

Supporting Information

Organic solar cells: Evolution of the morphological and electronic properties as a function of steric hindrance from the acceptor side groups

Ailing Yin,^a Ziwen Yu,^a Jingyi Ren,^a Jiacong Feng,^a Gao-Feng Han,^a Xing-You

Lang,^a Jean-Luc Brédas,^{b*} Tonghui Wang,^{a*} Qing Jiang^{a*}

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

b. 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

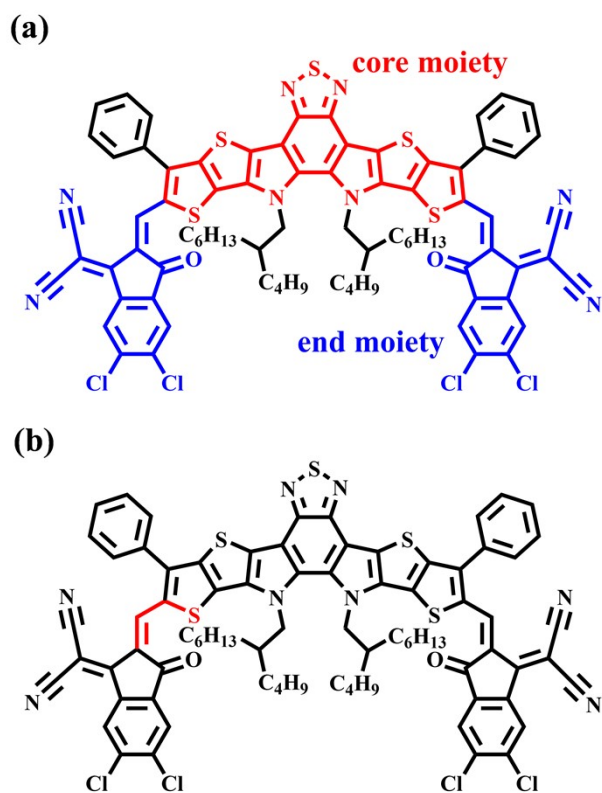


Figure S1. Illustrations of (a) the acceptor end and core moieties; and (b) the S-C-C-C dihedral angle used to evaluate the evolution of potential energies by rotating the end moiety with respect to the core moiety. Here, BTP-B is taken as an example.

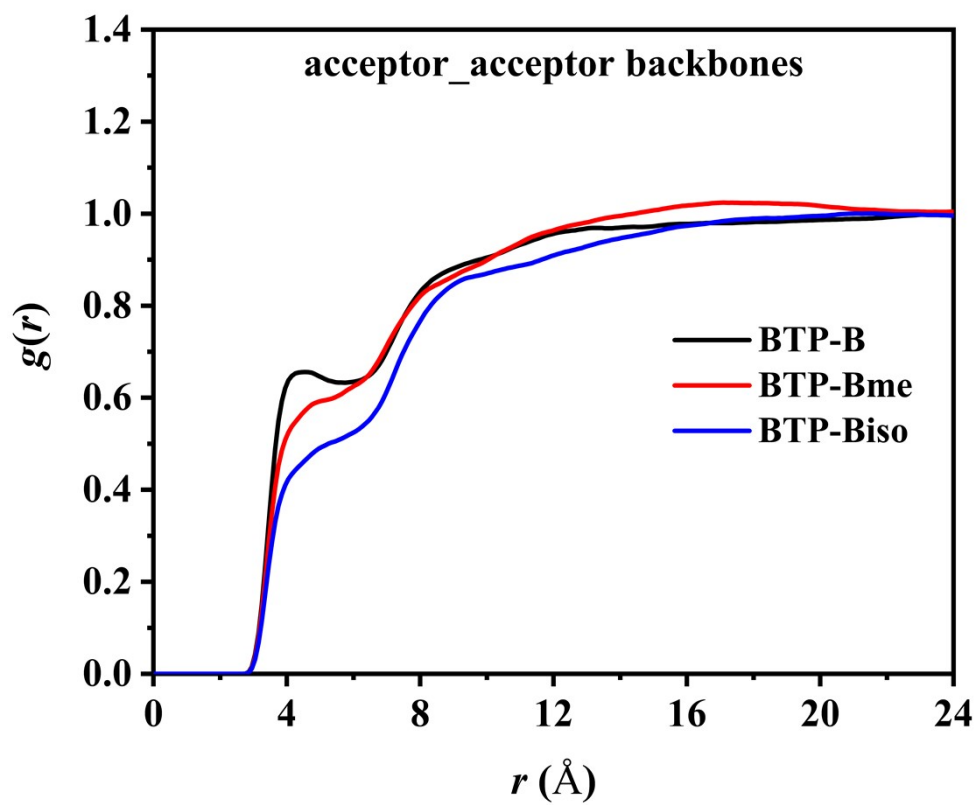


Figure S2. Radial distribution functions for the acceptor backbone-backbone interactions in the MD-simulated BTP-B, BTP-Bme, and BTP-Biso films.

Table S1. Average intermolecular interaction energies for the end_end, end_core, and core_core π - π packing pairs extracted from the MD-simulated BTP-B, BTP-Bme, and BTP-Biso films.

	BTP-B (kcal mol ⁻¹)	BTP-Bme (kcal mol ⁻¹)	BTP-Biso (kcal mol ⁻¹)
end_end	-15.2±5.9	-12.9±4.2	-12.7±3.6
end_core	-18.0±4.7	-16.4±3.7	-15.9±3.7
core_core	-25.9±4.3	-19.8±2.7	-
average	-17.2±6.2	-13.8±4.4	-13.0±3.8

Table S2. Reorganization energies estimated for the electron transfer processes in the BTP-B, BTP-Bme, and BTP-Biso films.

	λ_{intra} (meV)	λ_{inter} (meV)	λ_{total} (meV)
BTP-B	193.8	100.0	293.8
BTP-Bme	188.6		288.6
BTP-Biso	185.6		285.6

Table S3. Electron transfer rates, k_e , between acceptors for the 280 BTP-B_BTP-B, 216 BTP-Bme_BTP-Bme, and 125 BTP-Biso_BTP-Biso π - π packing pairs extracted from the MD-simulated BTP-B, BTP-Bme, and BTP-Biso films. Here, “small→large” means electron transfer from an acceptor with a smaller EA to one with a larger EA, and “large→small” means the reverse process.

BTP-B film						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	11.27	-0.001	0.001	0.294	2.27×10^{11}	2.23×10^{11}
2	3.09	-0.071	0.071		5.70×10^{10}	3.60×10^9
3	8.06	-0.199	0.199		1.49×10^{12}	6.48×10^8
4	11.01	-0.001	0.001		2.21×10^{11}	2.09×10^{11}
5	14.02	-0.041	0.041		7.33×10^{11}	1.48×10^{11}
6	0.26	-0.143	0.143		9.97×10^8	3.86×10^6
7	21.03	-0.053	0.053		2.01×10^{12}	2.54×10^{11}
8	5.63	-0.048	0.048		1.32×10^{11}	2.05×10^{10}
9	4.04	-0.020	0.020		4.23×10^{10}	1.92×10^{10}
10	0.25	-0.265	0.265		1.82×10^9	5.89×10^4
11	14.01	-0.026	0.026		5.62×10^{11}	2.06×10^{11}
12	1.36	-0.032	0.032		5.92×10^9	1.72×10^9
13	2.56	-0.008	0.008		1.37×10^{10}	9.88×10^9
14	1.36	-0.202	0.202		4.33×10^{10}	1.68×10^7
15	3.09	-0.005	0.005		1.87×10^{10}	1.53×10^{10}
16	11.34	-0.132	0.132		1.68×10^{12}	9.71×10^9
17	4.81	-0.171	0.171		4.34×10^{11}	5.67×10^8
18	1.78	-0.105	0.105		3.04×10^{10}	5.02×10^8
19	3.84	-0.106	0.106		1.41×10^{11}	2.32×10^9
20	14.64	-0.057	0.057		1.04×10^{12}	1.12×10^{11}
21	0.07	-0.078	0.078		2.91×10^7	1.40×10^6
22	15.12	-0.008	0.008		4.76×10^{11}	3.43×10^{11}
23	2.89	-0.154	0.154		1.34×10^{11}	3.40×10^8
24	5.64	-0.046	0.046		1.28×10^{11}	2.16×10^{10}
25	7.73	-0.011	0.011		1.30×10^{11}	8.58×10^{10}
26	9.76	-0.025	0.025		2.71×10^{11}	1.01×10^{11}
27	0.32	-0.028	0.028		3.04×10^8	1.01×10^8
28	14.22	-0.035	0.035		6.77×10^{11}	1.75×10^{11}
29	24.76	-0.007	0.007		1.25×10^{12}	9.37×10^{11}
30	8.46	-0.023	0.023		1.95×10^{11}	7.95×10^{10}
31	6.84	-0.026	0.026		1.35×10^{11}	4.88×10^{10}

32	10.68	-0.036	0.036		3.90×10^{11}	9.61×10^{10}
33	3.24	-0.032	0.032		3.34×10^{10}	9.71×10^9
34	0.83	-0.038	0.038		2.45×10^9	5.53×10^8
35	3.80	-0.136	0.136		1.96×10^{11}	9.72×10^8
36	5.01	-0.164	0.164		4.44×10^{11}	7.49×10^8
37	27.76	-0.068	0.068		4.40×10^{12}	3.12×10^{11}
38	9.51	-0.094	0.094		7.40×10^{11}	1.94×10^{10}
39	11.61	-0.012	0.012		3.00×10^{11}	1.89×10^{11}
40	3.06	-0.126	0.126		1.13×10^{11}	8.52×10^8
41	8.88	-0.064	0.064		4.23×10^{11}	3.51×10^{10}
42	4.16	-0.016	0.016		4.15×10^{10}	2.22×10^{10}
43	14.77	-0.035	0.035		7.36×10^{11}	1.87×10^{11}
44	1.02	-0.021	0.021		2.78×10^9	1.21×10^9
45	8.70	-0.061	0.061		3.89×10^{11}	3.61×10^{10}
46	3.22	-0.030	0.030		3.18×10^{10}	1.00×10^{10}
47	29.25	-0.030	0.030		2.62×10^{12}	8.27×10^{11}
48	9.11	-0.031	0.031		2.59×10^{11}	7.86×10^{10}
49	2.09	-0.011	0.011		9.63×10^9	6.22×10^9
50	5.63	-0.164	0.164		5.62×10^{11}	9.43×10^8
51	1.20	-0.094	0.094		1.20×10^{10}	3.03×10^8
52	2.00	-0.038	0.038		1.42×10^{10}	3.22×10^9
53	0.85	-0.005	0.005		1.39×10^9	1.17×10^9
54	0.14	-0.028	0.028		5.82×10^7	1.94×10^7
55	8.10	-0.145	0.145		9.70×10^{11}	3.50×10^9
56	2.81	-0.153	0.153		1.27×10^{11}	3.28×10^8
57	5.46	-0.108	0.108		2.92×10^{11}	4.45×10^9
58	5.52	-0.028	0.028		9.12×10^{10}	3.03×10^{10}
59	0.20	-0.055	0.055		1.82×10^8	2.13×10^7
60	1.48	-0.015	0.015		5.16×10^9	2.90×10^9
61	9.83	-0.033	0.033		3.11×10^{11}	8.77×10^{10}
62	9.79	-0.051	0.051		4.21×10^{11}	5.76×10^{10}
63	8.44	-0.032	0.032		2.28×10^{11}	6.52×10^{10}
64	0.07	-0.079	0.079		3.62×10^7	1.65×10^6
65	23.04	-0.003	0.003		9.97×10^{11}	8.86×10^{11}
66	5.10	-0.106	0.106		2.51×10^{11}	4.00×10^9
67	14.19	-0.096	0.096		1.71×10^{12}	4.04×10^{10}
68	3.00	-0.018	0.018		2.25×10^{10}	1.10×10^{10}
69	1.72	-0.038	0.038		1.04×10^{10}	2.42×10^9
70	42.68	-0.082	0.082		1.28×10^{13}	5.20×10^{11}

71	16.25	-0.101	0.101		2.40×10^{12}	4.61×10^{10}
72	2.22	-0.036	0.036		1.67×10^{10}	4.18×10^9
73	2.60	-0.095	0.095		5.66×10^{10}	1.40×10^9
74	5.42	-0.079	0.079		1.97×10^{11}	9.12×10^9
75	4.55	-0.063	0.063		1.10×10^{11}	9.39×10^9
76	5.88	-0.063	0.063		1.83×10^{11}	1.58×10^{10}
77	5.33	-0.084	0.084		2.04×10^{11}	7.79×10^9
78	11.95	-0.077	0.077		9.27×10^{11}	4.69×10^{10}
79	14.51	-0.088	0.088		1.59×10^{12}	5.25×10^{10}
80	17.80	-0.066	0.066		1.76×10^{12}	1.34×10^{11}
81	5.49	-0.218	0.218		7.71×10^{11}	1.57×10^8
82	0.16	-0.072	0.072		1.57×10^8	9.64×10^6
83	19.84	-0.074	0.074		2.46×10^{12}	1.38×10^{11}
84	5.76	-0.070	0.070		1.96×10^{11}	1.28×10^{10}
85	4.07	-0.091	0.091		1.32×10^{11}	3.75×10^9
86	23.52	-0.033	0.033		1.80×10^{12}	4.97×10^{11}
87	15.40	-0.130	0.130		3.03×10^{12}	1.89×10^{10}
88	2.18	-0.046	0.046		1.94×10^{10}	3.18×10^9
89	6.76	-0.247	0.247		1.32×10^{12}	8.75×10^7
90	14.37	-0.008	0.008		4.25×10^{11}	3.14×10^{11}
91	9.28	-0.154	0.154		1.40×10^{12}	3.45×10^9
92	3.72	-0.012	0.012		3.05×10^{10}	1.95×10^{10}
93	19.85	-0.078	0.078		2.59×10^{12}	1.26×10^{11}
94	1.99	-0.017	0.017		9.63×10^9	5.04×10^9
95	28.42	-0.049	0.049		3.41×10^{12}	5.13×10^{11}
96	27.40	-0.136	0.136		1.02×10^{13}	5.05×10^{10}
97	1.99	-0.051	0.051		1.76×10^{10}	2.37×10^9
98	5.35	-0.061	0.061		1.48×10^{11}	1.36×10^{10}
99	5.45	-0.052	0.052		1.33×10^{11}	1.73×10^{10}
100	18.12	-0.100	0.100		2.93×10^{12}	5.97×10^{10}
101	7.46	-0.058	0.058		2.71×10^{11}	2.88×10^{10}
102	8.75	-0.031	0.031		2.41×10^{11}	7.19×10^{10}
103	13.14	-0.030	0.030		5.29×10^{11}	1.67×10^{11}
104	19.11	-0.134	0.134		4.84×10^{12}	2.65×10^{10}
105	16.51	-0.010	0.010		5.83×10^{11}	3.98×10^{11}
106	0.71	-0.091	0.091		3.94×10^9	1.16×10^8
107	95.06	-0.078	0.078		5.95×10^{13}	2.89×10^{12}
108	9.23	-0.050	0.050		3.70×10^{11}	5.23×10^{10}
109	12.34	-0.073	0.073		9.31×10^{11}	5.51×10^{10}

