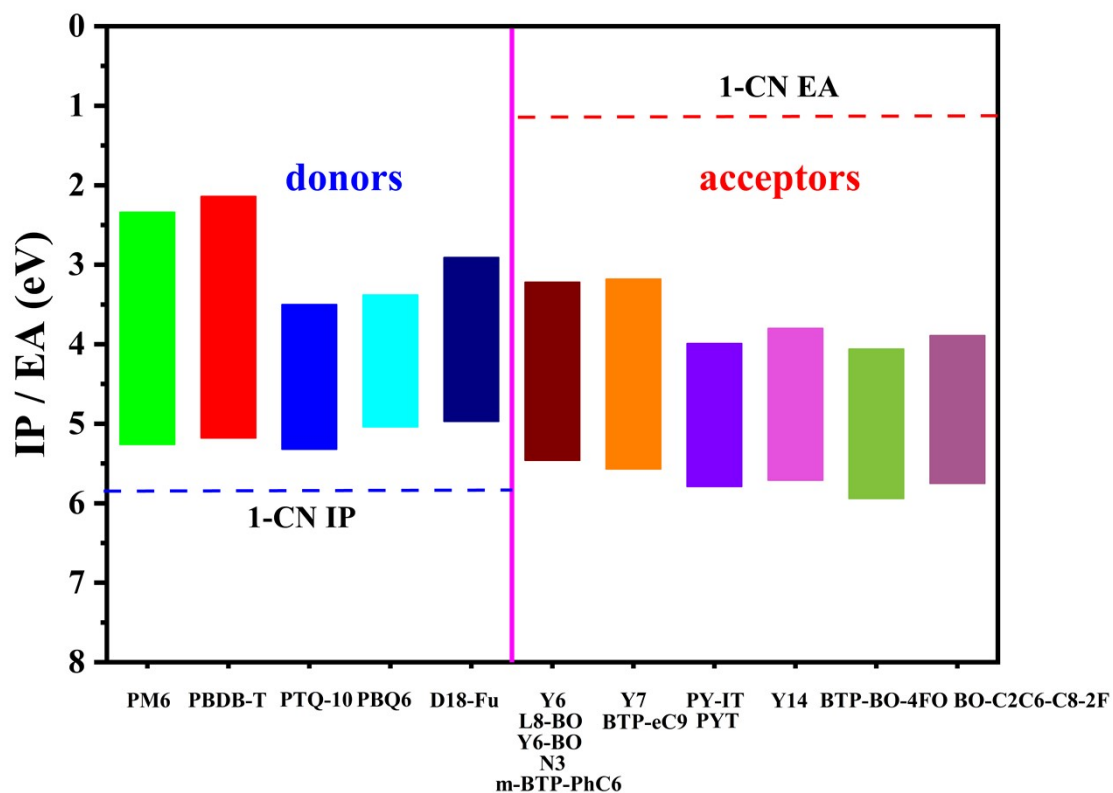


Figure S6. (a) Chemical structures of widely used PM6 and Y6 derivatives; and (b) their IP and EA values calculated at the PCM-tuned- ω B97XD/6-31G(d,p) level of theory, with respect to those of 1-CN. Some of the acceptor derivatives differ only in terms of their side chains in a way that does not modify their IP and EA values.

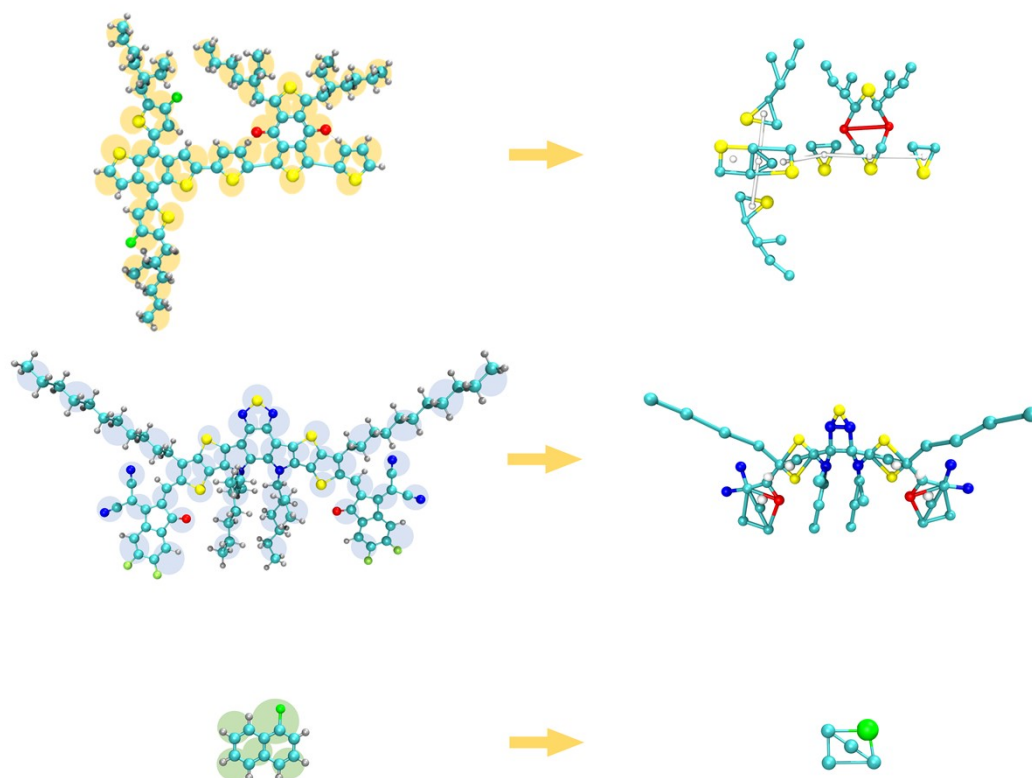


Figure S7. Illustration of going from all-atom to coarse-grained representations for PM6, Y6, and 1-CN.