

Supporting Information: Exploring the chemical and structural change of copper porphyrins upon charging by means of synchrotron X-ray absorption spectroscopy

Thomas Smok^{a,b*}, Dr. Yang Hu^a, Dr. Saibal Jana^b, Dr. Frank Pammer^a, Prof. Dr. Maximilian Fichtner^{a,b*}

(a) Helmholtz Institute Ulm (HIU), Electrochemical Energy Storage, Helmholtzstraße 11,
89081 Ulm, Germany

(b) Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Hermann-von-
Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

*corresponding authors: m.fichtner@kit.edu, thomas.smok@kit.edu

Supporting figures

1. *Ex-situ* powder diffraction

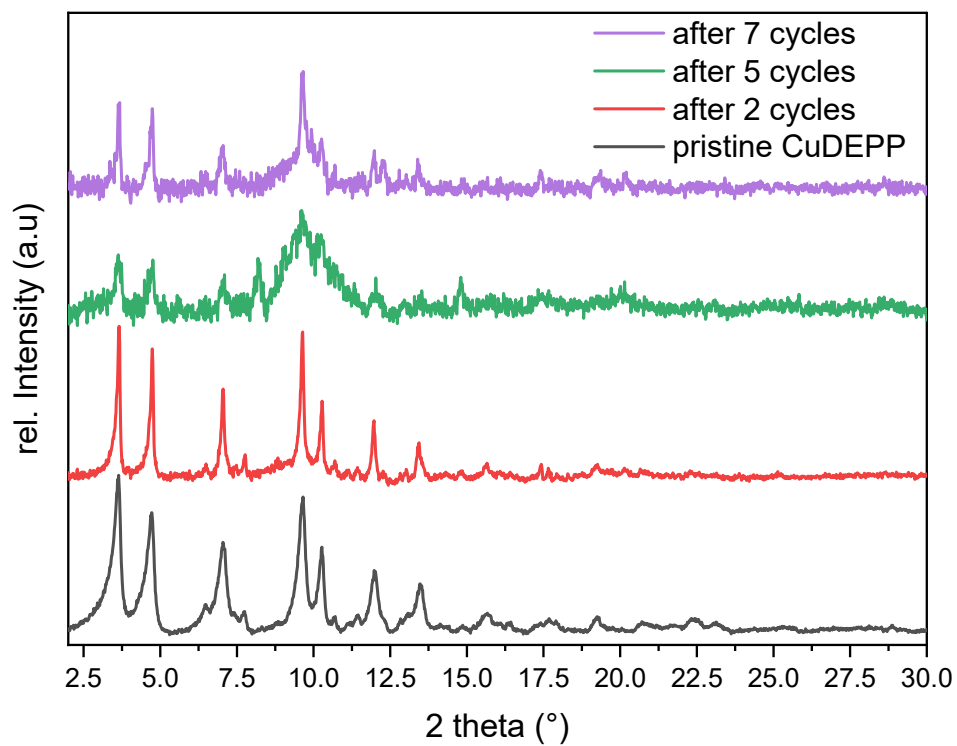


Figure S 1: *Ex-situ* post mortem analysis of CuDEPP-X-ray diffraction pattern compared by cycle number.

2. Theoretical calculations

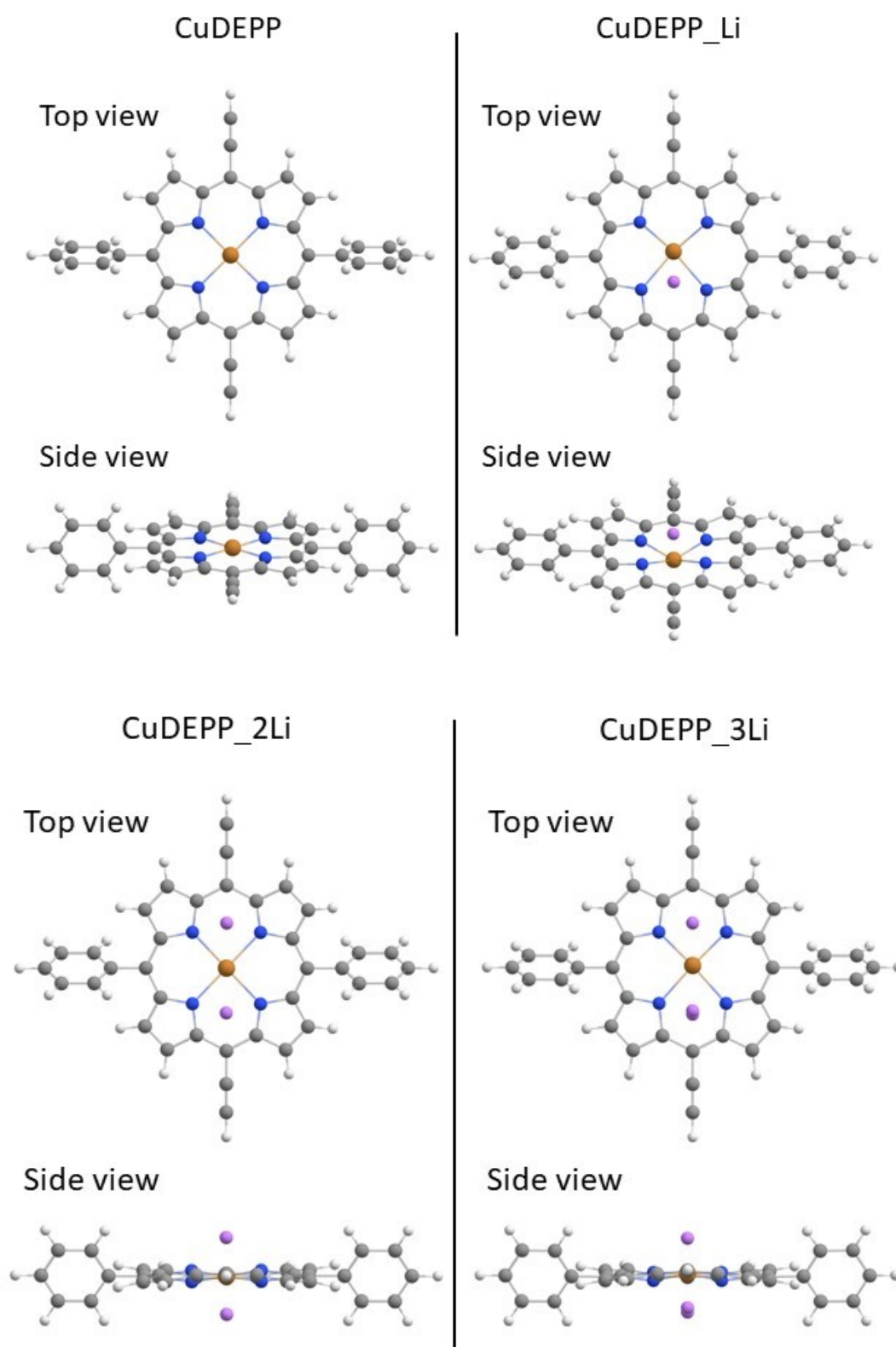


Figure S 2: Molecular structure of CuDEPP in pristine state and after the insertion of one, two and three Lithium ions.