110	22.28	-0.092	0.092		4.00×10^{12}	1.10×10^{11}
111	17.38	-0.067	0.067		1.70×10^{12}	1.25×10^{11}
112	2.92	-0.050	0.050		3.71×10^{10}	5.21×10^9
113	6.26	-0.092	0.092		3.16×10^{11}	8.71×10^9
114	0.78	-0.101	0.101		5.44×10^9	1.07×10^8
115	32.84	-0.121	0.121		1.25×10^{13}	1.10×10^{11}
116	29.71	-0.002	0.002		1.63×10^{12}	1.50×10^{12}
117	17.36	-0.191	0.191		6.59×10^{12}	3.85×10^9
118	7.66	-0.059	0.059		2.94×10^{11}	2.92×10^{10}
119	9.09	-0.102	0.102		7.57×10^{11}	1.42×10^{10}
120	15.36	-0.145	0.145		3.52×10^{12}	1.23×10^{10}
121	8.39	-0.043	0.043		2.72×10^{11}	5.05×10^{10}
122	10.84	-0.007	0.007		2.39×10^{11}	1.80×10^{11}
123	0.65	-0.113	0.113		4.39×10^9	5.47×10^7
124	17.81	-0.016	0.016		7.65×10^{11}	4.06×10^{11}
125	1.55	-0.028	0.028		7.21×10^9	2.38×10^9
126	8.57	-0.034	0.034		2.44×10^{11}	6.43×10^{10}
127	2.74	-0.091	0.091		5.99×10^{10}	1.71×10^9
128	9.50	-0.106	0.106		8.66×10^{11}	1.40×10^{10}
129	43.03	-0.009	0.009		3.90×10^{12}	2.74×10^{12}
130	19.80	-0.110	0.110		3.98×10^{12}	5.41×10^{10}
131	10.48	-0.029	0.029		3.32×10^{11}	1.08×10^{11}
132	6.17	-0.015	0.015		8.97×10^{10}	4.99×10^{10}
133	14.26	-0.040	0.040		7.48×10^{11}	1.56×10^{11}
134	29.29	-0.085	0.085		6.23×10^{12}	2.31×10^{11}
135	38.28	-0.029	0.029		4.44×10^{12}	1.44×10^{12}
136	1.72	-0.073	0.073		1.81×10^{10}	1.07×10^9
137	1.25	-0.089	0.089		1.20×10^{10}	3.80×10^8
138	13.67	-0.061	0.061		9.67×10^{11}	8.84×10^{10}
139	1.18	-0.007	0.007		2.82×10^9	2.18×10^9
140	4.35	-0.069	0.069		1.10×10^{11}	7.44×10^9
141	2.83	-0.050	0.050		3.49×10^{10}	4.91×10^9
142	3.96	-0.032	0.032		5.03×10^{10}	1.43×10^{10}
143	8.90	-0.016	0.016		1.90×10^{11}	1.02×10^{11}
144	10.15	-0.022	0.022		2.78×10^{11}	1.16×10^{11}
145	16.12	-0.080	0.080		1.78×10^{12}	7.76×10^{10}
146	57.55	-0.080	0.080		2.27×10^{13}	9.90×10^{11}
147	4.48	-0.069	0.069		1.17×10^{11}	7.91×10^9
148	9.08	-0.015	0.015		1.93×10^{11}	1.09×10^{11}

149	51.08	-0.120	0.120		2.96×10^{13}	2.79×10^{11}
150	3.67	-0.116	0.116		1.46×10^{11}	1.59×10^9
151	4.72	-0.128	0.128		2.78×10^{11}	1.90×10^9
152	14.24	-0.069	0.069		1.18×10^{12}	8.00×10^{10}
153	6.17	-0.003	0.003		7.15×10^{10}	6.37×10^{10}
154	0.91	-0.010	0.010		1.80×10^9	1.20×10^9
155	10.20	-0.043	0.043		4.00×10^{11}	7.51×10^{10}
156	1.33	-0.075	0.075		1.12×10^{10}	6.10×10^8
157	1.16	-0.316	0.316		4.10×10^{10}	1.84×10^5
158	52.03	-0.088	0.088		2.06×10^{13}	6.70×10^{11}
159	2.26	-0.059	0.059		2.55×10^{10}	2.55×10^9
160	0.22	-0.073	0.073		2.92×10^8	1.71×10^7
161	4.22	-0.048	0.048		7.38×10^{10}	1.16×10^{10}
162	0.72	-0.095	0.095		4.36×10^9	1.10×10^8
163	15.62	-0.014	0.014		5.63×10^{11}	3.28×10^{11}
164	36.48	-0.006	0.006		2.67×10^{12}	2.08×10^{12}
165	54.92	-0.072	0.072		1.82×10^{13}	1.11×10^{12}
166	23.23	-0.093	0.093		4.39×10^{12}	1.18×10^{11}
167	18.30	-0.075	0.075		2.11×10^{12}	1.15×10^{11}
168	21.96	-0.051	0.051		2.12×10^{12}	2.90×10^{11}
169	20.09	-0.069	0.069		2.33×10^{12}	1.60×10^{11}
170	11.01	-0.029	0.029		3.70×10^{11}	1.18×10^{11}
171	0.92	-0.072	0.072		5.07×10^9	3.12×10^8
172	2.61	-0.029	0.029		2.07×10^{10}	6.68×10^9
173	2.14	-0.004	0.004		8.75×10^9	7.52×10^9
174	16.73	-0.074	0.074		1.75×10^{12}	9.83×10^{10}
175	16.04	-0.022	0.022		6.85×10^{11}	2.94×10^{11}
176	12.02	-0.046	0.046		5.83×10^{11}	9.81×10^{10}
177	37.13	-0.003	0.003		2.59×10^{12}	2.30×10^{12}
178	57.33	-0.103	0.103		3.04×10^{13}	5.54×10^{11}
179	9.78	-0.122	0.122		1.11×10^{12}	9.71×10^9
180	8.31	-0.035	0.035		2.32×10^{11}	5.96×10^{10}
181	8.36	-0.048	0.048		2.92×10^{11}	4.51×10^{10}
182	7.66	-0.118	0.118		6.53×10^{11}	6.56×10^9
183	2.91	-0.243	0.243		2.41×10^{11}	1.88×10^7
184	2.83	-0.037	0.037		2.81×10^{10}	6.59×10^9
185	0.19	-0.119	0.119		3.95×10^8	3.80×10^6
186	1.15	-0.041	0.041		4.93×10^9	1.01×10^9
187	5.78	-0.155	0.155		5.48×10^{11}	1.29×10^9

188	1.81	-0.150	0.150		5.14×10^{10}	1.49×10^8
189	35.88	-0.086	0.086		9.57×10^{12}	3.32×10^{11}
190	12.54	-0.047	0.047		6.49×10^{11}	1.03×10^{11}
191	11.04	-0.028	0.028		3.62×10^{11}	1.22×10^{11}
192	21.20	-0.182	0.182		9.21×10^{12}	7.65×10^9
193	16.76	-0.022	0.022		7.56×10^{11}	3.17×10^{11}
194	44.98	-0.009	0.009		4.25×10^{12}	3.01×10^{12}
195	26.39	-0.021	0.021		1.84×10^{12}	8.04×10^{11}
196	4.41	-0.018	0.018		4.88×10^{10}	2.38×10^{10}
197	1.75	-0.121	0.121		3.55×10^{10}	3.14×10^8
198	15.34	-0.022	0.022		6.25×10^{11}	2.70×10^{11}
199	4.16	-0.008	0.008		3.60×10^{10}	2.60×10^{10}
200	16.56	-0.161	0.161		4.75×10^{12}	8.88×10^9
201	38.86	-0.154	0.154		2.44×10^{13}	6.17×10^{10}
202	0.30	-0.092	0.092		7.20×10^8	1.98×10^7
203	3.48	-0.070	0.070		7.16×10^{10}	4.61×10^9
204	12.40	-0.159	0.159		2.60×10^{12}	5.38×10^9
205	1.09	-0.004	0.004		2.27×10^9	1.95×10^9
206	5.10	-0.120	0.120		2.96×10^{11}	2.76×10^9
207	44.18	-0.002	0.002		3.63×10^{12}	3.30×10^{12}
208	34.08	-0.022	0.022		3.12×10^{12}	1.32×10^{12}
209	4.45	-0.002	0.002		3.65×10^{10}	3.37×10^{10}
210	8.18	-0.027	0.027		1.97×10^{11}	6.78×10^{10}
211	8.63	-0.007	0.007		1.50×10^{11}	1.16×10^{11}
212	8.90	-0.023	0.023		2.14×10^{11}	8.90×10^{10}
213	1.16	-0.060	0.060		6.85×10^9	6.58×10^8
214	16.66	-0.023	0.023		7.51×10^{11}	3.12×10^{11}
215	4.67	-0.009	0.009		4.61×10^{10}	3.22×10^{10}
216	50.55	-0.039	0.039		9.14×10^{12}	2.03×10^{12}
217	3.96	-0.035	0.035		5.23×10^{10}	1.36×10^{10}
218	7.06	-0.065	0.065		2.70×10^{11}	2.19×10^{10}
219	30.25	-0.077	0.077		6.00×10^{12}	2.95×10^{11}
220	1.82	-0.053	0.053		1.50×10^{10}	1.88×10^9
221	1.00	-0.038	0.038		3.55×10^9	8.23×10^8
222	13.34	-0.002	0.002		3.30×10^{11}	3.02×10^{11}
223	3.54	-0.068	0.068		7.18×10^{10}	5.07×10^9
224	49.48	-0.066	0.066		1.37×10^{13}	1.03×10^{12}
225	28.45	-0.085	0.085		5.90×10^{12}	2.16×10^{11}
226	19.57	-0.039	0.039		1.38×10^{12}	3.03×10^{11}

227	1.25	-0.023	0.023		4.25×10^9	1.72×10^9
228	0.75	-0.059	0.059		2.81×10^9	2.77×10^8
229	17.13	-0.132	0.132		3.81×10^{12}	2.24×10^{10}
230	52.86	-0.168	0.168		5.13×10^{13}	7.30×10^{10}
231	1.94	-0.058	0.058		1.84×10^{10}	1.93×10^9
232	15.29	-0.050	0.050		1.00×10^{12}	1.46×10^{11}
233	21.02	-0.017	0.017		1.07×10^{12}	5.62×10^{11}
234	8.66	-0.073	0.073		4.59×10^{11}	2.71×10^{10}
235	0.27	-0.107	0.107		6.93×10^8	1.06×10^7
236	8.63	-0.090	0.090		5.85×10^{11}	1.73×10^{10}
237	5.23	-0.078	0.078		1.80×10^{11}	8.71×10^9
238	3.88	-0.100	0.100		1.33×10^{11}	2.75×10^9
239	30.13	-0.021	0.021		2.37×10^{12}	1.06×10^{12}
240	15.73	-0.015	0.015		5.83×10^{11}	3.25×10^{11}
241	36.53	-0.096	0.096		1.13×10^{13}	2.70×10^{11}
242	15.03	-0.082	0.082		1.57×10^{12}	6.57×10^{10}
243	6.71	-0.088	0.088		3.42×10^{11}	1.11×10^{10}
244	4.16	-0.004	0.004		3.29×10^{10}	2.86×10^{10}
245	26.66	-0.022	0.022		1.89×10^{12}	8.16×10^{11}
246	16.34	-0.035	0.035		9.02×10^{11}	2.28×10^{11}
247	10.55	-0.077	0.077		7.28×10^{11}	3.61×10^{10}
248	38.26	-0.161	0.161		2.53×10^{13}	4.77×10^{10}
249	44.85	-0.100	0.100		1.80×10^{13}	3.62×10^{11}
250	14.05	-0.036	0.036		6.80×10^{11}	1.65×10^{11}
251	32.08	-0.080	0.080		7.04×10^{12}	3.08×10^{11}
252	41.49	-0.087	0.087		1.28×10^{13}	4.42×10^{11}
253	3.87	-0.089	0.089		1.15×10^{11}	3.64×10^9
254	0.25	-0.121	0.121		7.28×10^8	6.57×10^6
255	31.41	-0.076	0.076		6.32×10^{12}	3.31×10^{11}
256	5.87	-0.133	0.133		4.51×10^{11}	2.57×10^9
257	28.28	-0.018	0.018		1.98×10^{12}	9.93×10^{11}
258	1.11	-0.064	0.064		6.59×10^9	5.50×10^8
259	9.72	-0.153	0.153		1.52×10^{12}	3.89×10^9
260	3.87	-0.029	0.029		4.56×10^{10}	1.46×10^{10}
261	0.30	-0.037	0.037		3.15×10^8	7.34×10^7
262	5.85	-0.028	0.028		1.01×10^{11}	3.46×10^{10}
263	63.43	-0.033	0.033		1.31×10^{13}	3.61×10^{12}
264	12.19	-0.134	0.134		1.97×10^{12}	1.08×10^{10}
265	8.91	-0.052	0.052		3.55×10^{11}	4.67×10^{10}

266	6.15	-0.091	0.091		3.00×10^{11}	8.62×10^9	
267	1.43	-0.105	0.105		1.94×10^{10}	3.29×10^8	
268	1.65	-0.121	0.121		3.11×10^{10}	2.83×10^8	
269	41.66	-0.149	0.149		2.69×10^{13}	8.02×10^{10}	
270	23.51	-0.061	0.061		2.84×10^{12}	2.64×10^{11}	
271	19.17	-0.148	0.148		5.61×10^{12}	1.78×10^{10}	
272	8.81	-0.061	0.061		4.00×10^{11}	3.70×10^{10}	
273	18.38	-0.021	0.021		8.95×10^{11}	3.89×10^{11}	
274	8.41	-0.116	0.116		7.69×10^{11}	8.35×10^9	
275	1.92	-0.093	0.093		3.03×10^{10}	8.00×10^8	
276	12.97	-0.022	0.022		4.51×10^{11}	1.90×10^{11}	
277	6.46	-0.036	0.036		1.43×10^{11}	3.52×10^{10}	
278	7.40	-0.062	0.062		2.84×10^{11}	2.59×10^{10}	
279	5.86	-0.132	0.132		4.47×10^{11}	2.59×10^9	
280	25.38	-0.043	0.043		2.49×10^{12}	4.61×10^{11}	
Avg.	12.65± 13.75	-0.068± 0.052	0.068± 0.052		0.294	2.38± 6.54×10^{12}	2.02± 5.07×10^{11}

