

Supplementary Information

Table S1. The λ_{abs} and corresponding oscillator strength f (in parenthesis) of the first fifteen excited states for **1a–1e** obtained by the TD–B3LYP/6–31G(d,p) level.

Species	1a	1b	1c	1d	1e
S ₁	599(0.97)	588(0.98)	684(0.82)	746(0.80)	575(0.87)
S ₂	452(0.00)	439(0.01)	604(0.00)	659(0.00)	479(0.00)
S ₃	410(0.30)	400(0.16)	504(0.27)	522(0.34)	453(0.07)
S ₄	401(0.00)	395(0.15)	438(0.00)	479(0.00)	426(0.00)
S ₅	386(0.00)	387(0.02)	425(0.39)	464(0.26)	426(0.00)
S ₆	368(0.00)	371(0.11)	409(0.00)	434(0.01)	390(0.00)
S ₇	349(0.25)	370(0.05)	393(0.02)	414(0.00)	376(0.00)
S ₈	337(0.00)	351(0.002)	381(0.00)	409(0.00)	361(0.02)
S ₉	320(0.00)	341(0.00)	380(0.00)	404(0.00)	337(0.04)
S ₁₀	319(0.10)	332(0.01)	373(0.00)	403(0.00)	337(0.00)
S ₁₁	313(0.34)	329(0.02)	354(0.00)	387(0.00)	331(0.00)
S ₁₂	308(0.00)	325(0.04)	351(0.00)	385(0.00)	326(0.30)
S ₁₃	304(0.02)	316(0.02)	345(0.04)	374(0.00)	319(0.06)
S ₁₄	303(0.00)	313(0.17)	344(0.03)	359(0.08)	316(0.00)
S ₁₅	398(0.00)	307(0.23)	339(0.00)	356(0.00)	314(0.01)

Table S2. The λ_{abs} and corresponding oscillator strength f (in parenthesis) of the first fifteen excited states for **2a–2e** obtained by the TD–B3LYP/6–31G(d,p) level.

Species	2a	2b	2c	2d	2e
S ₁	583(0.74)	581(0.81)	669(0.61)	716(0.56)	574(0.73)
S ₂	433(0.00)	430(0.00)	598(0.00)	640(0.00)	454(0.00)
S ₃	403(0.25)	400(0.22)	504(0.27)	518(0.33)	419(0.18)
S ₄	390(0.00)	393(0.02)	430(0.00)	462(0.03)	415(0.00)
S ₅	376(0.00)	384(0.05)	415(0.37)	438(0.25)	415(0.00)
S ₆	364(0.00)	369(0.23)	398(0.00)	420(0.02)	381(0.00)
S ₇	345(0.38)	364(0.02)	389(0.02)	405(0.00)	357(0.00)
S ₈	331(0.00)	344(0.00)	376(0.01)	378(0.15)	357(0.00)
S ₉	309(0.00)	335(0.01)	372(0.00)	402(0.01)	347(0.04)
S ₁₀	307(0.02)	332(0.00)	361(0.00)	388(0.00)	346(0.00)
S ₁₁	307(0.00)	329(0.03)	349(0.00)	386(0.00)	324(0.00)
S ₁₂	398(0.00)	317(0.11)	346(0.10)	378(0.01)	318(0.28)
S ₁₃	389(0.00)	303(0.25)	340(0.00)	361(0.06)	311(0.00)
S ₁₄	374(0.04)	298(0.14)	329(0.00)	359(0.04)	303(0.10)
S ₁₅	273(0.00)	293(0.02)	315(0.02)	352(0.00)	298(0.00)

Table S3. Calculated total energies of **1a–1e** in different space groups.

Space Groups	1a	1b	1c	1d	1e
<i>C2</i>	267.10664755	321.45638233	225.97183574	376.16415328	879.83611392
<i>C2/c</i>	269.88335381	332.26630469	228.28860482	373.15880464	868.31983476
<i>Cc</i>	260.14853111	324.03331709	227.39384311	373.72921396	879.48598871
<i>P2₁</i>	269.71169906	318.77881185	220.98170266	374.26251003	871.26386752
<i>P2₁/c</i>	264.46285211	328.58530947	226.52206532	374.16464004	865.94238578
<i>P2₁2₁2₁</i>	258.62516273	321.33589767	226.24788602	374.98938481	880.81192845
<i>P$\bar{1}$</i>	263.27380154	321.98033124	219.08346663	375.30463151	869.53027788
<i>Pbca</i>	265.48190996	330.26320365	219.22909939	380.68435027	879.09792126
<i>Pbcn</i>	269.61362945	321.25929840	228.08771363	381.18545364	879.77181353
<i>Pna2₁</i>	266.18533080	315.27651208	222.44344036	374.93555255	876.19982055

Table S4. Calculated total energies of **2a–2e** in different space groups.