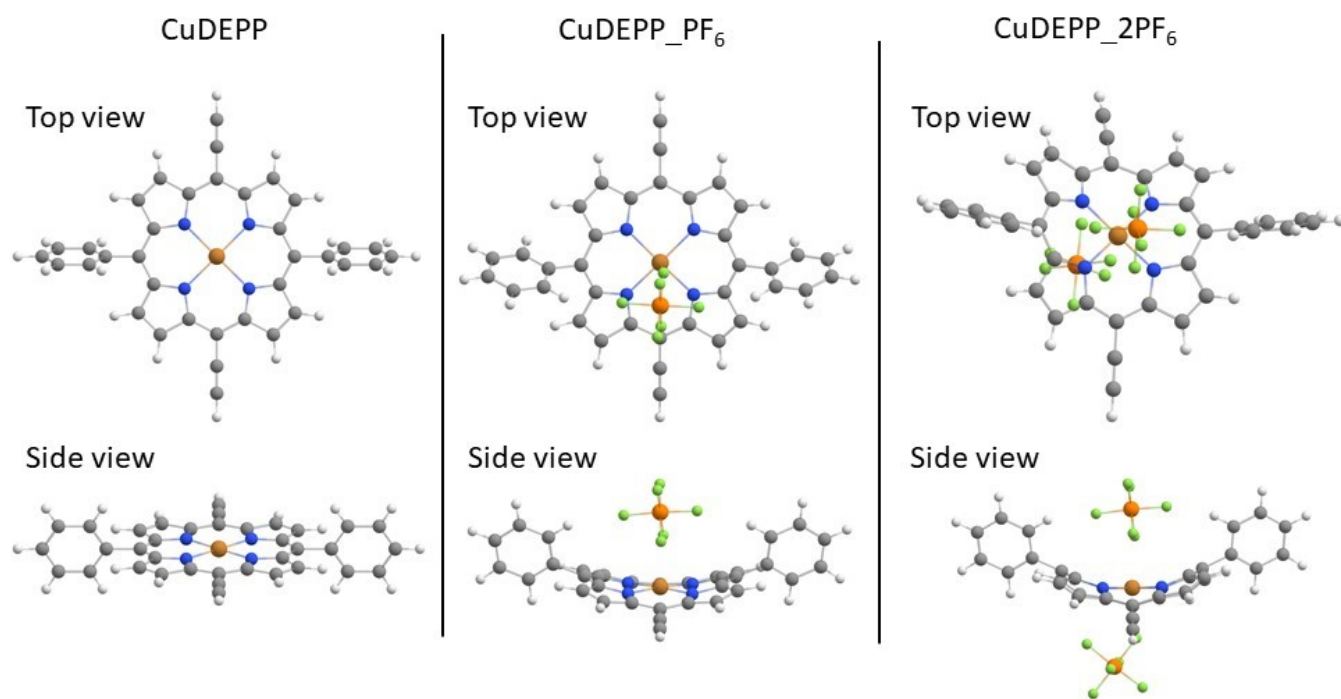


Figure S 3: Bending of molecular structure of CuDEPP after insertion of one and two PF_6^- -anions into the electrodes.

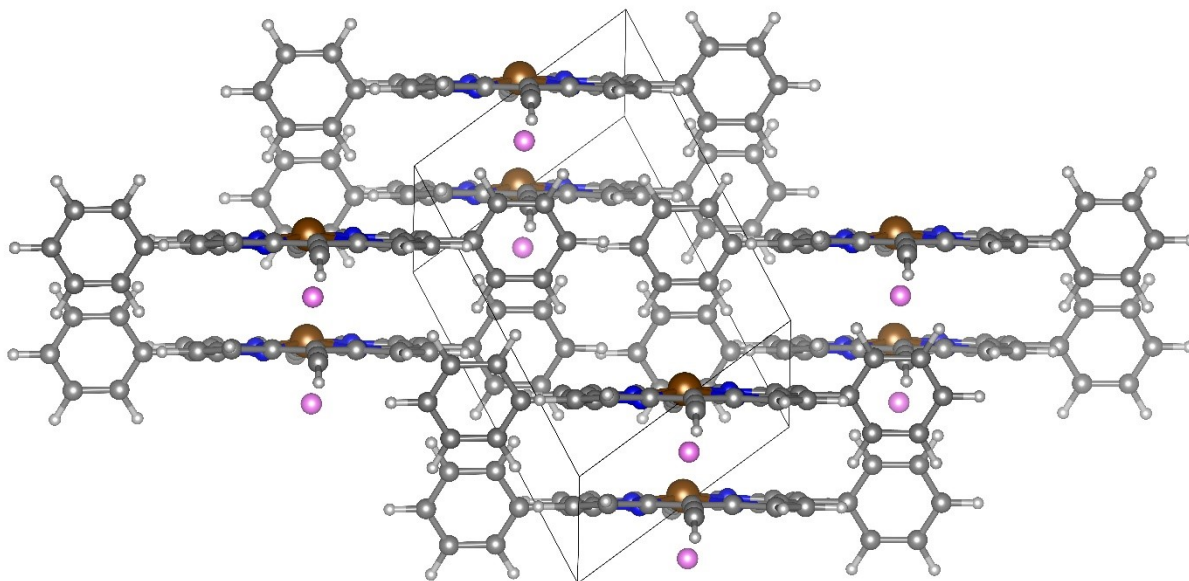


Figure S 4: Theoretical crystal structure when one lithium ion (pink) gets inserted into CuDEPP-electrodes.

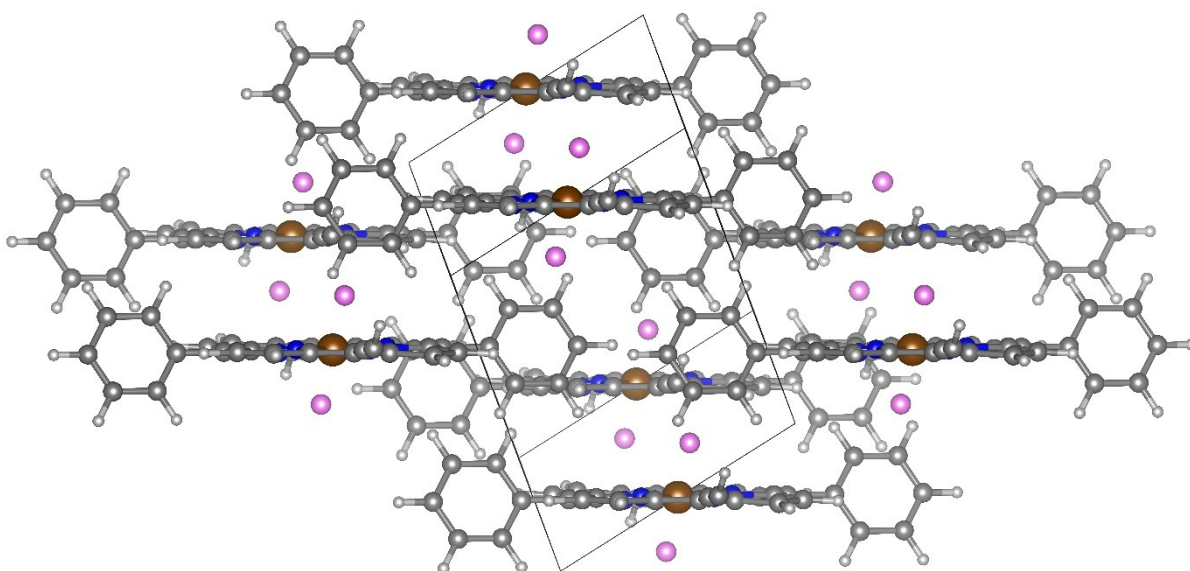


Figure S 5: Theoretical crystal structure when two lithium ions (pink) get inserted into CuDEPP-electrodes.

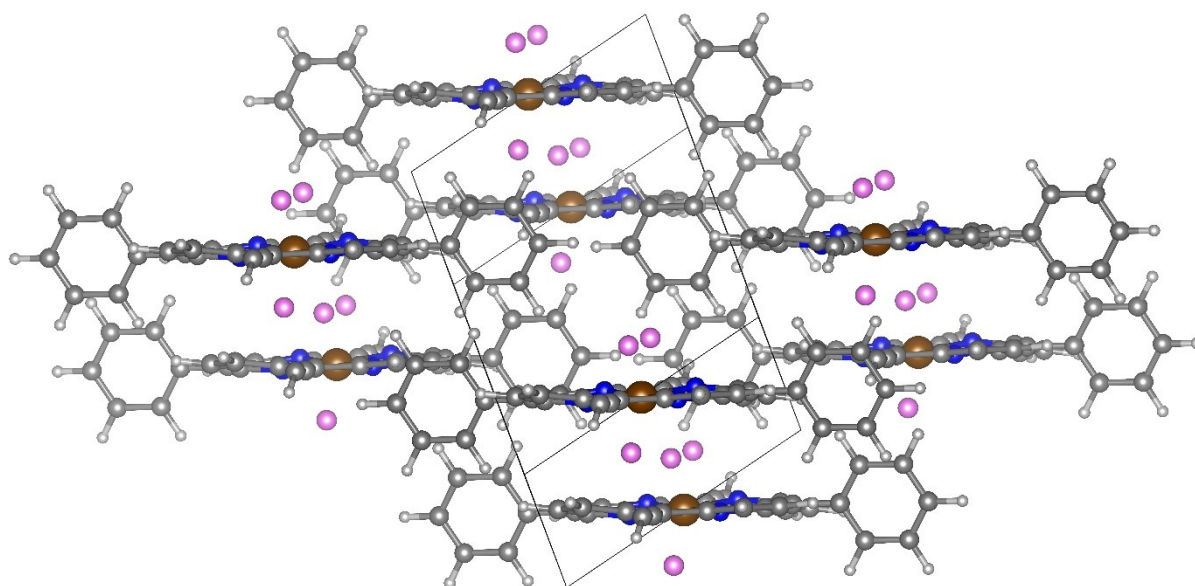


Figure S 6: Theoretical crystal structure when three lithium ions (pink) get inserted into CuDEPP-electrodes.