BTP-Bme film						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_c (eV)		λ_c (eV)	k_c (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	4.15	-0.052	0.052	0.289	8.09×10^{10}	1.08×10^{10}
2	4.04	-0.007	0.007		3.54×10^{10}	2.64×10^{10}
3	5.22	-0.018	0.018		7.18×10^{10}	3.58×10^{10}
4	4.45	-0.027	0.027		6.11×10^{10}	2.16×10^{10}
5	7.37	-0.151	0.151		8.94×10^{11}	2.54×10^9
6	13.15	-0.017	0.017		4.49×10^{11}	2.31×10^{11}
7	6.07	-0.012	0.012		8.75×10^{10}	5.45×10^{10}
8	8.25	-0.102	0.102		6.53×10^{11}	1.25×10^{10}
9	4.09	-0.041	0.041		6.62×10^{10}	1.34×10^{10}
10	7.24	-0.055	0.055		2.61×10^{11}	3.02×10^{10}
11	21.33	-0.004	0.004		9.33×10^{11}	7.84×10^{11}
12	7.04	-0.032	0.032		1.69×10^{11}	4.78×10^{10}
13	6.27	-0.049	0.049		1.76×10^{11}	2.65×10^{10}
14	4.84	-0.147	0.147		3.74×10^{11}	1.20×10^9
15	2.19	-0.057	0.057		2.43×10^{10}	2.68×10^9
16	6.08	-0.155	0.155		6.30×10^{11}	1.54×10^9
17	8.12	-0.071	0.071		4.19×10^{11}	2.60×10^{10}
18	0.78	-0.034	0.034		2.13×10^9	5.70×10^8
19	4.50	-0.067	0.067		1.20×10^{11}	9.01×10^9

20	14.92	-0.054	0.054		1.08×10^{12}	1.33×10^{11}
21	8.13	-0.023	0.023		1.91×10^{11}	7.84×10^{10}
22	10.74	-0.116	0.116		1.31×10^{12}	1.45×10^{10}
23	4.46	-0.106	0.106		2.02×10^{11}	3.27×10^9
24	3.33	-0.093	0.093		9.50×10^{10}	2.56×10^9
25	2.20	-0.176	0.176		9.81×10^{10}	1.05×10^8
26	3.96	-0.105	0.105		1.58×10^{11}	2.60×10^9
27	19.03	-0.120	0.120		4.33×10^{12}	4.07×10^{10}
28	11.98	-0.083	0.083		1.08×10^{12}	4.22×10^{10}
29	1.29	-0.044	0.044		6.86×10^9	1.26×10^9
30	8.95	-0.035	0.035		2.85×10^{11}	7.35×10^{10}
31	9.49	-0.079	0.079		6.36×10^{11}	2.97×10^{10}
32	0.92	-0.116	0.116		9.62×10^9	1.05×10^8
33	11.17	-0.065	0.065		7.25×10^{11}	5.69×10^{10}
34	1.64	-0.025	0.025		8.10×10^9	3.01×10^9
35	2.96	-0.172	0.172		1.74×10^{11}	2.13×10^8
36	1.43	-0.093	0.093		1.75×10^{10}	4.72×10^8
37	7.35	-0.101	0.101		5.16×10^{11}	1.01×10^{10}
38	0.16	-0.115	0.115		3.05×10^8	3.41×10^6
39	4.41	-0.078	0.078		1.37×10^{11}	6.45×10^9
40	9.17	-0.058	0.058		4.36×10^{11}	4.59×10^{10}
41	2.18	-0.058	0.058		2.47×10^{10}	2.59×10^9
42	5.66	-0.026	0.026		9.81×10^{10}	3.52×10^{10}
43	12.45	-0.028	0.028		4.85×10^{11}	1.66×10^{11}
44	5.14	-0.008	0.008		5.74×10^{10}	4.28×10^{10}
45	20.45	-0.032	0.032		1.41×10^{12}	4.09×10^{11}
46	3.13	-0.100	0.100		9.28×10^{10}	1.86×10^9
47	8.62	-0.041	0.041		2.95×10^{11}	5.92×10^{10}
48	5.15	-0.016	0.016		6.78×10^{10}	3.62×10^{10}
49	3.45	-0.057	0.057		6.05×10^{10}	6.68×10^9
50	5.81	-0.074	0.074		2.24×10^{11}	1.24×10^{10}
51	10.88	-0.090	0.090		9.79×10^{11}	2.93×10^{10}
52	6.58	-0.051	0.051		2.02×10^{11}	2.75×10^{10}
53	2.85	-0.067	0.067		4.87×10^{10}	3.52×10^9
54	2.03	-0.073	0.073		2.71×10^{10}	1.55×10^9
55	1.49	-0.045	0.045		9.32×10^9	1.64×10^9
56	33.91	-0.008	0.008		2.52×10^{12}	1.85×10^{12}
57	18.21	-0.063	0.063		1.87×10^{12}	1.59×10^{11}
58	0.68	-0.023	0.023		1.34×10^9	5.40×10^8

59	11.14	-0.031	0.031		4.15×10^{11}	1.23×10^{11}
60	12.26	-0.011	0.011		3.49×10^{11}	2.28×10^{11}
61	17.48	-0.115	0.115		3.47×10^{12}	3.88×10^{10}
62	17.85	-0.023	0.023		9.13×10^{11}	3.80×10^{11}
63	0.20	-0.037	0.037		1.51×10^8	3.54×10^7
64	32.55	-0.022	0.022		3.03×10^{12}	1.27×10^{12}
65	16.21	-0.023	0.023		7.62×10^{11}	3.09×10^{11}
66	1.03	-0.051	0.051		5.01×10^9	6.77×10^8
67	2.96	-0.024	0.024		2.59×10^{10}	1.01×10^{10}
68	9.39	-0.046	0.046		3.76×10^{11}	6.37×10^{10}
69	5.09	-0.005	0.005		5.37×10^{10}	4.42×10^{10}
70	5.51	-0.039	0.039		1.16×10^{11}	2.53×10^{10}
71	11.61	-0.002	0.002		2.61×10^{11}	2.46×10^{11}
72	2.20	-0.014	0.014		1.18×10^{10}	6.85×10^9
73	1.40	-0.011	0.011		4.53×10^9	2.99×10^9
74	38.98	-0.025	0.025		4.53×10^{12}	1.73×10^{12}
75	3.95	-0.011	0.011		3.60×10^{10}	2.37×10^{10}
76	13.77	-0.101	0.101		1.80×10^{12}	3.56×10^{10}
77	1.18	-0.032	0.032		4.73×10^9	1.34×10^9
78	10.59	-0.146	0.146		1.76×10^{12}	5.99×10^9
79	34.37	-0.005	0.005		2.44×10^{12}	2.02×10^{12}
80	7.39	-0.031	0.031		1.82×10^{11}	5.42×10^{10}
81	0.78	-0.002	0.002		1.19×10^9	1.08×10^9
82	3.51	-0.027	0.027		3.85×10^{10}	1.32×10^{10}
83	4.70	-0.074	0.074		1.45×10^{11}	8.26×10^9
84	24.98	-0.142	0.142		9.43×10^{12}	3.76×10^{10}
85	3.88	-0.061	0.061		8.26×10^{10}	7.55×10^9
86	33.70	-0.002	0.002		2.23×10^{12}	2.05×10^{12}
87	17.41	-0.046	0.046		1.30×10^{12}	2.17×10^{11}
88	9.82	-0.109	0.109		1.02×10^{12}	1.44×10^{10}
89	6.33	-0.033	0.033		1.39×10^{11}	3.79×10^{10}
90	0.26	-0.097	0.097		5.90×10^8	1.34×10^7
91	19.98	-0.023	0.023		1.15×10^{12}	4.72×10^{11}
92	4.76	-0.006	0.006		4.79×10^{10}	3.78×10^{10}
93	18.57	-0.036	0.036		1.26×10^{12}	3.06×10^{11}
94	0.25	-0.004	0.004		1.28×10^8	1.09×10^8
95	18.85	-0.093	0.093		3.04×10^{12}	8.24×10^{10}
96	0.86	-0.026	0.026		2.28×10^9	8.26×10^8
97	2.96	-0.029	0.029		2.83×10^{10}	9.01×10^9

98	3.84	-0.063	0.063		8.33×10^{10}	7.08×10^9
99	13.88	-0.070	0.070		1.21×10^{12}	7.78×10^{10}
100	4.69	-0.130	0.130		2.93×10^{11}	1.86×10^9
101	2.45	-0.127	0.127		7.78×10^{10}	5.54×10^8
102	11.81	-0.039	0.039		5.30×10^{11}	1.17×10^{11}
103	27.60	-0.006	0.006		1.61×10^{12}	1.28×10^{12}
104	1.92	-0.041	0.041		1.46×10^{10}	2.95×10^9
105	10.15	-0.069	0.069		6.33×10^{11}	4.31×10^{10}
106	1.92	-0.010	0.010		8.40×10^9	5.71×10^9
107	10.10	-0.048	0.048		4.50×10^{11}	7.02×10^{10}
108	8.08	-0.054	0.054		3.20×10^{11}	3.85×10^{10}
109	52.55	-0.204	0.204		6.77×10^{13}	2.41×10^{10}
110	6.79	-0.004	0.004		9.40×10^{10}	8.00×10^{10}
111	5.23	-0.152	0.152		4.55×10^{11}	1.23×10^9
112	2.04	-0.031	0.031		1.40×10^{10}	4.12×10^9
113	10.67	-0.002	0.002		2.22×10^{11}	2.06×10^{11}
114	14.21	-0.142	0.142		3.06×10^{12}	1.21×10^{10}
115	0.89	-0.154	0.154		1.33×10^{10}	3.34×10^7
116	1.54	-0.042	0.042		9.57×10^9	1.84×10^9
117	23.47	-0.126	0.126		7.04×10^{12}	5.24×10^{10}
118	9.52	-0.014	0.014		2.21×10^{11}	1.30×10^{11}
119	1.16	-0.075	0.075		8.98×10^9	4.88×10^8
120	10.06	-0.053	0.053		4.88×10^{11}	6.12×10^{10}
121	3.06	-0.118	0.118		1.09×10^{11}	1.12×10^9
122	13.55	-0.039	0.039		6.96×10^{11}	1.55×10^{11}
123	12.16	-0.024	0.024		4.33×10^{11}	1.72×10^{11}
124	7.95	-0.104	0.104		6.23×10^{11}	1.10×10^{10}
125	1.78	-0.139	0.139		4.67×10^{10}	2.05×10^8
126	8.91	-0.064	0.064		4.52×10^{11}	3.76×10^{10}
127	2.84	-0.051	0.051		3.75×10^{10}	5.15×10^9
128	3.81	-0.010	0.010		3.30×10^{10}	2.25×10^{10}
129	6.18	-0.032	0.032		1.29×10^{11}	3.72×10^{10}
130	26.60	-0.039	0.039		2.70×10^{12}	5.94×10^{11}
131	15.63	-0.044	0.044		1.01×10^{12}	1.85×10^{11}
132	30.50	-0.044	0.044		3.88×10^{12}	6.92×10^{11}
133	0.17	-0.159	0.159		4.98×10^8	1.04×10^6
134	10.48	-0.148	0.148		1.77×10^{12}	5.46×10^9
135	0.13	-0.005	0.005		3.41×10^7	2.81×10^7
136	14.14	-0.051	0.051		9.32×10^{11}	1.27×10^{11}

137	50.10	-0.021	0.021		6.97×10^{12}	3.11×10^{12}
138	10.04	-0.018	0.018		2.68×10^{11}	1.31×10^{11}
139	8.00	-0.047	0.047		2.79×10^{11}	4.48×10^{10}
140	3.85	-0.033	0.033		5.10×10^{10}	1.42×10^{10}
141	8.24	-0.152	0.152		1.13×10^{12}	3.03×10^9
142	5.46	-0.103	0.103		2.92×10^{11}	5.22×10^9
143	19.94	-0.008	0.008		8.75×10^{11}	6.35×10^{11}
144	12.26	-0.160	0.160		2.69×10^{12}	5.30×10^9
145	37.46	-0.127	0.127		1.83×10^{13}	1.28×10^{11}
146	13.29	-0.011	0.011		4.09×10^{11}	2.68×10^{11}
147	13.93	-0.013	0.013		4.65×10^{11}	2.83×10^{11}
148	23.16	-0.093	0.093		4.61×10^{12}	1.23×10^{11}
149	14.34	-0.135	0.135		2.88×10^{12}	1.53×10^{10}
150	11.08	-0.076	0.076		8.35×10^{11}	4.33×10^{10}
151	5.35	-0.071	0.071		1.82×10^{11}	1.13×10^{10}
152	7.19	-0.043	0.043		2.12×10^{11}	3.95×10^{10}
153	39.16	-0.048	0.048		6.75×10^{12}	1.06×10^{12}
154	5.72	-0.057	0.057		1.66×10^{11}	1.83×10^{10}
155	42.67	-0.049	0.049		8.23×10^{12}	1.21×10^{12}
156	7.02	-0.189	0.189		1.10×10^{12}	7.12×10^8
157	8.41	-0.051	0.051		3.30×10^{11}	4.49×10^{10}
158	3.46	-0.058	0.058		6.20×10^{10}	6.58×10^9
159	7.50	-0.066	0.066		3.28×10^{11}	2.56×10^{10}
160	18.25	-0.001	0.001		6.36×10^{11}	6.17×10^{11}
161	27.59	-0.157	0.157		1.33×10^{13}	2.93×10^{10}
162	10.46	-0.047	0.047		4.73×10^{11}	7.74×10^{10}
163	4.20	-0.063	0.063		9.84×10^{10}	8.56×10^9
164	6.21	-0.049	0.049		1.74×10^{11}	2.57×10^{10}
165	13.40	-0.040	0.040		7.02×10^{11}	1.46×10^{11}
166	18.97	-0.106	0.106		3.66×10^{12}	5.84×10^{10}
167	6.42	-0.062	0.062		2.29×10^{11}	2.02×10^{10}
168	8.05	-0.074	0.074		4.26×10^{11}	2.42×10^{10}
169	6.42	-0.113	0.113		4.54×10^{11}	5.58×10^9
170	0.78	-0.103	0.103		5.94×10^9	1.10×10^8
171	12.70	-0.280	0.280		5.02×10^{12}	9.33×10^7
172	3.86	-0.121	0.121		1.80×10^{11}	1.63×10^9
173	24.71	-0.007	0.007		1.31×10^{12}	1.01×10^{12}
174	28.10	-0.101	0.101		7.54×10^{12}	1.47×10^{11}
175	1.60	-0.014	0.014		6.32×10^9	3.62×10^9