Space Groups	2a	2b	2c	2d	2e
<i>C2</i>	236.53285448	287.22982116	198.96449301	324.87622013	817.08018345
<i>C2/c</i>	239.46768323	294.80879220	204.80305955	334.28605557	815.80933012
<i>Cc</i>	235.32105115	294.94393820	191.17289639	338.24251903	810.63411494
<i>P2₁</i>	230.23637381	275.64353002	198.65310594	324.59587230	808.35244122
<i>P2₁/c</i>	232.72488878	293.13462821	193.32358123	331.00351998	811.57894187
<i>P2₁2₁2₁</i>	240.80366316	294.50413578	197.37331724	323.30451552	809.85143134
<i>P$\bar{1}$</i>	239.54100556	290.71834608	195.65673953	323.49984123	806.83373172
<i>Pbca</i>	236.07845661	288.22595856	196.54822284	333.59548780	810.53204182
<i>Pbcn</i>	239.04926073	296.67104644	203.95867868	338.30521904	817.94558269
<i>Pna2₁</i>	236.84019446	281.92447152	196.62248822	335.95555490	817.16542473

Table S5. Calculated crystal cell parameters of the compounds under investigation with the lowest total energies.

Species	Space Groups	a	b	c	α	β	γ
1a	<i>P2₁2₁2₁</i>	19.68	29.84	11.66	90.0	90.0	90.0
1b	<i>Pna2₁</i>	30.56	21.22	12.45	90.0	90.0	90.0
1c	<i>P$\bar{1}$</i>	13.45	16.94	31.47	103.9	104.3	90.6
1d	<i>C2/c</i>	14.85	16.70	81.47	90.0	84.3	90.0
1e	<i>P2₁/c</i>	8.27	26.21	60.76	90.0	117.1	90.0
2a	<i>P2₁</i>	17.32	22.51	8.89	90.0	84.0	90.0
2b	<i>P2₁</i>	19.33	8.79	25.79	90.0	64.3	90.0
2c	<i>Cc</i>	22.49	22.19	14.51	90.0	91.4	90.0
2d	<i>P2₁2₁2₁</i>	14.24	18.56	29.07	90.0	90.0	90.0
2e	<i>P$\bar{1}$</i>	16.76	15.09	18.30	105.0	92.4	96.4

Table S6. The center-center distance and the corresponding hole and electron coupling between the dimer in all of the nearest neighbor pathways for **1a**, **1b**, **1d**, **1e**, and **2a–2c** with the lowest total energies.