3. Detail XANES spectra

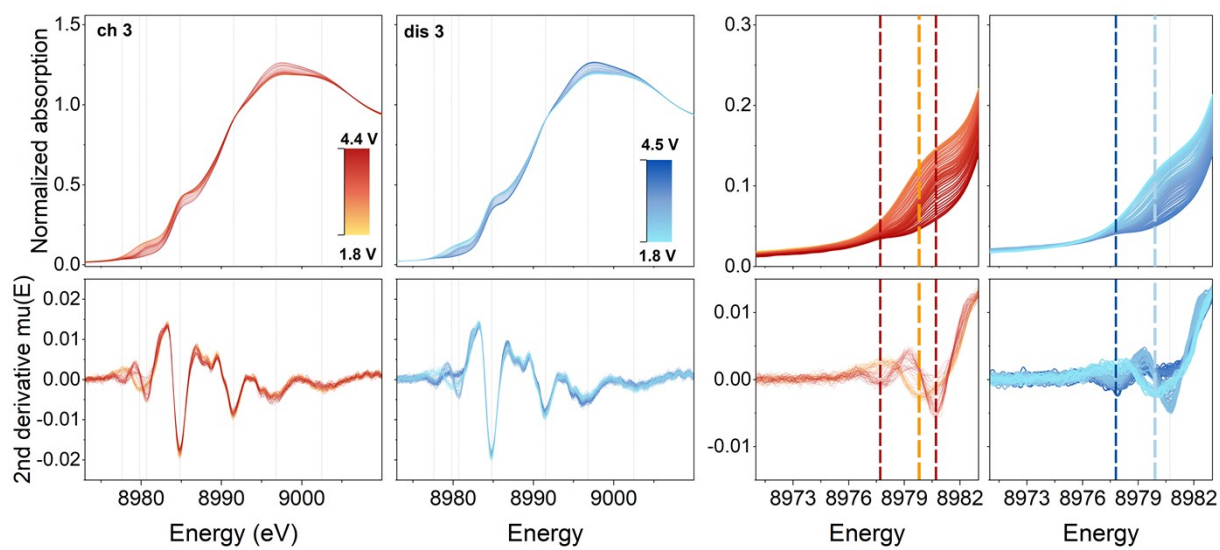


Figure S 7: Evolution of Cu K-edge XANES features from the 3rd cycle of CuDEPP.

4. PCA-analysis

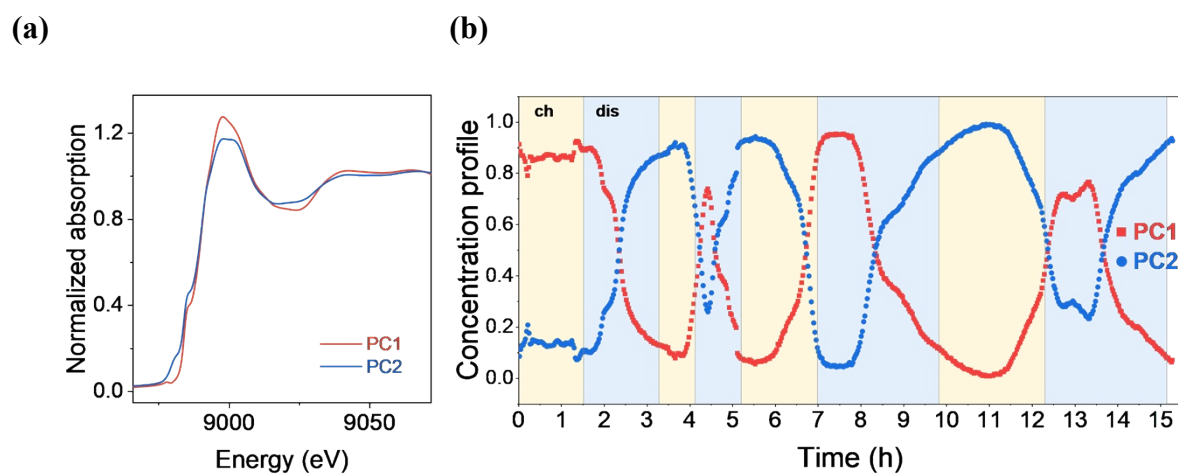


Figure S 8: (a) pure spectra (left) extracted by MCR-ALS and the concentration profile (right); (b) a summary of TS-YH-12 in charged 4.5V and discharged 1.8 V.