176	7.83	-0.090	0.090		5.09×10^{11}	1.50×10^{10}
177	2.82	-0.040	0.040		3.06×10^{10}	6.55×10^9
178	24.90	-0.100	0.100		5.82×10^{12}	1.19×10^{11}
179	1.08	-0.140	0.140		1.73×10^{10}	7.44×10^7
180	4.22	-0.031	0.031		5.95×10^{10}	1.77×10^{10}
181	2.46	-0.020	0.020		1.67×10^{10}	7.55×10^9
182	1.93	-0.025	0.025		1.12×10^{10}	4.20×10^9
183	0.03	-0.007	0.007		1.46×10^6	1.12×10^6
184	11.18	-0.113	0.113		1.38×10^{12}	1.70×10^{10}
185	12.66	-0.093	0.093		1.37×10^{12}	3.72×10^{10}
186	1.99	-0.137	0.137		5.70×10^{10}	2.78×10^8
187	29.20	-0.045	0.045		3.59×10^{12}	6.26×10^{11}
188	28.63	-0.037	0.037		3.02×10^{12}	7.18×10^{11}
189	0.65	-0.010	0.010		9.68×10^8	6.63×10^8
190	0.54	-0.032	0.032		9.92×10^8	2.80×10^8
191	13.10	-0.016	0.016		4.39×10^{11}	2.33×10^{11}
192	2.19	-0.088	0.088		3.84×10^{10}	1.27×10^9
193	31.16	-0.030	0.030		3.19×10^{12}	9.84×10^{11}
194	26.00	-0.028	0.028		2.12×10^{12}	7.24×10^{11}
195	0.55	-0.014	0.014		7.48×10^8	4.32×10^8
196	3.60	-0.022	0.022		3.69×10^{10}	1.56×10^{10}
197	11.31	-0.079	0.079		9.12×10^{11}	4.16×10^{10}
198	34.11	-0.132	0.132		1.59×10^{13}	9.36×10^{10}
199	6.96	-0.044	0.044		2.02×10^{11}	3.60×10^{10}
200	0.45	-0.119	0.119		2.33×10^9	2.31×10^7
201	2.70	-0.097	0.097		6.58×10^{10}	1.51×10^9
202	0.08	-0.084	0.084		5.18×10^7	1.97×10^6
203	3.48	-0.104	0.104		1.19×10^{11}	2.11×10^9
204	23.18	-0.113	0.113		5.93×10^{12}	7.27×10^{10}
205	16.01	-0.002	0.002		5.03×10^{11}	4.62×10^{11}
206	10.62	-0.066	0.066		6.60×10^{11}	5.10×10^{10}
207	12.71	-0.097	0.097		1.47×10^{12}	3.32×10^{10}
208	7.30	-0.076	0.076		3.61×10^{11}	1.89×10^{10}
209	2.98	-0.046	0.046		3.81×10^{10}	6.35×10^9
210	4.19	-0.095	0.095		1.56×10^{11}	3.80×10^9
211	10.50	-0.115	0.115		1.25×10^{12}	1.41×10^{10}
212	1.48	-0.034	0.034		7.60×10^9	2.06×10^9
213	3.00	-0.133	0.133		1.24×10^{11}	7.05×10^8
214	2.86	-0.028	0.028		2.59×10^{10}	8.63×10^9

215	5.06	-0.045	0.045	0.289	1.07×10^{11}	1.89×10^{10}
216	32.65	-0.021	0.021		2.95×10^{12}	1.33×10^{12}
Avg.	10.09 ± 9.97	-0.064 ± 0.048	0.064 ± 0.048		$1.42 \pm 5.11 \times 10^{12}$	$1.57 \pm 3.97 \times 10^{11}$

BTP-Biso film						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	10.95	-0.066	0.066	0.286	7.25×10^{11}	5.61×10^{10}
2	2.53	-0.006	0.006		1.40×10^{10}	1.10×10^{10}
3	17.06	-0.015	0.015		7.60×10^{11}	4.16×10^{11}
4	0.91	-0.373	0.373		2.00×10^{10}	9.84×10^3
5	10.28	-0.006	0.006		2.31×10^{11}	1.83×10^{11}
6	2.61	-0.063	0.063		3.96×10^{10}	3.40×10^9
7	9.76	-0.028	0.028		3.10×10^{11}	1.05×10^{11}
8	1.55	-0.043	0.043		1.02×10^{10}	1.90×10^9
9	9.63	-0.036	0.036		3.50×10^{11}	8.53×10^{10}
10	1.38	-0.077	0.077		1.36×10^{10}	6.89×10^8
11	1.39	-0.066	0.066		1.17×10^{10}	9.00×10^8
12	14.33	-0.043	0.043		8.74×10^{11}	1.61×10^{11}
13	0.33	-0.042	0.042		4.42×10^8	8.71×10^7
14	4.66	-0.036	0.036		8.23×10^{10}	2.00×10^{10}
15	11.80	-0.053	0.053		6.97×10^{11}	8.69×10^{10}
16	16.71	-0.024	0.024		8.58×10^{11}	3.31×10^{11}
17	11.16	-0.122	0.122		1.56×10^{12}	1.37×10^{10}
18	8.80	-0.113	0.113		8.78×10^{11}	1.09×10^{10}
19	1.70	-0.178	0.178		6.11×10^{10}	6.08×10^7
20	14.91	-0.106	0.106		2.33×10^{12}	3.72×10^{10}
21	13.29	-0.050	0.050		8.38×10^{11}	1.19×10^{11}
22	7.65	-0.001	0.001		1.17×10^{11}	1.11×10^{11}
23	4.72	-0.090	0.090		1.89×10^{11}	5.75×10^9
24	5.08	-0.051	0.051		1.25×10^{11}	1.69×10^{10}
25	0.73	-0.069	0.069		3.40×10^9	2.29×10^8
26	7.93	-0.024	0.024		1.91×10^{11}	7.59×10^{10}
27	8.23	-0.045	0.045		2.97×10^{11}	5.11×10^{10}
28	0.93	-0.069	0.069		5.50×10^9	3.73×10^8
29	9.77	-0.011	0.011		2.31×10^{11}	1.49×10^{11}
30	18.73	-0.078	0.078		2.54×10^{12}	1.21×10^{11}
31	9.83	-0.028	0.028		3.17×10^{11}	1.06×10^{11}
32	1.10	-0.049	0.049		5.64×10^9	8.33×10^8

33	6.41	-0.129	0.129		5.59×10^{11}	3.71×10^9
34	6.72	-0.074	0.074		3.07×10^{11}	1.74×10^{10}
35	19.12	-0.117	0.117		4.35×10^{12}	4.61×10^{10}
36	17.13	-0.045	0.045		1.28×10^{12}	2.24×10^{11}
37	0.43	-0.046	0.046		8.09×10^8	1.33×10^8
38	45.96	-0.109	0.109		2.28×10^{13}	3.33×10^{11}
39	3.41	-0.041	0.041		4.77×10^{10}	9.62×10^9
40	5.83	-0.055	0.055		1.74×10^{11}	2.05×10^{10}
41	20.15	-0.056	0.056		2.10×10^{12}	2.41×10^{11}
42	9.87	-0.120	0.120		1.20×10^{12}	1.12×10^{10}
43	9.12	-0.074	0.074		5.66×10^{11}	3.21×10^{10}
44	4.38	-0.014	0.014		4.86×10^{10}	2.83×10^{10}
45	0.53	-0.083	0.083		2.16×10^9	8.54×10^7
46	3.23	-0.012	0.012		2.54×10^{10}	1.61×10^{10}
47	6.14	-0.015	0.015		9.78×10^{10}	5.43×10^{10}
48	16.93	-0.196	0.196		6.86×10^{12}	3.29×10^9
49	5.78	-0.123	0.123		4.25×10^{11}	3.56×10^9
50	17.30	-0.085	0.085		2.37×10^{12}	8.81×10^{10}
51	12.78	-0.021	0.021		4.72×10^{11}	2.08×10^{11}
52	9.99	-0.085	0.085		7.97×10^{11}	2.90×10^{10}
53	4.61	-0.001	0.001		4.22×10^{10}	4.08×10^{10}
54	35.49	-0.008	0.008		2.84×10^{12}	2.12×10^{12}
55	23.15	-0.062	0.062		3.07×10^{12}	2.73×10^{11}
56	2.34	-0.070	0.070		3.51×10^{10}	2.32×10^9
57	4.30	-0.001	0.001		3.65×10^{10}	3.56×10^{10}
58	2.52	-0.038	0.038		2.47×10^{10}	5.64×10^9
59	21.11	-0.125	0.125		5.82×10^{12}	4.46×10^{10}
60	4.30	-0.064	0.064		1.10×10^{11}	8.89×10^9
61	15.07	-0.123	0.123		2.90×10^{12}	2.41×10^{10}
62	12.02	-0.071	0.071		9.45×10^{11}	5.96×10^{10}
63	3.27	-0.084	0.084		8.39×10^{10}	3.21×10^9
64	2.14	-0.006	0.006		1.00×10^{10}	7.88×10^9
65	12.70	-0.069	0.069		1.03×10^{12}	6.92×10^{10}
66	6.70	-0.015	0.015		1.15×10^{11}	6.53×10^{10}
67	16.66	-0.012	0.012		6.80×10^{11}	4.26×10^{11}
68	7.55	-0.084	0.084		4.50×10^{11}	1.69×10^{10}
69	4.95	-0.050	0.050		1.16×10^{11}	1.65×10^{10}
70	7.30	-0.011	0.011		1.29×10^{11}	8.30×10^{10}
71	17.14	-0.004	0.004		6.17×10^{11}	5.30×10^{11}

72	1.06	-0.080	0.080		8.32×10^9	3.72×10^8
73	2.72	-0.144	0.144		1.17×10^{11}	4.34×10^8
74	9.31	-0.085	0.085		6.93×10^{11}	2.52×10^{10}
75	2.11	-0.006	0.006		9.74×10^9	7.64×10^9
76	4.38	-0.037	0.037		7.36×10^{10}	1.73×10^{10}
77	34.71	-0.008	0.008		2.72×10^{12}	2.02×10^{12}
78	3.27	-0.002	0.002		2.19×10^{10}	2.00×10^{10}
79	0.22	-0.023	0.023		1.46×10^8	6.02×10^7
80	10.30	-0.113	0.113		1.21×10^{12}	1.47×10^{10}
81	19.21	0.000	0.000		7.25×10^{11}	7.15×10^{11}
82	4.19	-0.011	0.011		4.18×10^{10}	2.77×10^{10}
83	20.58	-0.182	0.182		9.25×10^{12}	7.66×10^9
84	28.37	-0.125	0.125		1.05×10^{13}	8.04×10^{10}
85	8.41	-0.036	0.036		2.65×10^{11}	6.58×10^{10}
86	10.75	-0.067	0.067		7.13×10^{11}	5.23×10^{10}
87	2.47	-0.091	0.091		5.26×10^{10}	1.55×10^9
88	22.14	-0.015	0.015		1.26×10^{12}	7.13×10^{11}
89	24.73	-0.071	0.071		4.02×10^{12}	2.50×10^{11}
90	14.76	-0.112	0.112		2.46×10^{12}	3.09×10^{10}
91	2.88	-0.060	0.060		4.62×10^{10}	4.40×10^9
92	9.38	-0.090	0.090		7.52×10^{11}	2.24×10^{10}
93	21.94	-0.064	0.064		2.85×10^{12}	2.33×10^{11}
94	2.38	-0.023	0.023		1.71×10^{10}	6.86×10^9
95	7.41	-0.052	0.052		2.68×10^{11}	3.54×10^{10}
96	1.60	-0.051	0.051		1.23×10^{10}	1.71×10^9
97	16.01	-0.045	0.045		1.12×10^{12}	1.94×10^{11}
98	2.08	-0.054	0.054		2.19×10^{10}	2.64×10^9
99	8.54	-0.145	0.145		1.16×10^{12}	4.17×10^9
100	0.19	-0.128	0.128		5.00×10^8	3.45×10^6
101	9.91	-0.094	0.094		8.88×10^{11}	2.25×10^{10}
102	6.04	-0.090	0.090		3.11×10^{11}	9.37×10^9
103	3.76	-0.054	0.054		7.10×10^{10}	8.83×10^9
104	4.93	-0.018	0.018		6.71×10^{10}	3.27×10^{10}
105	1.67	-0.014	0.014		7.13×10^9	4.13×10^9
106	9.90	-0.045	0.045		4.29×10^{11}	7.41×10^{10}
107	11.82	-0.008	0.008		3.17×10^{11}	2.33×10^{11}
108	22.89	-0.064	0.064		3.10×10^{12}	2.54×10^{11}
109	3.91	-0.429	0.429		2.39×10^{11}	1.35×10^4
110	8.28	-0.058	0.058		3.71×10^{11}	3.82×10^{10}

111	4.85	-0.003	0.003		4.86×10^{10}	4.32×10^{10}
112	10.14	-0.037	0.037		3.91×10^{11}	9.38×10^{10}
113	1.55	-0.084	0.084		1.88×10^{10}	7.22×10^8
114	2.71	-0.044	0.044		3.19×10^{10}	5.66×10^9
115	14.84	-0.127	0.127		2.93×10^{12}	2.11×10^{10}
116	40.01	-0.059	0.059		8.77×10^{12}	8.73×10^{11}
117	15.22	-0.222	0.222		6.33×10^{12}	1.13×10^9
118	8.76	-0.019	0.019		2.12×10^{11}	1.03×10^{11}
119	5.96	-0.067	0.067		2.20×10^{11}	1.61×10^{10}
120	0.57	-0.036	0.036		1.21×10^9	2.98×10^8
121	14.23	-0.032	0.032		7.12×10^{11}	2.04×10^{11}
122	0.40	-0.002	0.002		3.14×10^8	2.96×10^8
123	8.41	-0.123	0.123		9.07×10^{11}	7.42×10^9
124	13.88	-0.070	0.070		1.25×10^{12}	8.07×10^{10}
125	25.75	-0.032	0.032		2.31×10^{12}	6.75×10^{11}
Avg.	9.69± 8.51	-0.066± 0.062	0.066± 0.062	0.286	1.19± 2.67×10^{12}	1.19± 2.93×10^{11}

Table S4. Fractions of acceptor_acceptor π - π packing pairs with different orders of magnitude in the electron transfer rates for the BTP-B, BTP-Bme, and BTP-Biso films. Here, “small→large” means electron transfer from an acceptor with a smaller EA to one with a larger EA, and “large→small” means the reverse process.