Species	Space Groups	Pathway	Distance (Å)	Electron Coupling (eV)	Hole Coupling (eV)
1a	<i>P212121</i>	1	11.664	1.68×10^{-15}	3.44×10^{-15}
		2	11.664	1.68×10^{-15}	3.44×10^{-15}
		3	13.117	-3.70×10^{-3}	-4.70×10^{-3}
		4	10.062	2.40×10^{-3}	5.23×10^{-4}
		5	16.016	2.70×10^{-6}	-6.63×10^{-7}
		6	19.242	-4.71×10^{-6}	4.90×10^{-6}
		7	16.016	2.70×10^{-6}	-6.63×10^{-7}
		8	16.547	1.01×10^{-5}	-1.39×10^{-5}
1b	<i>Pna21</i>	1	21.225	-1.28×10^{-5}	2.08×10^{-5}
		2	21.225	-1.28×10^{-5}	2.08×10^{-5}
		3	17.132	-5.20×10^{-4}	6.02×10^{-4}
		4	17.132	-5.20×10^{-4}	6.02×10^{-4}
		5	11.287	2.95×10^{-4}	6.87×10^{-5}
		6	13.827	-4.25×10^{-7}	-4.67×10^{-5}
		7	11.287	2.95×10^{-4}	6.87×10^{-5}
		8	13.827	-4.25×10^{-7}	-4.67×10^{-5}
1d	<i>C2/c</i>	1	11.174	4.22×10^{-5}	-1.41×10^{-4}
		2	11.174	4.22×10^{-5}	-1.41×10^{-4}
		3	11.174	1.71×10^{-6}	-4.85×10^{-6}
		4	11.174	1.71×10^{-6}	-4.85×10^{-6}
		5	16.501	-1.00×10^{-2}	-4.50×10^{-3}
		6	18.403	1.60×10^{-5}	-1.65×10^{-4}
1e	<i>P2₁/c</i>	1	8.267	1.72×10^{-4}	-9.23×10^{-4}
		2	8.267	1.72×10^{-4}	-9.23×10^{-4}
		3	16.672	-5.65×10^{-6}	6.29×10^{-6}
		4	17.322	-4.86×10^{-5}	-4.99×10^{-5}
		5	16.672	-5.65×10^{-6}	6.29×10^{-6}
		6	17.322	-4.86×10^{-5}	-4.99×10^{-5}
2a	<i>P2₁</i>	1	17.321	9.26×10^{-6}	-3.14×10^{-6}
		2	17.321	9.26×10^{-6}	-3.14×10^{-6}
		3	8.892	-3.90×10^{-3}	-0.0046×10^{-5}
		4	8.892	-3.90×10^{-3}	-0.0046×10^{-5}
		5	12.644	-1.90×10^{-5}	5.44×10^{-5}
		6	12.644	-1.90×10^{-5}	5.44×10^{-5}
		7	12.644	-1.90×10^{-5}	5.44×10^{-5}
		8	12.644	-1.90×10^{-5}	5.44×10^{-5}
2b	<i>P2₁</i>	1	8.786	2.95×10^{-4}	0.0028×10^{-5}
		2	8.786	2.95×10^{-4}	0.0028×10^{-5}
		3	19.334	-2.11×10^{-7}	-1.44×10^{-6}
		4	19.334	-2.11×10^{-7}	-1.44×10^{-6}
		5	15.048	4.99×10^{-5}	-3.35×10^{-5}

Table S6. *Cont.*

Species	Space Groups	Pathway	Distance (Å)	Electron Coupling (eV)	Hole Coupling (eV)
2c	<i>Cc</i>	6	16.987	-2.05×10^{-16}	-3.51×10^{-17}
		7	20.265	-8.51×10^{-18}	-4.14×10^{-17}
		8	12.535	2.44×10^{-4}	-1.55×10^{-4}
		1	15.797	5.06×10^{-6}	-1.27×10^{-5}
		2	15.797	5.06×10^{-6}	-1.27×10^{-5}
		3	15.797	5.06×10^{-6}	-1.27×10^{-5}
		4	15.797	5.06×10^{-6}	-1.27×10^{-5}
		5	13.349	2.25×10^{-5}	1.33×10^{-5}
2d	<i>P212121</i>	6	13.640	7.91×10^{-4}	-2.42×10^{-4}
		7	11.853	-1.02×10^{-4}	-1.23×10^{-4}
		8	13.349	2.25×10^{-5}	1.33×10^{-5}
		1	14.244	-1.34×10^{-5}	3.68×10^{-5}
		2	14.244	-1.34×10^{-5}	3.68×10^{-5}
		3	18.556	6.35×10^{-5}	-8.15×10^{-5}
		4	18.556	6.35×10^{-5}	-8.15×10^{-5}
		5	14.345	-2.45×10^{-4}	3.76×10^{-4}
2e	<i>P\bar{1}</i>	6	14.391	-5.48×10^{-6}	-1.67×10^{-6}
		7	11.297	1.29×10^{-4}	1.54×10^{-4}
		8	11.297	1.29×10^{-4}	1.54×10^{-4}
		1	16.762	2.17×10^{-5}	1.10×10^{-4}
		2	16.762	2.17×10^{-5}	1.10×10^{-4}
		3	19.019	6.73×10^{-6}	1.20×10^{-5}
		4	8.057	-3.31×10^{-4}	-6.33×10^{-4}
		5	14.962	2.52×10^{-4}	7.35×10^{-4}
		6	8.368	2.59×10^{-4}	4.53×10^{-4}