5. EXAFS fitting with FEFF paths calculated from different structure models

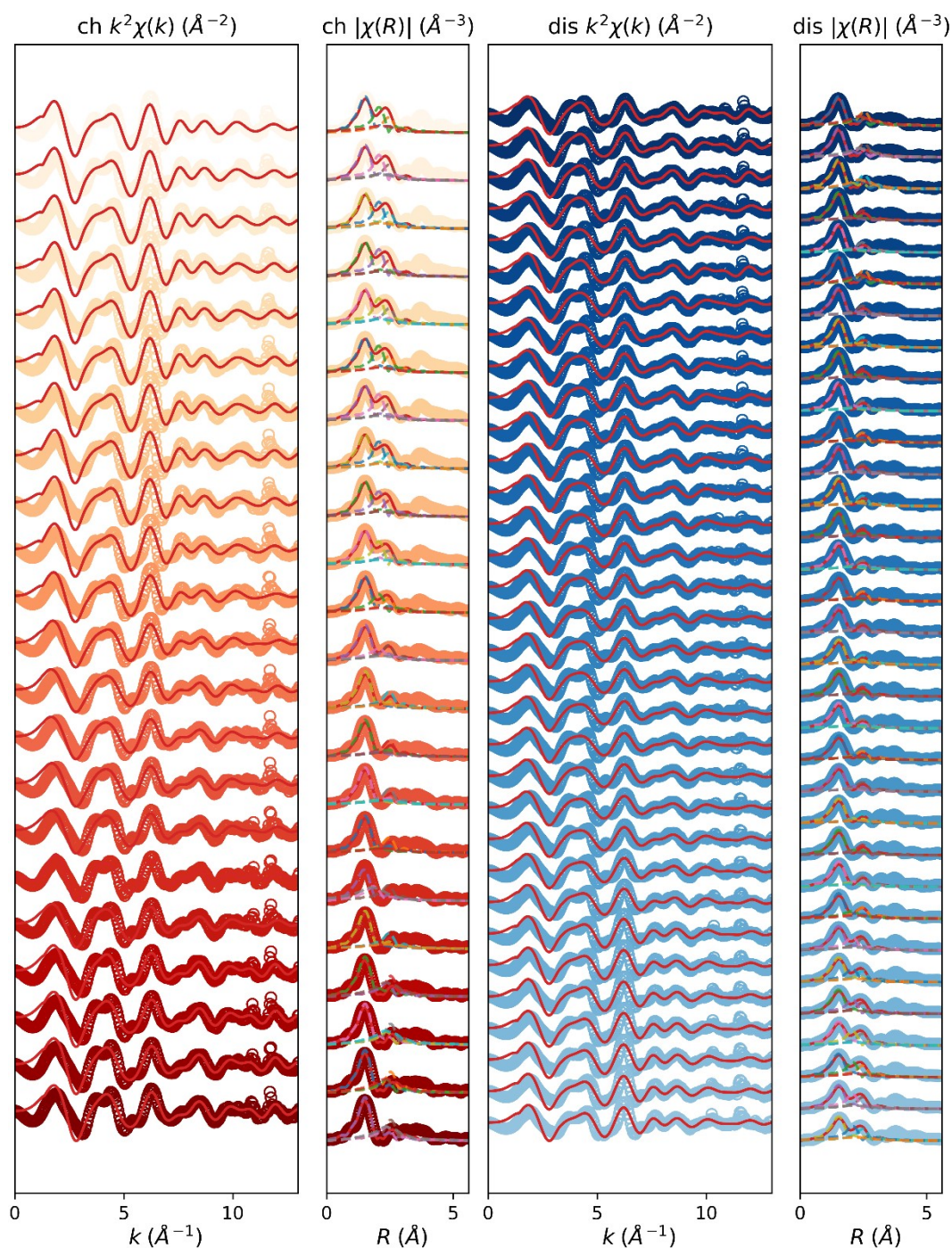


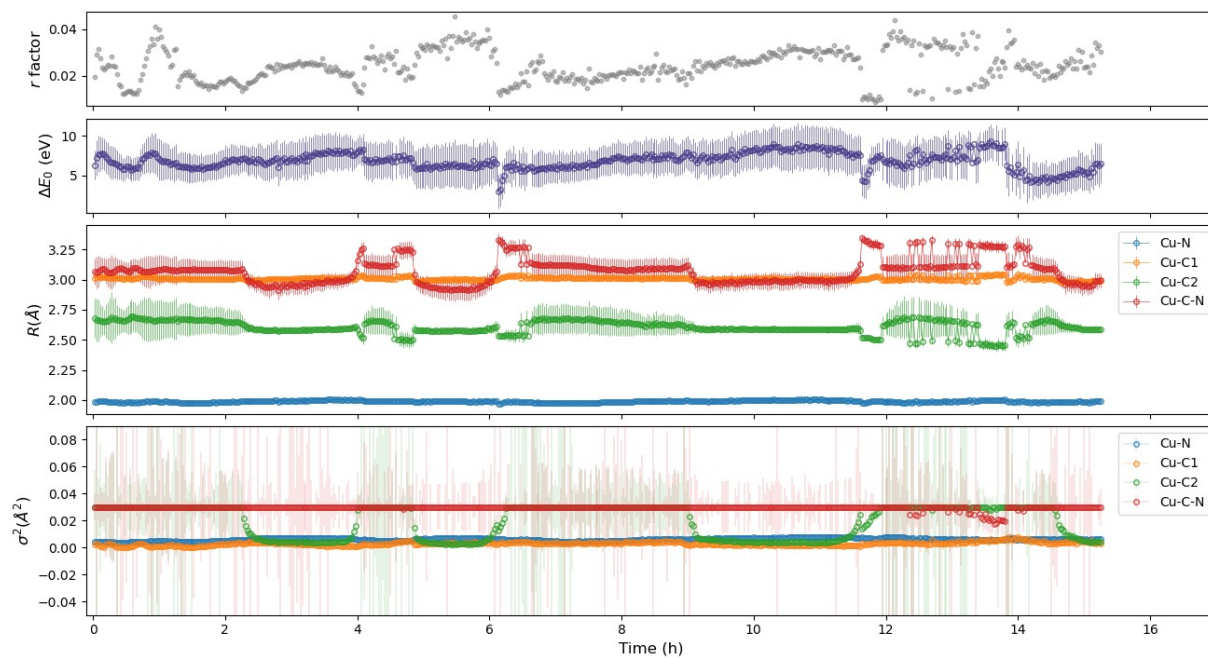
Figure S 9: Example of shell fitting for the third cycle using the 1Li structure model: Lighter-colored indicate lower voltages and darker colors for the higher voltages. Here spectra and fitting from every third acquisition are shown. Orange-to-red circles represent the spectra from charged, and blue for the discharged. Red lines denote the fitted results; dash lines indicate the paths included in the fitting.

Table S1: Shell fitting parameters for charged (4.5V) and discharged (1.8V) states. r-factor represents the relative error of the fit and data; ΔE_0 , R and σ^2 are the energy shifts, half-path length and the disordering factor (mean-square relative displacement in R). Cu-N, Cu-C1 and Cu-C2 are single-scattering paths, for which R equals the interatomic distances; Cu-C-N is a multi-scattering path. Paths degeneracy of Cu-N and Cu-C-N are fixed according to the FEFF calculation model, and that of Cu-C are splitting half and half into Cu-C1 and Cu-C2.

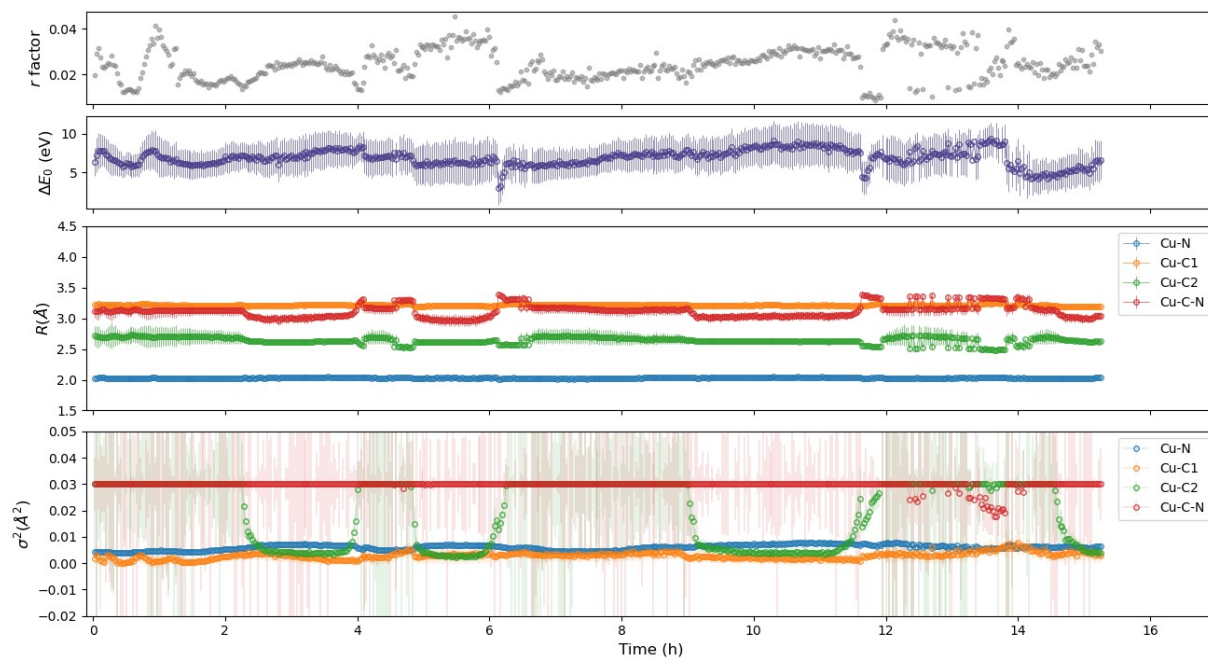
Data		Fitting parameters (S02 = 0.9, all coordination numbers are fixed)												
4.5V	r-facotr	E0	Cu-N			Cu-C			Cu-C-N					
			CN	R (\AA)	σ^2 (\AA^2)	CN	R (\AA)	σ^2 (\AA^2)	CN	R (\AA)	σ^2 (\AA^2)			
C1	0.018	-7(1)		1.98(1)	0.004(1)		3.01(1)	0.004(1)				3.18(3)	0.014(5)	
C2	0.019	-6(1)		2.00(1)	0.006(1)		3.03(1)	0.006(2)				3.18(2)	0.011(4)	
C3	0.022	-7(1)	4	1.98(1)	0.004(1)	8	3.03(1)	0.007(2)			16	3.20(3)	0.012(6)	
C4	0.021	-7(1)		1.98(1)	0.007(1)		3.02(1)	0.009(2)				3.20(3)	0.019(7)	
1.8V	r-facotr	E0	Cu-N			Cu-C1			Cu-C2			Cu-C-N		
			CN	R (\AA)	σ^2 (\AA^2)	CN	R (\AA)	σ^2 (\AA^2)	CN	R (\AA)	σ^2 (\AA^2)	CN	R (\AA)	σ^2 (\AA^2)
C1	0.010	6(1)		1.92(1)	0.007(1)		3.02(1)	0.002(2)		2.56(1)	0.003(1)		2.86(5)	0.03(1)
C2	0.016	6(2)	4	2.02(1)	0.006(1)	5	3.00(2)	0.004(3)	5	2.58(2)	0.003(1)	16	2.91(5)	0.02(1)
C3	0.012	7(2)		1.93(1)	0.007(1)		3.01(1)	0.002(2)		2.58(2)	0.004(1)		2.93(5)	0.030
C4	0.014	7(2)		2.00(1)	0.006(1)		3.00(2)	0.004(2)		2.58(2)	0.003(1)		2.94(5)	0.030(2)