electron transfer rate [s ⁻¹]	BTP-B		BTP-Bme		BTP-Biso	
	small→ large	large→ small	small→ large	large→ small	small→ large	large→ small
$\geq 10^{13}$	6.43%		1.85%		1.60%	
$\geq 10^{12}$	29.6%	5.00%	25.5%	5.09%	24.8%	1.60%
$\geq 10^{11}$	69.3%	31.4%	63.9%	23.2%	64.8%	24.0%
$\geq 10^{10}$	86.8%	60.7%	86.6%	61.6%	89.6%	64.8%
$\geq 10^9$		83.6%		86.1%		85.6%

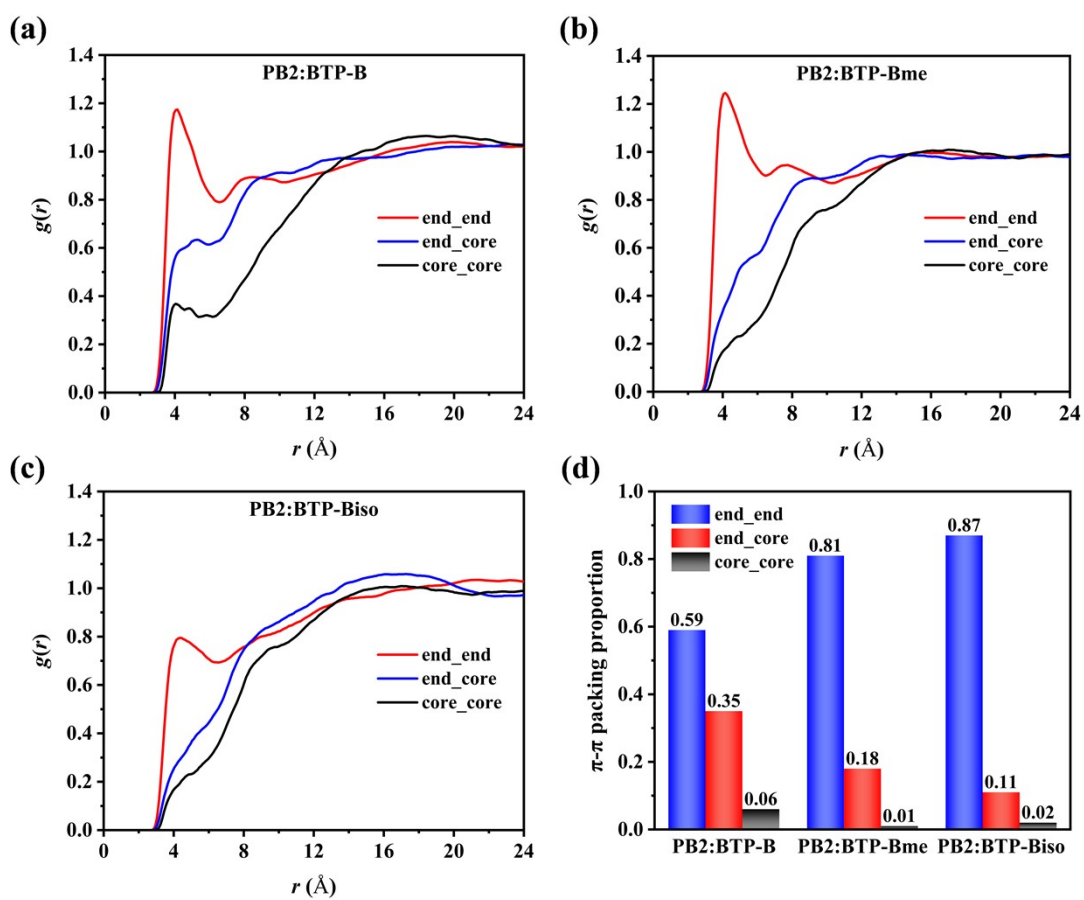


Figure S3. (a-c) Radial distribution functions for the acceptor end_end, end_core, and core_core interactions; and (d) end_end, end_core and core_core π - π packing fractions in the MD-simulated PB2:BTP-B, PB2:BTP-Bme, and PB2:BTP-Biso blends.

Table S5. Intermolecular electron transfer rates, k_e , for the 143 BTP-B_BTP-B, 101 BTP-Bme_BTP-Bme, and 53 BTP-Biso_BTP-Biso π - π packing pairs extracted from the MD-simulated PB2:BTP-B, PB2:BTP-Bme, and PB2:BTP-Biso blends. Here, “small→large” means electron transfer from an acceptor with a smaller EA to one with a larger EA, and “large→small” means the reverse process.

PB2:BTP-B blend						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	5.94	-0.008	0.008	0.294	7.23×10^{10}	5.39×10^{10}
2	22.62	-0.050	0.050		2.21×10^{12}	3.16×10^{11}
3	7.46	-0.184	0.184		1.15×10^{12}	9.00×10^8
4	11.58	-0.026	0.026		3.85×10^{11}	1.41×10^{11}
5	18.29	-0.053	0.053		1.52×10^{12}	1.92×10^{11}
6	5.69	-0.084	0.084		2.32×10^{11}	8.99×10^9
7	0.98	-0.124	0.124		1.15×10^{10}	9.32×10^7
8	17.48	-0.042	0.042		1.15×10^{12}	2.28×10^{11}
9	29.68	-0.008	0.008		1.81×10^{12}	1.35×10^{12}
10	7.98	-0.063	0.063		3.38×10^{11}	2.90×10^{10}
11	12.37	-0.076	0.076		9.83×10^{11}	5.12×10^{10}
12	12.49	-0.128	0.128		1.94×10^{12}	1.33×10^{10}
13	7.95	-0.026	0.026		1.82×10^{11}	6.59×10^{10}
14	10.31	-0.038	0.038		3.79×10^{11}	8.50×10^{10}
15	0.78	-0.085	0.085		4.44×10^9	1.60×10^8
16	8.59	-0.162	0.162		1.28×10^{12}	2.37×10^9
17	14.25	-0.038	0.038		7.23×10^{11}	1.63×10^{11}
18	6.03	-0.076	0.076		2.32×10^{11}	1.23×10^{10}
19	1.88	-0.116	0.116		3.86×10^{10}	4.21×10^8
20	18.74	-0.103	0.103		3.24×10^{12}	5.95×10^{10}
21	4.89	-0.013	0.013		5.41×10^{10}	3.28×10^{10}
22	1.48	-0.027	0.027		6.34×10^9	2.27×10^9
23	13.31	-0.043	0.043		6.79×10^{11}	1.29×10^{11}
24	8.60	-0.014	0.014		1.72×10^{11}	9.87×10^{10}
25	3.02	-0.103	0.103		8.46×10^{10}	1.52×10^9
26	4.14	-0.106	0.106		1.64×10^{11}	2.68×10^9
27	13.48	-0.006	0.006		3.58×10^{11}	2.90×10^{11}
28	9.01	-0.038	0.038		2.90×10^{11}	6.50×10^{10}
29	19.28	-0.019	0.019		9.35×10^{11}	4.55×10^{11}
30	5.76	-0.032	0.032		1.06×10^{11}	3.06×10^{10}
31	25.61	-0.126	0.126		7.94×10^{12}	6.00×10^{10}

32	13.84	-0.053	0.053		8.71×10^{11}	1.10×10^{11}
33	5.22	-0.109	0.109		2.74×10^{11}	3.87×10^9
34	5.57	-0.050	0.050		1.35×10^{11}	1.91×10^{10}
35	26.73	-0.020	0.020		1.86×10^{12}	8.42×10^{11}
36	0.91	-0.037	0.037		2.91×10^9	6.81×10^8
37	9.65	-0.002	0.002		1.73×10^{11}	1.58×10^{11}
38	6.91	-0.157	0.157		7.93×10^{11}	1.79×10^9
39	21.79	-0.010	0.010		1.02×10^{12}	6.89×10^{11}
40	46.56	-0.054	0.054		9.98×10^{12}	1.22×10^{12}
41	5.52	-0.072	0.072		1.86×10^{11}	1.11×10^{10}
42	3.88	-0.041	0.041		5.55×10^{10}	1.15×10^{10}
43	4.33	0.000	0.000		3.34×10^{10}	3.30×10^{10}
44	16.25	-0.065	0.065		1.43×10^{12}	1.16×10^{11}
45	7.42	-0.027	0.027		1.60×10^{11}	5.68×10^{10}
46	1.68	-0.203	0.203		6.67×10^{10}	2.47×10^7
47	14.00	-0.082	0.082		1.37×10^{12}	5.69×10^{10}
48	14.59	-0.069	0.069		1.24×10^{12}	8.39×10^{10}
49	5.30	-0.006	0.006		5.59×10^{10}	4.42×10^{10}
50	2.35	-0.021	0.021		1.47×10^{10}	6.36×10^9
51	0.96	-0.149	0.149		1.43×10^{10}	4.35×10^7
52	16.63	-0.044	0.044		1.07×10^{12}	1.98×10^{11}
53	7.05	-0.078	0.078		3.29×10^{11}	1.58×10^{10}
54	17.82	-0.027	0.027		9.28×10^{11}	3.26×10^{11}
55	12.27	-0.197	0.197		3.42×10^{12}	1.59×10^9
56	8.95	-0.015	0.015		1.87×10^{11}	1.06×10^{11}
57	20.19	-0.010	0.010		8.72×10^{11}	5.95×10^{11}
58	25.26	-0.137	0.137		8.74×10^{12}	4.24×10^{10}
59	0.59	-0.144	0.144		5.12×10^9	1.88×10^7
60	15.28	-0.022	0.022		6.27×10^{11}	2.65×10^{11}
61	5.15	-0.059	0.059		1.31×10^{11}	1.34×10^{10}
62	4.13	-0.048	0.048		7.17×10^{10}	1.09×10^{10}
63	3.64	-0.055	0.055		6.15×10^{10}	7.38×10^9
64	4.76	-0.002	0.002		4.15×10^{10}	3.89×10^{10}
65	0.86	-0.047	0.047		2.99×10^9	4.87×10^8
66	2.32	-0.165	0.165		9.62×10^{10}	1.54×10^8
67	1.08	-0.067	0.067		6.60×10^9	4.91×10^8
68	1.36	-0.009	0.009		3.96×10^9	2.75×10^9
69	27.34	-0.163	0.163		1.32×10^{13}	2.29×10^{10}
70	10.47	-0.026	0.026		3.13×10^{11}	1.16×10^{11}

71	13.51	-0.070	0.070		1.07×10^{12}	7.06×10^{10}
72	11.78	-0.009	0.009		2.92×10^{11}	2.07×10^{11}
73	5.94	-0.050	0.050		1.53×10^{11}	2.18×10^{10}
74	10.71	0.000	0.000		2.03×10^{11}	2.04×10^{11}
75	6.31	-0.095	0.095		3.31×10^{11}	8.32×10^9
76	8.30	-0.174	0.174		1.32×10^{12}	1.52×10^9
77	4.65	-0.168	0.168		3.97×10^{11}	5.74×10^8
78	7.16	-0.082	0.082		3.57×10^{11}	1.49×10^{10}
79	0.41	-0.112	0.112		1.71×10^9	2.22×10^7
80	4.96	-0.127	0.127		3.01×10^{11}	2.19×10^9
81	3.92	-0.021	0.021		4.04×10^{10}	1.79×10^{10}
82	2.25	-0.108	0.108		5.01×10^{10}	7.38×10^8
83	17.76	-0.120	0.120		3.57×10^{12}	3.39×10^{10}
84	27.45	-0.041	0.041		2.80×10^{12}	5.72×10^{11}
85	1.31	0.000	0.000		3.06×10^9	3.02×10^9
86	6.46	-0.055	0.055		1.94×10^{11}	2.32×10^{10}
87	28.39	-0.030	0.030		2.50×10^{12}	7.70×10^{11}
88	14.52	-0.019	0.019		5.38×10^{11}	2.54×10^{11}
89	3.18	-0.051	0.051		4.40×10^{10}	6.15×10^9
90	1.54	-0.058	0.058		1.16×10^{10}	1.22×10^9
91	4.94	-0.068	0.068		1.40×10^{11}	9.87×10^9
92	17.44	-0.011	0.011		6.62×10^{11}	4.37×10^{11}
93	21.18	-0.046	0.046		1.82×10^{12}	3.02×10^{11}
94	3.45	-0.054	0.054		5.43×10^{10}	6.78×10^9
95	0.36	-0.021	0.021		3.46×10^8	1.53×10^8
96	13.14	-0.099	0.099		1.53×10^{12}	3.20×10^{10}
97	16.78	-0.183	0.183		5.82×10^{12}	4.61×10^9
98	7.75	-0.014	0.014		1.38×10^{11}	8.14×10^{10}
99	31.83	-0.075	0.075		6.43×10^{12}	3.46×10^{11}
100	3.58	-0.006	0.006		2.57×10^{10}	2.00×10^{10}
101	1.73	-0.015	0.015		7.04×10^9	3.93×10^9
102	20.07	-0.155	0.155		6.59×10^{12}	1.58×10^{10}
103	2.08	-0.009	0.009		9.12×10^9	6.44×10^9
104	0.97	-0.195	0.195		2.12×10^{10}	1.07×10^7
105	3.63	-0.053	0.053		5.94×10^{10}	7.66×10^9
106	5.04	-0.122	0.122		2.94×10^{11}	2.60×10^9
107	2.32	-0.090	0.090		4.20×10^{10}	1.27×10^9
108	28.45	-0.021	0.021		2.12×10^{12}	9.46×10^{11}
109	12.64	-0.011	0.011		3.50×10^{11}	2.28×10^{11}