6. Fitted parameters based on the different structure models

(a) Structure model with one Li



(b) Structure model with two Li



(c) Structure model with three Li

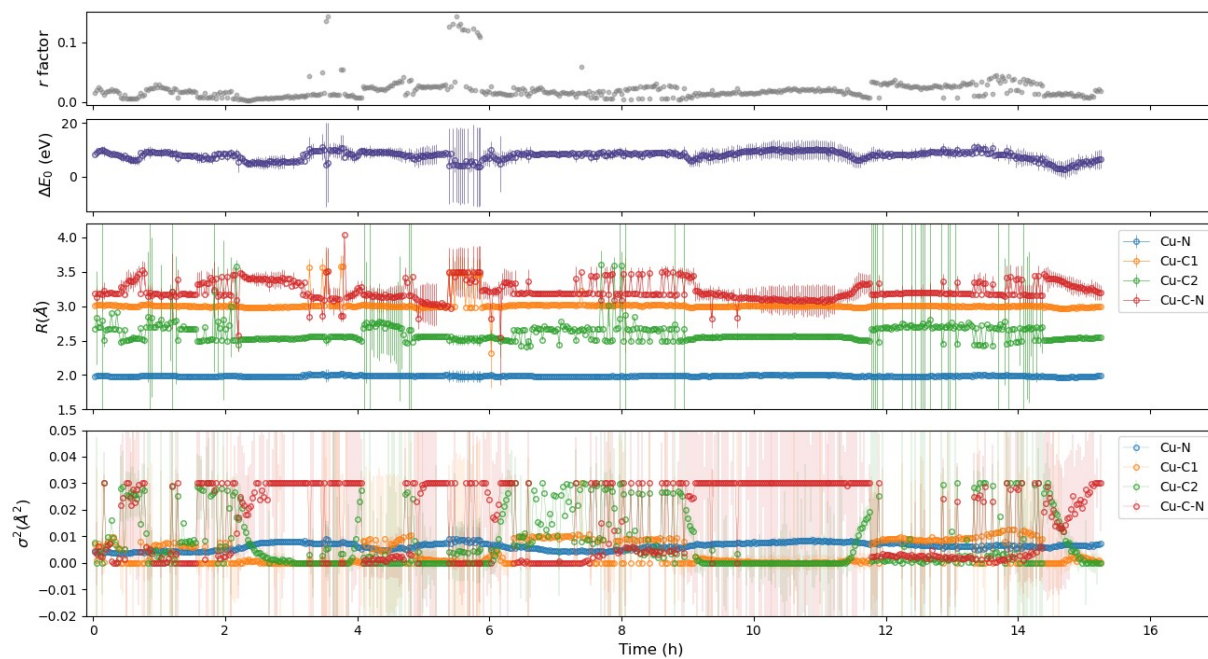


Figure S 10: Evolution of fitted parameters based on FEFF fitting using the structure model with one (a), two (b) and three (c) lithium: r -factor represents the relative error of the fit and data; ΔE_0 , R and σ^2 are the energy shifts, half-path length and the disordering factor (mean-square relative displacement in R).

7. Tables of XANES Edge Energies

Table S2: The energy position corresponding to edge step 0.3, 0.5 and 0.7 on the rising edge.

E (V, vs. Li ⁺ /Li)	Energy at edge step = 0.3 (eV)	Energy at edge step = 0.5 (eV)	Energy at edge step = 0.7 (eV)
3.22	8983.72	8987.55	8989.79
3.22	8983.72	8987.56	8989.81
3.22	8983.72	8987.55	8989.79
3.22	8983.70	8987.52	8989.78
3.22	8983.71	8987.51	8989.78
3.22	8983.72	8987.50	8989.77
3.24	8983.72	8987.45	8989.75
3.34	8983.74	8987.42	8989.74
3.44	8983.75	8987.36	8989.71
3.54	8983.77	8987.28	8989.67
3.64	8983.78	8987.21	8989.63
3.74	8983.82	8987.13	8989.61
3.84	8983.84	8987.05	8989.57
3.94	8983.87	8987.03	8989.56
4.04	8983.89	8987.02	8989.53
4.14	8983.91	8987.03	8989.53
4.24	8983.95	8987.08	8989.54
4.34	8983.97	8987.12	8989.54
4.44	8984.02	8987.19	8989.57
4.50	8984.05	8987.28	8989.60
4.50	8984.08	8987.36	8989.62
4.50	8984.10	8987.42	8989.64
4.50	8984.13	8987.49	8989.66
4.50	8984.15	8987.52	8989.68
4.50	8984.16	8987.57	8989.70
4.50	8984.16	8987.57	8989.69
4.50	8984.16	8987.58	8989.70
4.50	8984.14	8987.55	8989.68
4.50	8984.12	8987.49	8989.67
4.50	8984.07	8987.41	8989.64
4.50	8984.03	8987.33	8989.61
4.50	8983.99	8987.26	8989.58
4.50	8983.97	8987.20	8989.56
4.50	8983.96	8987.14	8989.55
4.50	8983.94	8987.11	8989.53
4.50	8983.93	8987.07	8989.52
4.50	8983.93	8987.05	8989.52
4.50	8983.94	8987.04	8989.52
4.50	8983.94	8987.03	8989.51
4.50	8983.93	8987.01	8989.50
4.50	8983.93	8987.01	8989.51

4.50	8983.92	8987.05	8989.53
4.50	8983.89	8987.36	8989.68
4.50	8983.86	8987.58	8989.78
4.50	8983.83	8987.63	8989.80
4.50	8983.82	8987.64	8989.80
4.50	8983.82	8987.64	8989.81
4.50	8983.80	8987.62	8989.80
4.50	8983.79	8987.61	8989.80
4.50	8983.78	8987.60	8989.79
4.50	8983.70	8987.48	8989.75
4.50	8983.68	8987.47	8989.74
4.50	8983.68	8987.47	8989.76
4.50	8983.68	8987.45	8989.75
4.50	8983.67	8987.44	8989.74
4.46	8983.67	8987.43	8989.74
4.36	8983.67	8987.42	8989.74
4.26	8983.68	8987.41	8989.74
4.16	8983.69	8987.39	8989.73
4.06	8983.69	8987.41	8989.72
3.96	8983.70	8987.41	8989.72
3.86	8983.70	8987.42	8989.72
3.76	8983.70	8987.40	8989.72
3.66	8983.70	8987.41	8989.72
3.56	8983.70	8987.42	8989.72
3.46	8983.70	8987.44	8989.72
3.36	8983.70	8987.43	8989.71
3.26	8983.71	8987.46	8989.72
3.16	8983.70	8987.47	8989.73
3.06	8983.69	8987.46	8989.73
2.96	8983.69	8987.45	8989.74
2.86	8983.69	8987.46	8989.73
2.76	8983.69	8987.44	8989.74
2.66	8983.69	8987.48	8989.75
2.56	8983.70	8987.47	8989.75
2.46	8983.70	8987.46	8989.76
2.36	8983.70	8987.47	8989.75
2.26	8983.70	8987.45	8989.75
2.16	8983.70	8987.43	8989.73
2.06	8983.71	8987.41	8989.73
1.96	8983.71	8987.38	8989.71
1.86	8983.72	8987.34	8989.70
1.80	8983.72	8987.30	8989.68
1.80	8983.74	8987.28	8989.68
1.80	8983.76	8987.23	8989.65
1.80	8983.74	8987.15	8989.62
1.80	8983.75	8987.10	8989.60
1.80	8983.77	8987.07	8989.58

1.80	8983.78	8987.00	8989.54
1.80	8983.79	8986.96	8989.53
1.80	8983.80	8986.91	8989.52
1.80	8983.80	8986.89	8989.48
1.80	8983.82	8986.87	8989.48
1.80	8983.82	8986.85	8989.47
1.80	8983.84	8986.86	8989.48
1.80	8983.83	8986.83	8989.46
1.80	8983.84	8986.85	8989.46
1.80	8983.84	8986.85	8989.45
1.80	8983.86	8986.87	8989.46
1.80	8983.86	8986.88	8989.46
1.80	8983.86	8986.89	8989.46
1.80	8983.87	8986.91	8989.46
1.80	8983.89	8986.96	8989.49
1.80	8983.90	8987.00	8989.50
1.80	8983.93	8987.07	8989.52
1.80	8983.95	8987.11	8989.53
1.80	8983.96	8987.17	8989.54
1.80	8983.98	8987.23	8989.56
1.80	8984.02	8987.32	8989.60
1.80	8984.05	8987.38	8989.63
1.80	8984.06	8987.42	8989.62
1.80	8984.09	8987.49	8989.63
1.80	8984.14	8987.57	8989.68
1.80	8984.16	8987.64	8989.70
1.80	8984.19	8987.69	8989.73
1.80	8984.20	8987.72	8989.72
1.80	8984.23	8987.78	8989.75
1.80	8984.25	8987.81	8989.76
1.84	8984.26	8987.83	8989.78
1.94	8984.27	8987.86	8989.79
2.04	8984.27	8987.86	8989.78
2.14	8984.28	8987.88	8989.79
2.24	8984.29	8987.89	8989.79
2.34	8984.29	8987.90	8989.80
2.44	8984.30	8987.90	8989.80
2.54	8984.31	8987.92	8989.82
2.64	8984.30	8987.91	8989.80
2.74	8984.30	8987.91	8989.80
2.84	8984.32	8987.93	8989.81
2.94	8984.30	8987.92	8989.80
3.04	8984.30	8987.91	8989.80
3.14	8984.31	8987.93	8989.80
3.01	8984.31	8987.93	8989.81
3.11	8984.31	8987.93	8989.81
3.21	8984.31	8987.93	8989.81

3.31	8984.31	8987.93	8989.81
3.41	8984.30	8987.92	8989.80
3.51	8984.31	8987.93	8989.80
3.61	8984.31	8987.93	8989.80
3.71	8984.31	8987.94	8989.81
3.81	8984.31	8987.93	8989.81
3.91	8984.30	8987.92	8989.80
4.01	8984.31	8987.94	8989.81
4.11	8984.30	8987.93	8989.80
4.21	8984.30	8987.94	8989.82
4.31	8984.31	8987.96	8989.84
4.41	8984.34	8987.96	8989.84
4.49	8984.33	8987.95	8989.82
4.39	8984.29	8987.91	8989.81
4.29	8984.27	8987.90	8989.80
4.19	8984.27	8987.90	8989.80
4.09	8984.26	8987.89	8989.80
3.99	8984.25	8987.86	8989.78
3.89	8984.27	8987.88	8989.82
3.79	8984.23	8987.83	8989.79
3.69	8984.21	8987.79	8989.76
3.59	8984.18	8987.75	8989.74
3.49	8984.16	8987.71	8989.72
3.39	8984.13	8987.66	8989.70
3.29	8984.12	8987.62	8989.70
3.19	8984.10	8987.59	8989.69
3.09	8984.07	8987.52	8989.66
2.99	8984.06	8987.50	8989.66
2.89	8984.04	8987.45	8989.65
2.79	8984.02	8987.43	8989.64
2.69	8984.00	8987.39	8989.63
2.59	8983.97	8987.34	8989.61
2.49	8983.97	8987.33	8989.61
2.39	8983.95	8987.28	8989.59
2.29	8983.95	8987.26	8989.58
2.19	8983.93	8987.23	8989.58
2.09	8983.92	8987.19	8989.56
1.99	8983.92	8987.19	8989.56
1.89	8983.91	8987.16	8989.55
1.80	8983.91	8987.18	8989.57
1.80	8983.91	8987.15	8989.56
1.80	8983.90	8987.13	8989.54
1.80	8983.90	8987.12	8989.54
1.80	8983.90	8987.13	8989.55
1.80	8983.90	8987.11	8989.54
1.80	8983.89	8987.10	8989.54
1.80	8983.89	8987.09	8989.52

1.80	8983.89	8987.11	8989.53
1.80	8983.88	8987.09	8989.53
1.80	8983.88	8987.07	8989.52
1.80	8983.88	8987.07	8989.52
1.81	8983.87	8987.05	8989.52
1.91	8983.88	8987.07	8989.52
2.01	8983.88	8987.09	8989.54
2.11	8983.88	8987.12	8989.56
2.21	8983.86	8987.16	8989.57
2.31	8983.86	8987.21	8989.60
2.41	8983.86	8987.30	8989.65
2.51	8983.84	8987.36	8989.67
2.61	8983.82	8987.40	8989.69
2.71	8983.81	8987.50	8989.73
2.81	8983.81	8987.54	8989.75
2.91	8983.81	8987.61	8989.78
2.97	8983.80	8987.59	8989.77
3.00	8983.80	8987.60	8989.79
3.03	8983.79	8987.59	8989.78
3.06	8983.79	8987.59	8989.79
3.09	8983.77	8987.58	8989.77
3.12	8983.78	8987.60	8989.78
3.15	8983.77	8987.58	8989.76
3.18	8983.76	8987.56	8989.76
3.21	8983.76	8987.56	8989.76
3.24	8983.75	8987.57	8989.77
3.27	8983.75	8987.58	8989.78
3.30	8983.75	8987.55	8989.77
3.33	8983.75	8987.56	8989.77
3.36	8983.74	8987.55	8989.76
3.39	8983.75	8987.55	8989.76
3.42	8983.74	8987.55	8989.77
3.45	8983.74	8987.54	8989.76
3.48	8983.75	8987.53	8989.76
3.51	8983.76	8987.57	8989.78
3.54	8983.74	8987.53	8989.75
3.57	8983.73	8987.52	8989.75
3.60	8983.75	8987.56	8989.78
3.63	8983.74	8987.55	8989.76
3.66	8983.74	8987.55	8989.77
3.69	8983.74	8987.56	8989.78
3.72	8983.72	8987.52	8989.76
3.75	8983.74	8987.54	8989.78
3.78	8983.74	8987.54	8989.77
3.81	8983.72	8987.55	8989.77
3.84	8983.71	8987.53	8989.76
3.87	8983.72	8987.53	8989.77