110	20.74	-0.022	0.022		1.16×10^{12}	4.86×10^{11}
111	6.00	-0.128	0.128		4.50×10^{11}	3.05×10^9
112	22.94	-0.116	0.116		5.71×10^{12}	6.26×10^{10}
113	7.19	-0.064	0.064		2.78×10^{11}	2.32×10^{10}
114	47.36	-0.050	0.050		9.73×10^{12}	1.38×10^{12}
115	4.94	-0.018	0.018		6.03×10^{10}	3.03×10^{10}
116	18.47	-0.079	0.079		2.30×10^{12}	1.05×10^{11}
117	3.10	-0.052	0.052		4.30×10^{10}	5.62×10^9
118	6.23	-0.133	0.133		5.10×10^{11}	2.87×10^9
119	4.15	-0.008	0.008		3.57×10^{10}	2.61×10^{10}
120	42.84	-0.175	0.175		3.55×10^{13}	3.96×10^{10}
121	5.93	-0.047	0.047		1.44×10^{11}	2.35×10^{10}
122	12.25	-0.061	0.061		7.70×10^{11}	7.20×10^{10}
123	11.04	-0.015	0.015		2.84×10^{11}	1.62×10^{11}
124	45.06	-0.020	0.020		5.29×10^{12}	2.39×10^{12}
125	7.47	-0.066	0.066		3.11×10^{11}	2.37×10^{10}
126	19.40	-0.025	0.025		1.06×10^{12}	4.02×10^{11}
127	19.12	-0.019	0.019		9.29×10^{11}	4.42×10^{11}
128	3.89	-0.159	0.159		2.56×10^{11}	5.26×10^8
129	29.47	-0.033	0.033		2.84×10^{12}	7.77×10^{11}
130	18.06	-0.001	0.001		5.85×10^{11}	5.72×10^{11}
131	2.21	-0.164	0.164		8.65×10^{10}	1.48×10^8
132	6.32	-0.035	0.035		1.35×10^{11}	3.44×10^{10}
133	26.49	-0.033	0.033		2.26×10^{12}	6.38×10^{11}
134	17.59	-0.075	0.075		1.96×10^{12}	1.06×10^{11}
135	15.56	-0.048	0.048		1.01×10^{12}	1.58×10^{11}
136	8.83	-0.013	0.013		1.78×10^{11}	1.06×10^{11}
137	8.99	-0.136	0.136		1.09×10^{12}	5.55×10^9
138	10.36	-0.104	0.104		1.01×10^{12}	1.75×10^{10}
139	2.27	-0.096	0.096		4.35×10^{10}	1.05×10^9
140	27.73	-0.090	0.090		6.00×10^{12}	1.81×10^{11}
141	13.58	-0.065	0.065		1.00×10^{12}	8.09×10^{10}
142	14.57	-0.079	0.079		1.43×10^{12}	6.56×10^{10}
143	22.42	0.000	0.000		8.93×10^{11}	8.91×10^{11}
Avg.	11.46 ± 9.81	-0.066 ± 0.053	0.066 ± 0.053	0.294	$1.43 \pm 3.57 \times 10^{12}$	$1.62 \pm 3.23 \times 10^{11}$

PB2:BTP-Bme blend						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small

1	2.94	-0.014	0.014	0.289	2.11×10^{10}	1.23×10^{10}
2	3.90	-0.022	0.022		4.36×10^{10}	1.82×10^{10}
3	8.05	-0.123	0.123		8.05×10^{11}	6.62×10^9
4	2.10	-0.120	0.120		5.29×10^{10}	4.92×10^8
5	8.22	-0.129	0.129		8.94×10^{11}	5.85×10^9
6	47.59	-0.080	0.080		1.63×10^{13}	7.22×10^{11}
7	13.65	-0.003	0.003		3.70×10^{11}	3.32×10^{11}
8	3.01	-0.104	0.104		8.94×10^{10}	1.58×10^9
9	2.15	-0.073	0.073		3.01×10^{10}	1.74×10^9
10	8.71	-0.131	0.131		1.03×10^{12}	6.24×10^9
11	6.44	-0.106	0.106		4.22×10^{11}	6.76×10^9
12	10.59	-0.003	0.003		2.25×10^{11}	1.98×10^{11}
13	15.21	-0.089	0.089		1.89×10^{12}	5.83×10^{10}
14	6.88	-0.124	0.124		5.92×10^{11}	4.74×10^9
15	4.65	-0.048	0.048		9.53×10^{10}	1.49×10^{10}
16	1.26	-0.006	0.006		3.32×10^9	2.68×10^9
17	3.71	-0.051	0.051		6.41×10^{10}	8.71×10^9
18	0.52	-0.091	0.091		2.24×10^9	6.38×10^7
19	2.75	-0.035	0.035		2.71×10^{10}	6.85×10^9
20	4.60	-0.022	0.022		5.96×10^{10}	2.57×10^{10}
21	2.13	-0.035	0.035		1.62×10^{10}	4.16×10^9
22	0.95	-0.046	0.046		3.84×10^9	6.45×10^8
23	18.51	-0.087	0.087		2.70×10^{12}	9.28×10^{10}
24	15.70	-0.064	0.064		1.40×10^{12}	1.17×10^{11}
25	24.64	-0.045	0.045		2.57×10^{12}	4.43×10^{11}
26	2.51	-0.027	0.027		1.95×10^{10}	6.89×10^9
27	2.80	-0.115	0.115		8.82×10^{10}	1.01×10^9
28	7.11	-0.052	0.052		2.38×10^{11}	3.17×10^{10}
29	0.13	-0.064	0.064		1.02×10^8	8.38×10^6
30	8.20	-0.036	0.036		2.45×10^{11}	5.99×10^{10}
31	3.04	-0.002	0.002		1.79×10^{10}	1.69×10^{10}
32	19.86	-0.017	0.017		1.02×10^{12}	5.29×10^{11}
33	12.31	-0.042	0.042		6.09×10^{11}	1.18×10^{11}
34	2.51	0.000	0.000		1.19×10^{10}	1.18×10^{10}
35	4.00	-0.106	0.106		1.62×10^{11}	2.65×10^9
36	32.53	-0.075	0.075		7.14×10^{12}	3.78×10^{11}
37	11.02	-0.079	0.079		8.64×10^{11}	3.96×10^{10}
38	22.55	-0.029	0.029		1.62×10^{12}	5.34×10^{11}
39	25.04	-0.150	0.150		1.03×10^{13}	2.94×10^{10}

40	9.08	-0.155	0.155		1.41×10^{12}	3.41×10^9
41	3.99	-0.107	0.107		1.63×10^{11}	2.56×10^9
42	29.01	-0.136	0.136		1.20×10^{13}	6.03×10^{10}
43	4.40	-0.131	0.131		2.63×10^{11}	1.58×10^9
44	28.61	-0.033	0.033		2.83×10^{12}	7.76×10^{11}
45	18.38	-0.050	0.050		1.54×10^{12}	2.21×10^{11}
46	0.06	-0.036	0.036		1.24×10^7	3.02×10^6
47	1.09	-0.054	0.054		5.81×10^9	7.14×10^8
48	2.77	-0.063	0.063		4.30×10^{10}	3.71×10^9
49	2.39	-0.052	0.052		2.72×10^{10}	3.53×10^9
50	9.34	-0.041	0.041		3.45×10^{11}	6.94×10^{10}
51	6.82	-0.136	0.136		6.59×10^{11}	3.36×10^9
52	31.04	-0.055	0.055		4.75×10^{12}	5.66×10^{11}
53	10.78	-0.154	0.154		1.97×10^{12}	4.89×10^9
54	44.96	-0.011	0.011		4.72×10^{12}	3.04×10^{12}
55	11.09	-0.041	0.041		4.87×10^{11}	9.80×10^{10}
56	17.13	-0.014	0.014		7.19×10^{11}	4.19×10^{11}
57	0.65	-0.122	0.122		5.26×10^9	4.52×10^7
58	11.12	-0.185	0.185		2.68×10^{12}	2.03×10^9
59	15.10	-0.178	0.178		4.71×10^{12}	4.62×10^9
60	6.14	-0.001	0.001		7.22×10^{10}	6.98×10^{10}
61	11.36	-0.102	0.102		1.25×10^{12}	2.32×10^{10}
62	8.35	-0.089	0.089		5.70×10^{11}	1.76×10^{10}
63	16.04	-0.069	0.069		1.58×10^{12}	1.08×10^{11}
64	6.76	-0.056	0.056		2.31×10^{11}	2.60×10^{10}
65	14.16	-0.013	0.013		4.86×10^{11}	2.89×10^{11}
66	39.78	-0.074	0.074		1.05×10^{13}	5.84×10^{11}
67	5.03	-0.009	0.009		5.61×10^{10}	4.01×10^{10}
68	7.65	-0.094	0.094		5.11×10^{11}	1.30×10^{10}
69	2.71	-0.092	0.092		6.20×10^{10}	1.74×10^9
70	2.26	-0.060	0.060		2.74×10^{10}	2.64×10^9
71	12.81	-0.025	0.025		4.89×10^{11}	1.87×10^{11}
72	12.34	-0.098	0.098		1.40×10^{12}	3.07×10^{10}
73	16.56	-0.046	0.046		1.18×10^{12}	1.96×10^{11}
74	2.31	-0.007	0.007		1.15×10^{10}	8.73×10^9
75	19.80	-0.025	0.025		1.18×10^{12}	4.40×10^{11}
76	5.87	-0.042	0.042		1.38×10^{11}	2.70×10^{10}
77	6.45	-0.131	0.131		5.64×10^{11}	3.41×10^9
78	25.17	-0.005	0.005		1.31×10^{12}	1.08×10^{12}

79	7.41	-0.117	0.117		6.34×10^{11}	6.72×10^9
80	15.21	-0.007	0.007		5.00×10^{11}	3.78×10^{11}
81	11.05	-0.085	0.085		9.44×10^{11}	3.43×10^{10}
82	9.72	-0.087	0.087		7.47×10^{11}	2.55×10^{10}
83	2.50	-0.034	0.034		2.18×10^{10}	5.89×10^9
84	10.32	-0.192	0.192		2.42×10^{12}	1.39×10^9
85	1.44	-0.058	0.058		1.08×10^{10}	1.13×10^9
86	30.41	-0.036	0.036		3.35×10^{12}	8.28×10^{11}
87	2.01	-0.035	0.035		1.44×10^{10}	3.71×10^9
88	3.49	-0.064	0.064		6.96×10^{10}	5.69×10^9
89	2.67	-0.074	0.074		4.71×10^{10}	2.66×10^9
90	5.73	-0.063	0.063		1.85×10^{11}	1.58×10^{10}
91	23.85	-0.105	0.105		5.72×10^{12}	9.47×10^{10}
92	1.10	-0.071	0.071		7.72×10^9	4.83×10^8
93	0.84	-0.012	0.012		1.69×10^9	1.04×10^9
94	2.22	-0.064	0.064		2.79×10^{10}	2.33×10^9
95	6.71	-0.091	0.091		3.79×10^{11}	1.08×10^{10}
96	7.31	-0.059	0.059		2.81×10^{11}	2.85×10^{10}
97	1.89	-0.150	0.150		5.83×10^{10}	1.69×10^8
98	15.99	-0.071	0.071		1.61×10^{12}	1.03×10^{11}
99	7.79	-0.013	0.013		1.47×10^{11}	8.72×10^{10}
100	7.56	-0.052	0.052	2.68×10^{11}	3.60×10^{10}	
101	10.75	-0.046	0.046	4.92×10^{11}	8.34×10^{10}	
Avg.	10.30 ± 9.82	-0.068 ± 0.046	0.068 ± 0.046	0.289	$1.30 \pm 2.62 \times 10^{12}$	$1.39 \pm 3.56 \times 10^{11}$

PB2:BTP-Biso blend						
pairs	$ V_e $ (meV)	ΔE_e (eV)		λ_e (eV)	k_e (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	5.30	-0.050	0.050	0.286	1.33×10^{11}	1.89×10^{10}
2	2.03	-0.050	0.050		4.84×10^{10}	2.78×10^9
3	4.81	-0.116	0.116		5.02×10^{10}	2.98×10^9
4	2.49	-0.006	0.006		1.34×10^{10}	1.09×10^{10}
5	1.79	-0.005	0.005		5.59×10^{10}	5.65×10^9
6	18.12	-0.154	0.154		2.86×10^{12}	1.42×10^{10}
7	7.35	-0.092	0.092		1.80×10^{11}	1.32×10^{10}
8	31.43	-0.029	0.029		3.10×10^{12}	1.06×10^{12}
9	0.10	-0.026	0.026		3.75×10^7	1.20×10^7
10	28.29	-0.034	0.034		3.12×10^{12}	7.81×10^{11}
11	0.56	-0.038	0.038		2.77×10^9	2.75×10^8

12	1.99	-0.093	0.093		7.87×10^9	9.38×10^8
13	2.70	-0.001	0.001		4.24×10^{10}	1.39×10^{10}
14	17.21	-0.063	0.063		1.39×10^{12}	1.48×10^{11}
15	10.63	-0.049	0.049		5.85×10^{11}	7.74×10^{10}
16	17.14	-0.056	0.056		3.10×10^{12}	1.75×10^{11}
17	9.63	-0.107	0.107		1.44×10^{12}	1.54×10^{10}
18	2.29	-0.142	0.142		3.91×10^{10}	3.24×10^8
19	21.32	-0.080	0.080		2.14×10^{12}	1.50×10^{11}
20	15.69	-0.050	0.050		2.02×10^{12}	1.68×10^{11}
21	4.27	-0.087	0.087		1.13×10^{11}	5.01×10^9
22	5.74	-0.067	0.067		2.28×10^{11}	1.48×10^{10}
23	30.62	-0.075	0.075		6.89×10^{12}	3.50×10^{11}
24	0.22	-0.079	0.079		1.05×10^8	1.66×10^7
25	8.05	-0.005	0.005		1.67×10^{12}	1.15×10^{11}
26	2.52	-0.210	0.210		2.56×10^{10}	4.69×10^7
27	2.01	-0.040	0.040		9.68×10^9	3.42×10^9
28	6.61	-0.011	0.011		7.55×10^{11}	6.89×10^{10}
29	0.11	-0.153	0.153		3.20×10^7	5.67×10^5
30	5.03	-0.013	0.013		9.46×10^{10}	3.78×10^{10}
31	6.80	-0.036	0.036		6.02×10^{11}	4.31×10^{10}
32	18.99	-0.125	0.125		1.14×10^{12}	3.62×10^{10}
33	14.82	-0.026	0.026		5.20×10^{11}	2.52×10^{11}
34	5.45	-0.010	0.010		5.86×10^{10}	4.73×10^{10}
35	2.42	-0.001	0.001		8.84×10^{10}	1.13×10^{10}
36	1.56	-0.139	0.139		1.07×10^{10}	1.64×10^8
37	30.21	-0.046	0.046		2.95×10^{12}	6.83×10^{11}
38	37.75	-0.027	0.027		7.37×10^{12}	1.59×10^{12}
39	1.31	-0.056	0.056		1.46×10^{10}	1.03×10^9
40	4.95	-0.089	0.089		2.13×10^{11}	6.38×10^9
41	27.86	-0.091	0.091		9.97×10^{12}	1.92×10^{11}
42	1.64	-0.124	0.124		2.43×10^{10}	2.81×10^8
43	20.53	-0.094	0.094		3.92×10^{12}	9.68×10^{10}
44	0.01	-0.097	0.097		1.48×10^6	4.48×10^4
45	3.52	-0.077	0.077		4.90×10^{10}	4.38×10^9
46	4.88	-0.039	0.039		1.83×10^{11}	2.06×10^{10}
47	2.37	-0.082	0.082		6.96×10^{10}	1.76×10^9
48	20.73	-0.120	0.120		1.09×10^{12}	4.92×10^{10}
49	9.44	-0.014	0.014		2.23×10^{11}	1.31×10^{11}
50	1.80	-0.013	0.013		9.43×10^9	4.83×10^9

51	5.60	-0.022	0.022		2.20×10^{11}	3.94×10^{10}
52	5.74	-0.076	0.076		4.16×10^{11}	1.20×10^{10}
53	7.95	-0.122	0.122		1.23×10^{11}	6.86×10^9
Avg.	9.48± 9.75	-0.066± 0.047	0.066± 0.047	0.286	1.12± 2.02×10^{12}	1.22± 2.86×10^{11}

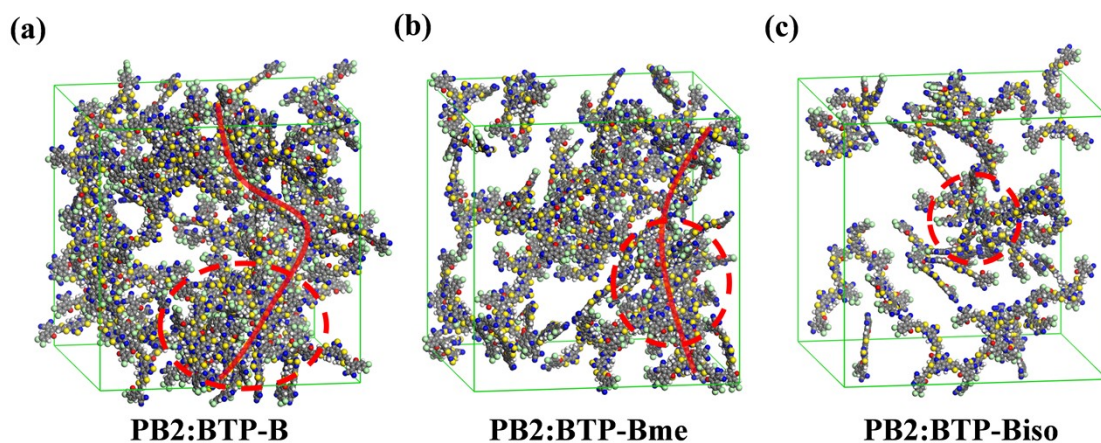


Figure S4. (a-c) Illustration of the intermolecular connected clusters found in the MD-simulated PB2:BTP-B, PB2:BTP-Bme, and PB2:BTP-Biso blends, when the intermolecular electron-transfer rates larger than 10^{11} s^{-1} are taken into account. The red curves represent the electron transport pathways and red circles denote the largest clusters found in the blends.