3.90	8983.72	8987.54	8989.78
3.93	8983.72	8987.52	8989.77
3.96	8983.70	8987.52	8989.76
3.99	8983.70	8987.52	8989.76
4.02	8983.70	8987.52	8989.75
4.05	8983.70	8987.51	8989.76
4.08	8983.70	8987.51	8989.76
4.11	8983.70	8987.50	8989.74
4.14	8983.70	8987.51	8989.75
4.17	8983.71	8987.52	8989.76
4.20	8983.70	8987.51	8989.77
4.23	8983.70	8987.50	8989.75
4.26	8983.69	8987.50	8989.75
4.29	8983.68	8987.47	8989.73
4.32	8983.69	8987.51	8989.76
4.35	8983.69	8987.49	8989.75
4.38	8983.68	8987.48	8989.74
4.41	8983.69	8987.51	8989.76
4.44	8983.69	8987.49	8989.75
4.47	8983.68	8987.47	8989.75
4.50	8983.68	8987.49	8989.75
4.47	8983.69	8987.50	8989.76
4.44	8983.68	8987.50	8989.76
4.41	8983.68	8987.49	8989.75
4.38	8983.69	8987.50	8989.76
4.35	8983.68	8987.50	8989.75
4.32	8983.68	8987.48	8989.75
4.29	8983.67	8987.47	8989.75
4.26	8983.67	8987.48	8989.74
4.23	8983.68	8987.47	8989.74
4.20	8983.66	8987.46	8989.74
4.17	8983.67	8987.48	8989.75
4.14	8983.66	8987.47	8989.73
4.11	8983.66	8987.45	8989.73
4.08	8983.68	8987.49	8989.75
4.05	8983.66	8987.44	8989.73
4.02	8983.67	8987.48	8989.75
3.99	8983.68	8987.45	8989.75
3.96	8983.68	8987.45	8989.74
3.93	8983.69	8987.45	8989.74
3.90	8983.69	8987.48	8989.76
3.87	8983.68	8987.45	8989.74
3.84	8983.68	8987.42	8989.72
3.81	8983.69	8987.44	8989.73
3.78	8983.70	8987.43	8989.74
3.75	8983.69	8987.39	8989.71
3.72	8983.71	8987.40	8989.71

3.69	8983.69	8987.35	8989.69
3.66	8983.68	8987.29	8989.66
3.63	8983.71	8987.30	8989.67
3.60	8983.72	8987.28	8989.66
3.57	8983.72	8987.26	8989.64
3.54	8983.73	8987.22	8989.63
3.51	8983.73	8987.19	8989.62
3.48	8983.74	8987.15	8989.61
3.45	8983.75	8987.13	8989.59
3.42	8983.75	8987.08	8989.56
3.39	8983.76	8987.09	8989.56
3.36	8983.77	8987.06	8989.55
3.33	8983.79	8987.05	8989.54
3.30	8983.80	8987.03	8989.53
3.27	8983.80	8987.01	8989.52
3.24	8983.82	8986.99	8989.51
3.21	8983.81	8986.95	8989.50
3.18	8983.83	8986.95	8989.49
3.15	8983.84	8986.96	8989.49
3.12	8983.85	8986.96	8989.48
3.09	8983.85	8986.96	8989.48
3.06	8983.86	8986.97	8989.47
3.03	8983.86	8986.96	8989.45
3.00	8983.88	8986.99	8989.47
2.97	8983.88	8986.98	8989.46
2.94	8983.89	8986.99	8989.46
2.91	8983.91	8987.04	8989.49
2.88	8983.93	8987.05	8989.49
2.85	8983.93	8987.07	8989.50
2.82	8983.93	8987.05	8989.49
2.79	8983.95	8987.11	8989.51
2.76	8983.98	8987.17	8989.53
2.73	8983.98	8987.20	8989.54
2.70	8984.00	8987.24	8989.55
2.67	8984.02	8987.28	8989.57
2.64	8984.05	8987.35	8989.60
2.61	8984.06	8987.38	8989.60
2.58	8984.09	8987.43	8989.63
2.55	8984.10	8987.47	8989.65
2.52	8984.12	8987.52	8989.66
2.49	8984.14	8987.55	8989.67
2.46	8984.15	8987.57	8989.67
2.43	8984.16	8987.60	8989.69
2.40	8984.17	8987.61	8989.68
2.37	8984.19	8987.65	8989.71
2.34	8984.19	8987.66	8989.71
2.31	8984.19	8987.67	8989.71

2.28	8984.21	8987.70	8989.73
2.25	8984.21	8987.71	8989.73
2.22	8984.19	8987.68	8989.71
2.19	8984.21	8987.73	8989.74
2.16	8984.21	8987.73	8989.74
2.13	8984.19	8987.73	8989.74
2.10	8984.17	8987.73	8989.74
2.07	8984.14	8987.73	8989.74
2.04	8984.12	8987.73	8989.73
2.01	8984.09	8987.68	8989.73
1.98	8984.09	8987.66	8989.72
1.95	8984.11	8987.62	8989.72
1.92	8984.11	8987.54	8989.68
1.89	8984.15	8987.53	8989.65
1.86	8984.15	8987.50	8989.60
1.83	8984.18	8987.53	8989.59
1.80	8984.19	8987.58	8989.59
1.80	8984.19	8987.60	8989.58
1.80	8984.19	8987.65	8989.61
1.80	8984.17	8987.65	8989.62
1.80	8984.19	8987.67	8989.66
1.80	8984.17	8987.66	8989.66
1.80	8984.18	8987.67	8989.68
1.80	8984.17	8987.66	8989.68
1.80	8984.15	8987.62	8989.67
1.80	8984.15	8987.63	8989.69
1.80	8984.13	8987.60	8989.67
1.80	8984.13	8987.60	8989.69
1.80	8984.12	8987.57	8989.67
1.83	8984.09	8987.54	8989.65
1.86	8984.08	8987.50	8989.64
1.89	8984.07	8987.49	8989.65
1.92	8984.05	8987.45	8989.63
1.95	8984.01	8987.39	8989.60
1.98	8984.00	8987.37	8989.60
2.01	8983.98	8987.33	8989.57
2.04	8983.97	8987.30	8989.57
2.07	8983.96	8987.30	8989.59
2.10	8983.94	8987.25	8989.56
2.13	8983.94	8987.25	8989.56
2.16	8983.92	8987.21	8989.54
2.19	8983.91	8987.20	8989.55
2.22	8983.90	8987.17	8989.55
2.25	8983.89	8987.17	8989.55
2.28	8983.85	8987.08	8989.50
2.31	8983.87	8987.12	8989.53
2.34	8983.86	8987.09	8989.52

2.37	8983.85	8987.08	8989.52
2.40	8983.85	8987.07	8989.52
2.43	8983.83	8987.03	8989.50
2.46	8983.82	8987.03	8989.50
2.49	8983.80	8986.99	8989.48
2.52	8983.82	8986.99	8989.49
2.55	8983.81	8986.98	8989.49
2.58	8983.81	8986.95	8989.47
2.61	8983.80	8986.94	8989.48
2.64	8983.80	8986.92	8989.46
2.67	8983.80	8986.90	8989.45
2.70	8983.80	8986.90	8989.45
2.73	8983.80	8986.91	8989.45
2.76	8983.79	8986.90	8989.45
2.79	8983.80	8986.92	8989.47
2.82	8983.80	8986.93	8989.47
2.85	8983.79	8986.91	8989.46
2.88	8983.79	8986.92	8989.46
2.91	8983.79	8986.94	8989.48
2.94	8983.79	8986.96	8989.50
2.97	8983.78	8986.96	8989.50
3.00	8983.78	8987.00	8989.51
3.03	8983.77	8987.02	8989.52
3.06	8983.77	8987.05	8989.54
3.09	8983.76	8987.10	8989.56
3.12	8983.74	8987.08	8989.55
3.15	8983.75	8987.13	8989.58
3.18	8983.75	8987.18	8989.59
3.21	8983.75	8987.19	8989.61
3.24	8983.74	8987.19	8989.61
3.27	8983.74	8987.21	8989.62
3.30	8983.74	8987.26	8989.64
3.33	8983.73	8987.26	8989.64
3.36	8983.73	8987.25	8989.63
3.39	8983.73	8987.30	8989.66
3.42	8983.72	8987.28	8989.66
3.45	8983.72	8987.33	8989.68
3.48	8983.72	8987.34	8989.68
3.51	8983.73	8987.40	8989.71
3.54	8983.72	8987.38	8989.70
3.57	8983.71	8987.41	8989.71
3.60	8983.70	8987.40	8989.71
3.63	8983.70	8987.42	8989.71
3.66	8983.71	8987.43	8989.73
3.69	8983.70	8987.44	8989.73
3.72	8983.69	8987.43	8989.73
3.75	8983.71	8987.46	8989.75

3.78	8984.11	8988.24	8990.08
3.81	8984.09	8988.20	8990.07
3.84	8984.08	8988.20	8990.06
3.87	8984.08	8988.20	8990.07
3.90	8984.08	8988.21	8990.07
3.93	8984.07	8988.20	8990.06
3.96	8984.05	8988.16	8990.05
3.99	8984.00	8988.09	8990.02
4.02	8984.02	8988.04	8989.97
4.05	8984.05	8988.13	8990.01
4.08	8984.05	8988.14	8990.02
4.11	8984.06	8988.14	8990.03
4.14	8984.07	8988.14	8990.02
4.17	8984.06	8988.13	8990.02
4.20	8984.06	8988.13	8990.02
4.23	8984.07	8988.15	8990.04
4.26	8984.07	8988.15	8990.04
4.29	8984.06	8988.15	8990.03
4.32	8984.07	8988.14	8990.03
4.35	8984.08	8988.15	8990.03
4.38	8984.08	8988.15	8990.03
4.41	8984.09	8988.18	8990.05
4.44	8984.09	8988.16	8990.04
4.47	8984.09	8988.16	8990.04
4.50	8984.08	8988.14	8990.03
4.47	8984.10	8988.16	8990.04
4.44	8984.09	8988.16	8990.03
4.41	8984.10	8988.16	8990.04
4.38	8984.10	8988.15	8990.03
4.35	8984.10	8988.15	8990.04
4.32	8984.09	8988.15	8990.03
4.29	8984.10	8988.15	8990.03
4.26	8984.09	8988.15	8990.03
4.23	8984.10	8988.16	8990.03
4.20	8984.11	8988.14	8990.03
4.17	8984.12	8988.16	8990.03
4.14	8984.11	8988.13	8990.01
4.11	8984.11	8988.13	8990.02
4.08	8984.13	8988.15	8990.04
4.05	8984.11	8988.13	8990.02
4.02	8984.12	8988.12	8990.01
3.99	8984.12	8988.12	8990.01
3.96	8984.12	8988.12	8990.01
3.93	8984.12	8988.11	8990.02
3.90	8984.11	8988.09	8990.00
3.87	8984.11	8988.06	8989.97
3.84	8984.11	8988.07	8989.99

3.81	8984.13	8988.06	8989.98
3.78	8984.13	8988.05	8989.97
3.75	8984.13	8988.05	8989.96
3.72	8984.13	8988.02	8989.93
3.69	8984.13	8988.02	8989.92
3.66	8984.13	8988.00	8989.90
3.63	8984.14	8987.96	8989.87
3.60	8984.14	8987.96	8989.87
3.57	8984.15	8987.95	8989.87
3.54	8984.14	8987.93	8989.86
3.51	8984.15	8987.94	8989.87
3.48	8984.16	8987.93	8989.87
3.45	8984.15	8987.92	8989.86
3.42	8984.15	8987.92	8989.87
3.39	8984.14	8987.89	8989.87
3.36	8984.13	8987.88	8989.87
3.33	8984.12	8987.88	8989.88
3.30	8984.11	8987.88	8989.88
3.27	8984.09	8987.89	8989.88
3.24	8984.07	8987.90	8989.89
3.21	8984.05	8987.91	8989.90
3.18	8984.03	8987.90	8989.90
3.15	8984.02	8987.88	8989.90
3.12	8984.02	8987.86	8989.89
3.09	8984.00	8987.85	8989.88
3.06	8984.01	8987.84	8989.88
3.03	8984.01	8987.84	8989.89
3.00	8984.02	8987.85	8989.89
2.97	8984.02	8987.83	8989.87
2.94	8984.02	8987.82	8989.87
2.91	8984.01	8987.80	8989.86
2.88	8984.01	8987.76	8989.84
2.85	8984.00	8987.75	8989.82
2.82	8983.98	8987.76	8989.83
2.79	8983.95	8987.82	8989.85
2.76	8983.93	8987.83	8989.85
2.73	8983.91	8987.82	8989.85
2.70	8983.88	8987.78	8989.83
2.67	8983.88	8987.76	8989.83
2.64	8983.85	8987.71	8989.81
2.61	8983.84	8987.69	8989.80
2.58	8983.82	8987.66	8989.79
2.55	8983.83	8987.67	8989.81
2.52	8983.81	8987.64	8989.81
2.49	8983.81	8987.62	8989.79
2.46	8983.79	8987.60	8989.77
2.43	8983.79	8987.60	8989.78

2.40	8983.78	8987.56	8989.75
2.37	8983.78	8987.59	8989.77
2.34	8983.79	8987.60	8989.78
2.31	8983.77	8987.56	8989.76
2.28	8983.78	8987.57	8989.77
2.25	8983.77	8987.56	8989.78
2.22	8983.76	8987.56	8989.76
2.19	8983.75	8987.56	8989.76
2.16	8983.75	8987.55	8989.76
2.13	8983.75	8987.55	8989.77
2.10	8983.75	8987.54	8989.76
2.07	8983.75	8987.56	8989.78
2.04	8983.75	8987.56	8989.77
2.01	8983.73	8987.53	8989.75
1.98	8983.74	8987.54	8989.75
1.95	8983.73	8987.55	8989.76
1.92	8983.74	8987.55	8989.76
1.89	8983.73	8987.54	8989.76
1.86	8983.73	8987.56	8989.77
1.83	8983.72	8987.55	8989.78
1.80	8983.72	8987.54	8989.77
1.80	8983.73	8987.55	8989.79
1.80	8983.71	8987.55	8989.78
1.80	8983.71	8987.54	8989.78
1.80	8983.72	8987.54	8989.78
1.80	8983.71	8987.53	8989.78
1.80	8983.72	8987.54	8989.79
1.80	8983.71	8987.55	8989.79
1.80	8983.72	8987.54	8989.79
1.80	8983.72	8987.53	8989.79
1.80	8983.71	8987.54	8989.79
1.80	8983.72	8987.54	8989.80
1.80	8983.70	8987.52	8989.78
1.83	8983.71	8987.53	8989.79
1.86	8983.71	8987.54	8989.79
1.89	8983.71	8987.53	8989.78
1.92	8983.70	8987.53	8989.79
1.95	8983.70	8987.53	8989.79

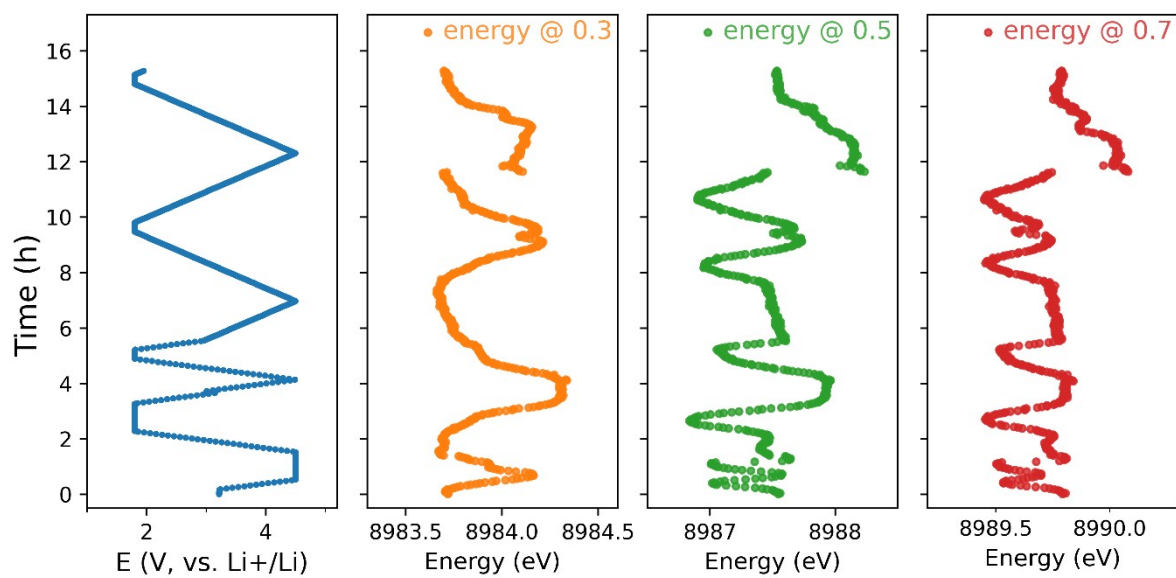


Figure S 11: The corresponding evolution of energy position corresponding to the edge step of 0.3, 0.5 and 0.7.