Table S6. Interchain hole transfer rates, k_h , for the 48, 52, and 57 PB2_PB2 π - π packing pairs extracted, respectively, from the MD-simulated PB2:BTP-B, PB2:BTP-Bme, and PB2:BTP-Biso blends. Here, “small→large” means hole transfer from a PB2 chain with a smaller IP to one with a larger IP, and “large→small” means the reverse process.

PB2:BTP-B blend						
pairs	$ V_h $ (meV)	ΔE_h (eV)		λ_h (eV)	k_h (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	3.70	-0.028	0.028	0.368	1.77×10^{10}	6.01×10^9
2	32.99	-0.045	0.045		1.89×10^{12}	3.33×10^{11}
3	9.54	-0.062	0.062		2.12×10^{11}	1.89×10^{10}
4	10.87	-0.087	0.087		4.03×10^{11}	1.37×10^{10}
5	3.66	-0.020	0.020		1.51×10^{10}	6.89×10^9
6	3.22	-0.083	0.083		3.34×10^{10}	1.32×10^9
7	14.27	-0.184	0.184		2.29×10^{12}	1.79×10^9
8	15.54	-0.048	0.048		4.47×10^{11}	6.79×10^{10}
9	10.57	-0.037	0.037		1.70×10^{11}	4.05×10^{10}
10	14.74	-0.006	0.006		1.87×10^{11}	1.49×10^{11}
11	7.91	-0.033	0.033		8.82×10^{10}	2.47×10^{10}
12	5.75	-0.162	0.162		2.96×10^{11}	5.48×10^8
13	0.20	-0.130	0.130		2.46×10^8	1.57×10^6
14	32.28	-0.016	0.016		1.08×10^{12}	5.83×10^{11}
15	3.68	-0.051	0.051		2.64×10^{10}	3.58×10^9
16	1.40	-0.061	0.061		4.45×10^9	4.18×10^8
17	3.36	-0.071	0.071		3.04×10^{10}	1.90×10^9
18	1.52	-0.118	0.118		1.23×10^{10}	1.23×10^8
19	29.55	-0.112	0.112		4.28×10^{12}	5.40×10^{10}
20	10.78	-0.030	0.030		1.57×10^{11}	4.81×10^{10}
21	27.39	-0.123	0.123		4.24×10^{12}	3.52×10^{10}
22	3.47	-0.136	0.136		8.04×10^{10}	3.96×10^8
23	5.89	-0.057	0.057		7.43×10^{10}	8.05×10^9
24	41.47	-0.012	0.012		1.65×10^{12}	1.05×10^{12}
25	3.90	-0.006	0.006		1.31×10^{10}	1.04×10^{10}
26	0.32	-0.227	0.227		1.64×10^9	2.40×10^5
27	22.14	-0.068	0.068		1.25×10^{12}	8.91×10^{10}
28	16.29	-0.153	0.153		2.16×10^{12}	5.60×10^9
29	17.60	-0.032	0.032		4.33×10^{11}	1.24×10^{11}
30	1.18	-0.080	0.080		4.28×10^9	1.91×10^8
31	51.97	-0.114	0.114		1.35×10^{13}	1.60×10^{11}
32	24.16	-0.093	0.093		2.17×10^{12}	5.87×10^{10}

33	2.13	-0.011	0.011	0.368	4.29×10^9	2.80×10^9
34	4.02	-0.045	0.045		2.83×10^{10}	4.91×10^9
35	15.18	-0.187	0.187		2.67×10^{12}	1.86×10^9
36	4.49	-0.032	0.032		2.81×10^{10}	8.09×10^9
37	9.63	-0.043	0.043		1.57×10^{11}	2.94×10^{10}
38	0.97	-0.055	0.055		1.96×10^9	2.31×10^8
39	20.77	-0.139	0.139		2.98×10^{12}	1.33×10^{10}
40	0.55	-0.052	0.052		5.95×10^8	7.95×10^7
41	4.41	-0.007	0.007		1.71×10^{10}	1.30×10^{10}
42	7.05	-0.243	0.243		9.11×10^{11}	6.96×10^7
43	11.76	-0.014	0.014		1.39×10^{11}	8.01×10^{10}
44	27.46	-0.117	0.117		3.95×10^{12}	4.10×10^{10}
45	8.37	-0.017	0.017		7.48×10^{10}	3.82×10^{10}
46	28.88	0.000	0.000		6.46×10^{11}	6.36×10^{11}
47	12.54	-0.026	0.026		1.97×10^{11}	7.14×10^{10}
48	7.26	-0.028	0.028		6.82×10^{10}	2.30×10^{10}
Avg.	12.43 ± 11.73	-0.073 ± 0.060	0.073 ± 0.060		$1.02 \pm 2.17 \times 10^{12}$	$0.80 \pm 1.91 \times 10^{11}$

PB2:BTP-Bme blend						
pairs	$ V_h $ (meV)	ΔE_h (eV)		λ_h (eV)	k_h (s ⁻¹)	
		small→large	large→small		small→large	large→small
1	9.10	-0.087	0.087	0.368	2.82×10^{11}	9.63×10^9
2	9.79	-0.040	0.040		1.53×10^{11}	3.26×10^{10}
3	31.76	-0.068	0.068		2.58×10^{12}	1.82×10^{11}
4	3.48	-0.020	0.020		1.35×10^{10}	6.28×10^9
5	12.43	-0.059	0.059		3.43×10^{11}	3.40×10^{10}
6	21.68	-0.072	0.072		1.28×10^{12}	7.73×10^{10}
7	46.83	-0.020	0.020		2.48×10^{12}	1.12×10^{12}
8	8.38	-0.138	0.138		4.78×10^{11}	2.23×10^9
9	48.62	-0.070	0.070		6.22×10^{12}	4.10×10^{11}
10	4.35	-0.029	0.029		2.52×10^{10}	8.01×10^9
11	36.02	-0.014	0.014		1.30×10^{12}	7.57×10^{11}
12	5.51	-0.145	0.145		2.26×10^{11}	7.87×10^8
13	0.00	-0.041	0.041		1.30×10^4	2.63×10^3
14	1.82	-0.038	0.038		5.14×10^9	1.15×10^9
15	0.19	-0.068	0.068		9.67×10^7	6.86×10^6
16	7.67	-0.014	0.014		5.91×10^{10}	3.41×10^{10}
17	2.25	-0.040	0.040		8.17×10^9	1.71×10^9
18	32.17	-0.011	0.011		9.77×10^{11}	6.43×10^{11}

19	30.16	-0.050	0.050		1.73×10^{12}	2.48×10^{11}
20	17.20	-0.214	0.214		4.35×10^{12}	1.06×10^9
21	12.10	-0.153	0.153		1.18×10^{12}	3.12×10^9
22	0.02	-0.144	0.144		2.01×10^6	7.40×10^3
23	11.02	-0.123	0.123		6.83×10^{11}	5.76×10^9
24	6.36	-0.063	0.063		9.61×10^{10}	8.11×10^9
25	0.01	-0.024	0.024		5.83×10^4	2.25×10^4
26	33.36	-0.045	0.045		1.95×10^{12}	3.38×10^{11}
27	9.46	-0.332	0.332		2.39×10^{12}	5.89×10^6
28	27.16	-0.143	0.143		5.33×10^{12}	2.05×10^{10}
29	23.52	-0.065	0.065		1.35×10^{12}	1.07×10^{11}
30	19.15	-0.006	0.006		3.18×10^{11}	2.49×10^{11}
31	12.86	-0.043	0.043		2.80×10^{11}	5.22×10^{10}
32	27.93	-0.207	0.207		1.09×10^{13}	3.40×10^9
33	2.38	-0.062	0.062		1.31×10^{10}	1.18×10^9
34	27.46	-0.106	0.106		3.38×10^{12}	5.48×10^{10}
35	15.98	-0.029	0.029		3.40×10^{11}	1.08×10^{11}
36	3.72	-0.090	0.090		4.95×10^{10}	1.49×10^9
37	9.84	-0.069	0.069		2.53×10^{11}	1.69×10^{10}
38	5.24	-0.082	0.082		8.67×10^{10}	3.61×10^9
39	25.86	-0.042	0.042		1.11×10^{12}	2.16×10^{11}
40	1.88	-0.007	0.007		3.08×10^9	2.37×10^9
41	22.74	-0.135	0.135		3.41×10^{12}	1.75×10^{10}
42	18.50	-0.015	0.015		3.50×10^{11}	1.96×10^{11}
43	6.19	-0.129	0.129		2.32×10^{11}	1.55×10^9
44	5.60	-0.120	0.120		1.71×10^{11}	1.58×10^9
45	32.34	-0.014	0.014		1.04×10^{12}	6.13×10^{11}
46	27.34	-0.079	0.079		2.25×10^{12}	1.06×10^{11}
47	18.96	-0.054	0.054		7.34×10^{11}	8.90×10^{10}
48	5.67	-0.101	0.101		1.34×10^{11}	2.65×10^9
49	30.87	-0.068	0.068		2.43×10^{12}	1.73×10^{11}
50	21.47	-0.178	0.178		4.89×10^{12}	4.81×10^9
51	3.62	-0.043	0.043		2.22×10^{10}	4.15×10^9
52	2.74	-0.045	0.045		1.30×10^{10}	2.28×10^9
Avg.	15.40 ± 12.61	-0.078 ± 0.062	0.078 ± 0.062	0.368	$1.31 \pm 2.02 \times 10^{12}$	$1.15 \pm 2.21 \times 10^{11}$

PB2:BTP-Biso blend				
pairs	$ V_h $	ΔE_h (eV)	λ_h	k_h (s ⁻¹)

	(meV)	small→large	large→small	(eV)	small→large	large→small
1	0.13	-0.086	0.086	0.368	5.44×10^7	1.88×10^6
2	27.80	-0.050	0.050		1.47×10^{12}	2.11×10^{11}
3	22.02	-0.071	0.071		1.30×10^{12}	8.21×10^{10}
4	18.23	-0.078	0.078		9.94×10^{11}	4.75×10^{10}
5	14.56	-0.040	0.040		3.43×10^{11}	7.09×10^{10}
6	28.57	-0.036	0.036		1.22×10^{12}	3.02×10^{11}
7	15.42	-0.099	0.099		9.66×10^{11}	2.06×10^{10}
8	1.34	-0.059	0.059		3.96×10^9	3.97×10^8
9	26.91	-0.009	0.009		6.58×10^{11}	4.69×10^{11}
10	43.24	-0.025	0.025		2.30×10^{12}	8.70×10^{11}
11	22.69	-0.044	0.044		8.78×10^{11}	1.61×10^{11}
12	16.49	-0.024	0.024		3.30×10^{11}	1.28×10^{11}
13	9.02	-0.006	0.006		6.99×10^{10}	5.58×10^{10}
14	1.10	-0.028	0.028		1.56×10^9	5.21×10^8
15	16.10	-0.137	0.137		1.75×10^{12}	8.42×10^9
16	4.88	-0.073	0.073		6.62×10^{10}	3.79×10^9
17	20.44	-0.002	0.002		3.36×10^{11}	3.06×10^{11}
18	11.03	-0.045	0.045		2.13×10^{11}	3.69×10^{10}
19	7.00	-0.057	0.057		1.04×10^{11}	1.15×10^{10}
20	14.57	-0.121	0.121		1.17×10^{12}	1.05×10^{10}
21	6.98	-0.012	0.012		4.74×10^{10}	2.93×10^{10}
22	0.40	-0.082	0.082		5.16×10^8	2.13×10^7
23	21.71	-0.113	0.113		2.32×10^{12}	2.90×10^{10}
24	5.04	-0.056	0.056		5.36×10^{10}	6.02×10^9
25	5.17	-0.013	0.013		2.62×10^{10}	1.59×10^{10}
26	10.92	-0.004	0.004		9.88×10^{10}	8.49×10^{10}
27	49.90	-0.014	0.014		2.50×10^{12}	1.45×10^{12}
28	2.67	-0.033	0.033		1.02×10^{10}	2.79×10^9
29	9.78	-0.037	0.037		1.44×10^{11}	3.48×10^{10}
30	1.14	-0.058	0.058		2.82×10^9	3.00×10^8
31	4.11	-0.027	0.027		2.16×10^{10}	7.51×10^9
32	26.83	-0.037	0.037		1.09×10^{12}	2.61×10^{11}
33	57.80	-0.043	0.043		5.65×10^{12}	1.06×10^{12}
34	0.28	-0.134	0.134		4.92×10^8	2.68×10^6
35	14.85	-0.194	0.194		2.74×10^{12}	1.42×10^9
36	0.93	-0.103	0.103		3.76×10^9	6.75×10^7
37	0.24	-0.198	0.198		7.46×10^8	3.39×10^5
38	3.09	-0.185	0.185		1.09×10^{11}	8.05×10^7
39	17.80	-0.112	0.112		1.54×10^{12}	1.99×10^{10}

40	51.13	-0.008	0.008		2.36×10^{12}	1.70×10^{12}
41	10.05	-0.027	0.027		1.30×10^{11}	4.45×10^{10}
42	24.53	-0.039	0.039		9.51×10^{11}	2.07×10^{11}
43	8.25	-0.027	0.027		8.71×10^{10}	3.01×10^{10}
44	5.61	-0.093	0.093		1.17×10^{11}	3.18×10^9
45	2.43	-0.115	0.115		3.00×10^{10}	3.44×10^8
46	19.28	-0.046	0.046		6.63×10^{11}	1.10×10^{11}
47	22.45	-0.078	0.078		1.51×10^{12}	7.17×10^{10}
48	0.41	-0.042	0.042		2.75×10^8	5.33×10^7
49	32.73	-0.166	0.166		1.01×10^{13}	1.55×10^{10}
50	27.11	-0.088	0.088		2.57×10^{12}	8.21×10^{10}
51	18.49	-0.050	0.050		6.55×10^{11}	9.20×10^{10}
52	8.42	0.000	0.000		5.49×10^{10}	5.40×10^{10}
53	12.44	-0.203	0.203		2.09×10^{12}	7.65×10^8
54	1.26	-0.068	0.068		4.07×10^9	2.89×10^8
55	49.07	-0.273	0.273		5.23×10^{13}	1.28×10^9
56	0.06	-0.044	0.044		5.61×10^6	1.02×10^6
57	46.30	-0.023	0.023		2.54×10^{12}	1.04×10^{12}
Avg.	15.81± 14.69	-0.069± 0.058	0.069± 0.058	0.368	1.87± 6.94×10^{12}	1.62± 3.53×10^{11}

Table S7. Proportions of PB2_PB2 π - π packing pairs with different orders of magnitude in the hole transfer rates for the PB2:BTP-B, PB2:BTP-Bme, and PB2:BTP-Biso blends. Here, “small→large” means hole transfer from a PB2 chain with a smaller IP to one with a larger IP, and “large→small” means the reverse process.

hole transfer rate [s ⁻¹]	PB2:BTP-B		PB2:BTP-Bme		PB2:BTP-Biso	
	small→ large	large→ small	small→ large	large→ small	small→ large	large→ small
$\geq 10^{13}$	2.08%		1.92%		3.51%	
$\geq 10^{12}$	27.1%	2.08%	38.5%	1.92%	33.3%	7.02%
$\geq 10^{11}$	54.2%	14.6%	69.2%	28.9%	61.4%	24.6%
$\geq 10^{10}$	85.4%	54.2%	86.5%	48.1%	80.7%	61.4%
$\geq 10^9$		79.2%		88.5%		75.4%

Table S8. Parameters used to calculate the non-radiative recombination rates, k_{nr} , for the MD-simulated PB2:BTP-B, PB2:BTP-Bme, and PB2:BTP-Biso blends.

	E_{CT}^{avg} (eV)	$ V_{el}^{avg} $ (eV)	λ_{intra} (eV)	λ_{inter} (eV)	ω_{qm} (cm ⁻¹)
PB2:BTP-B	1.455	0.236	0.231	0.1	1200
PB2:BTP-Bme	1.504	0.226	0.228		
PB2:BTP-Biso	1.521	0.220	0.227		

Table S9. Parameters used to calculate the radiative recombination rates, k_r , for the MD-simulated PB2:BTP-B, PB2:BTP-Bme, and PB2:BTP-Biso blends.

	E_{CT}^{ad} (eV)	$\mu_{CT \rightarrow S0}$ (D)	k_r (s ⁻¹)
PB2:BTP-B	1.124	0.450	2.60×10^5
PB2:BTP-Bme	1.176	0.615	4.19×10^5
PB2:BTP-Biso	1.194	0.561	3.78×10^5

Table S10. Intermolecular exciton dissociation rates, k_{dis} , for the 17, 6, 92, and 19 A_end, A_core, D_end, and D_core π - π packing pairs, respectively, extracted from the MD-simulated PB2:BTP-Bme blend.

A_end packing pattern				
pairs	$ V_{\text{dis}} $ (meV)	ΔE_{dis} (eV)	λ_{dis} (eV)	k_{dis} (s^{-1})
1	24.73	-0.837	0.328	8.25×10^9
2	8.54	-1.043		5.62×10^5
3	2.83	-0.962		1.53×10^6
4	11.73	-1.088		1.46×10^5
5	10.95	-0.867		6.39×10^8
6	38.27	-0.926		1.07×10^9
7	61.78	-0.864		2.23×10^{10}
8	5.07	-1.169		5.73×10^2
9	3.88	-0.827		2.71×10^8
10	28.61	-1.057		3.35×10^6
11	2.07	-0.973		5.45×10^5
12	4.09	-1.018		3.52×10^5
13	7.49	-0.973		7.13×10^6
14	12.13	-1.066		4.17×10^5
15	4.31	-0.800		7.28×10^8
16	22.43	-0.876		1.96×10^9
17	5.55	-1.026		4.74×10^5
Avg.	14.97 ± 15.45	-0.963 ± 0.103	0.328	$2.07 \times 10^9 \pm 5.40 \times 10^9$

A_core packing pattern				
pairs	$ V_{\text{dis}} $ (meV)	ΔE_{dis} (eV)	λ_{dis} (eV)	k_{dis} (s^{-1})
1	10.90	-1.136	0.328	1.36×10^4
2	7.80	-1.153		3.04×10^3
3	32.22	-0.953		2.81×10^8
4	9.80	-0.889		2.48×10^8
5	25.35	-0.984		5.25×10^7
6	20.40	-0.630		8.20×10^{11}
Avg.	17.74 ± 8.98	-0.957 ± 0.175	0.328	$1.37 \times 10^{11} \pm 3.05 \times 10^{11}$

D_end packing pattern				
-----------------------	--	--	--	--

pairs	$ V_{\text{dis}} $ (meV)	ΔE_{dis} (eV)	λ_{dis} (eV)	k_{dis} (s ⁻¹)
1	16.76	-0.862	0.328	1.76×10^9
2	9.09	-0.982		7.32×10^6
3	10.99	-1.106		5.61×10^4
4	0.99	-0.877		3.68×10^6
5	4.22	-0.975		2.11×10^6
6	5.96	-1.111		1.32×10^4
7	1.53	-1.012		6.31×10^4
8	1.62	-1.036		2.69×10^4
9	20.27	-1.025		6.47×10^6
10	7.88	-1.122		1.38×10^4
11	5.68	-1.151		1.75×10^3
12	15.13	-0.984		1.90×10^7
13	8.64	-1.044		5.34×10^5
14	10.15	-1.193		7.03×10^2
15	5.75	-0.953		8.87×10^6
16	6.32	-0.691		2.34×10^{10}
17	26.01	-0.848		6.50×10^9
18	7.15	-1.010		1.50×10^6
19	14.38	-0.994		1.15×10^7
20	0.23	-1.137		5.69×10^0
21	10.46	-0.821		2.36×10^9
22	7.31	-1.097		3.78×10^4
23	55.33	-0.943		1.22×10^9
24	1.05	-0.998		5.28×10^4
25	25.14	-0.881		2.12×10^9
26	25.02	-1.019		1.30×10^7
27	14.88	-0.843		2.50×10^9
28	67.70	-0.902		7.72×10^9
29	6.00	-0.898		6.96×10^7
30	20.17	-1.272		3.85×10^1
31	9.09	-0.986		6.26×10^6
32	10.78	-1.386		1.25×10^{-2}
33	47.90	-0.926		1.68×10^9
34	3.79	-1.031		1.77×10^5
35	22.16	-0.931		3.01×10^8
36	0.00	-1.157		4.94×10^{-4}
37	32.74	-0.862		6.68×10^9
38	19.77	-0.966		6.40×10^7

39	10.23	-1.016	2.45×10^6
40	4.43	-0.970	2.75×10^6
41	1.54	-1.024	4.01×10^4
42	5.28	-0.982	2.51×10^6
43	2.55	-1.049	3.87×10^4
44	5.90	-1.123	7.13×10^3
45	27.33	-1.006	2.66×10^7
46	58.53	-0.931	2.05×10^9
47	1.76	-1.125	5.92×10^2
48	4.14	-0.796	7.66×10^8
49	12.92	-1.025	2.70×10^6
50	2.08	-0.875	1.79×10^7
51	4.65	-1.109	8.79×10^3
52	6.73	-0.883	1.42×10^8
53	8.19	-0.955	1.72×10^7
54	28.85	-1.100	5.04×10^5
55	3.30	-1.074	2.10×10^4
56	12.38	-0.957	3.62×10^7
57	0.85	-0.964	1.27×10^5
58	12.59	-1.017	3.52×10^6
59	2.68	-0.938	3.34×10^6
60	0.97	-1.438	3.53×10^{-6}
61	33.61	-0.843	1.27×10^{10}
62	5.40	-1.001	1.24×10^6
63	11.78	-0.937	6.71×10^7
64	24.79	-1.053	2.98×10^6
65	6.96	-0.808	1.51×10^9
66	23.33	-0.875	2.20×10^9
67	1.32	-1.165	4.72×10^1
68	9.04	-0.981	7.56×10^6
69	2.46	-1.117	1.66×10^3
70	2.28	-0.980	5.04×10^5
71	1.92	-1.126	6.57×10^2
72	11.15	-1.014	3.17×10^6
73	5.23	-0.954	7.16×10^6
74	5.90	-1.036	3.61×10^5
75	15.74	-0.889	6.31×10^8
76	9.00	-1.145	5.83×10^3
77	43.71	-0.794	8.97×10^{10}

78	11.38	-0.844		1.41×10^9
79	7.40	-1.252		1.56×10^1
80	5.70	-0.999		1.51×10^6
81	71.22	-0.873		2.21×10^{10}
82	17.72	-0.877		1.19×10^9
83	9.15	-0.764		8.62×10^9
84	0.57	-1.002		1.32×10^4
85	11.19	-1.140		1.19×10^4
86	30.89	-0.908		1.29×10^9
87	2.75	-1.004		2.87×10^5
88	23.04	-1.147		3.45×10^4
89	1.82	-0.939		1.48×10^6
90	11.59	-0.947		4.61×10^7
91	1.51	-1.000		1.03×10^5
92	37.93	-0.796		6.43×10^{10}
Avg.	13.41 ± 14.70	-0.996 ± 0.127	0.328	$2.88 \times 10^9 \pm 1.18 \times 10^{10}$

D_core packing pattern				
pairs	$ V_{\text{dis}} $ (meV)	ΔE_{dis} (eV)	λ_{dis} (eV)	k_{dis} (s ⁻¹)
1	7.21	-1.035	0.328	5.54×10^5
2	10.52	-0.966		1.82×10^7
3	3.12	-0.975		1.14×10^6
4	23.18	-0.898		1.03×10^9
5	2.83	-1.129		1.25×10^3
6	22.33	-0.808		1.56×10^{10}
7	7.27	-1.018		1.12×10^6
8	2.25	-1.024		8.31×10^4
9	7.88	-0.959		1.33×10^7
10	1.24	-1.158		5.95×10^1
11	0.93	-1.318		6.01×10^{-3}
12	13.92	-1.077		3.32×10^5
13	17.62	-0.872		1.41×10^9
14	25.57	-0.967		1.04×10^8
15	7.36	-0.982		4.95×10^6
16	9.29	-0.994		4.93×10^6
17	13.68	-0.912		2.21×10^8
18	23.43	-0.897		1.09×10^9

19	16.16	-0.82		5.96×10^9
Avg.	11.36 ± 7.89	-0.990 ± 0.119	0.328	$1.34 \times 10^9 \pm 3.63 \times 10^9$

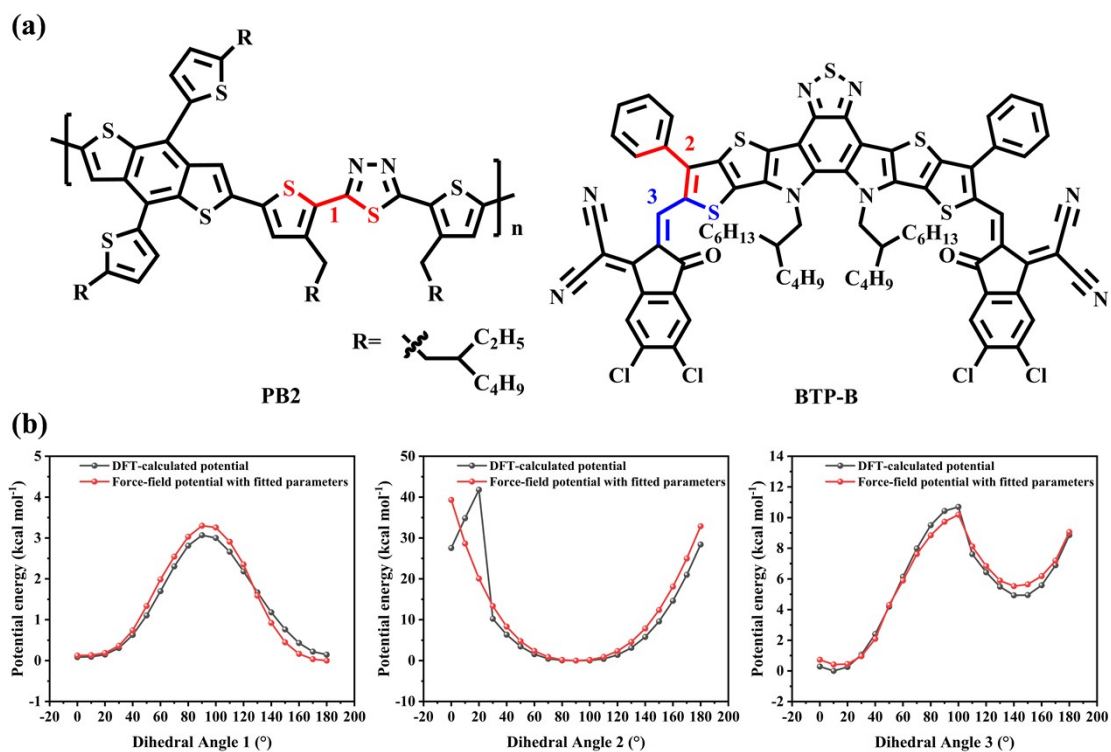


Figure S5. (a) Dihedral 1 along the PB2 chain and Dihedral 2 and 3 of acceptor (here, we take BTP-B as an example); (b) comparison of inter-ring torsion potentials calculated at the ω B97XD/6-31G(d,p) level and at the OPLS-AA level using the parameters fitted for Dihedral 1, 2, and 3.