

ACORDO DE COOPERAÇÃO

ENTRE A

UNIVERSIDADE SUNGKYUNKWAN, Coreia do Sul

E A

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, Brasil

Conforme um interesse mútuo em promover cooperação internacional entre a Universidade Sungkyunkwan (doravante “SKKU”), inicialmente ou principalmente no interesse de seu Departamento de Ciência Energética, e a Universidade Federal de São Carlos (doravante “UFSCar”), inicialmente no interesse de seu Departamento de Física e de seu Programa de Pós-Graduação em Física, as Partes celebram o Acordo a seguir para cooperação cultural, acadêmica e científica.

CLÁUSULA 1ª: DISPOSIÇÕES GERAIS

As Partes devem estimular contato direto e cooperação entre os membros de seus corpos docentes, departamentos, institutos e pesquisadores, observadas as disposições deste Acordo.

As Partes devem cooperar inicialmente ou principalmente no interesse de suas respectivas unidades acadêmicas supramencionadas, nas áreas do conhecimento equivalentes, semelhantes ou correspondentes onde atuam. Dentro dessas áreas do conhecimento, ambas as Instituições acordam as seguintes formas gerais de cooperação:

- 1.1 Atividades de pesquisa conjuntas, publicações conjuntas e trocas de materiais bibliográficos, como, por exemplo, o desenvolvimento do projeto de pesquisa conjunto “Efeito do padrão Moiré nas propriedades físicas de heteroestruturas de van der Waals” (vide Anexo B), cujos planos de trabalho devem ser oportunamente anexados ao presente instrumento nos termos da CLÁUSULA 2ª deste Acordo (vide Anexo A);
- 1.2 Troca de informações acadêmicas nas áreas de interesse das Partes;
- 1.3 Intercâmbio de membros do corpo docente e estudantes para estudos e pesquisa;
- 1.4 Outros programas, projetos e atividades culturais, educacionais, científicas e acadêmicas que as Partes se interessem consensualmente em desenvolver.

CLÁUSULA 2ª: TERMOS DE IMPLEMENTAÇÃO

Temas das atividades conjuntas, as condições de utilização dos resultados alcançados, as modalidades de visitas e intercâmbios específicos e outras formas de cooperação poderão ser negociados para cada caso específico em acordo escrito separado, conforme o caso, mas também deverão observar as normas e regulamentos em vigor em ambas as Instituições, estarão sujeitos a programas, projetos ou planos de trabalho formais que tenham sido previamente aprovados por suas próprias autoridades ou órgãos autorizados, deverão ser exibidos seguindo o formato fornecido no Anexo A deste documento, e em todos os casos estarão condicionados ao disponibilidade de financiamento.

CLÁUSULA 3ª: CONDIÇÕES GERAIS PARA O DESENVOLVIMENTO DE ATIVIDADES

Não obstante as disposições anteriores, fica acordado, pelo presente instrumento, que, quando for o caso, membros do corpo docente, pesquisadores e estudantes participantes de atividades no âmbito deste Acordo deverão cumprir requisitos legais de imigração do país onde estiver situada a instituição anfitriã e deverão contratar seguro-saúde, contra acidentes pessoais, de responsabilidade civil e de repatriação sanitária e funerária com cobertura por todo o período de seu respectivo intercâmbio.

Os estudantes participantes de intercâmbios no âmbito deste Acordo serão isentos da cobrança de taxas acadêmicas pela instituição anfitriã, se exigidas.

CLÁUSULA 4ª: DIREITOS DE PROPRIEDADE INTELECTUAL

Toda propriedade intelectual gerada e/ou desenvolvida somente pela SKKU durante o curso deste Acordo de Cooperação será de propriedade da SKKU. Toda propriedade intelectual gerada e/ou desenvolvida somente pela UFSCar durante o curso deste Acordo de Cooperação será de propriedade da UFSCar.

A propriedade intelectual gerada e/ou desenvolvida conjuntamente pela SKKU e pela UFSCar será de propriedade conjunta da SKKU e da UFSCar em conformidade com sua respectiva contribuição para a propriedade intelectual gerada em conjunto, bem como com as políticas de cada uma das Partes e de cada agência de fomento à pesquisa científica eventualmente envolvida nas atividades colaborativas correspondentes. Suas contribuições para a propriedade intelectual gerada em conjunto deverão ser determinadas pela importância de sua contribuição intelectual para o resultado das atividades colaborativas gerado em conjunto.

Cada Parte poderá usar tal propriedade para fins de pesquisa e acadêmicos. Ambas as Partes acordam colaborar na proteção, se for o caso, e depósito de tal propriedade intelectual para fins comerciais ou outros, em termos reciprocamente aceitáveis, a serem discutidos de boa-fé entre as Partes.

CLÁUSULA 5ª: CONFIDENCIALIDADE

Quaisquer resultados ou informações trocadas entre as Partes no âmbito deste Acordo, as quais estejam classificadas como confidenciais, não poderão ser reveladas a terceiros sem a aprovação por escrito da Parte fornecedora.

Além disso, ao trocarem resultados ou informações confidenciais no âmbito deste Acordo, ambas as Partes comprometem-se a cumprir as suas respectivas políticas, bem como as políticas de cada agência de fomento à pesquisa científica eventualmente envolvida nas atividades colaborativas correspondentes.

CLÁUSULA 6ª: PUBLICAÇÕES

As Partes podem publicar e divulgar conjuntamente resultados das atividades colaborativas no âmbito deste Acordo, conforme suas respectivas políticas, bem como as políticas de cada agência de fomento à pesquisa científica eventualmente envolvida em tais atividades.

CLÁUSULA 7ª: VIGÊNCIA, ALTERAÇÕES E RESCISÃO

Este Acordo entra em vigor na data de sua assinatura pelos representantes autorizados das Partes. Permanecerá vigente por 5 (cinco) anos e poderá ser revisto antes da renovação. Pode ser rescindido por qualquer das Partes mediante notificação por escrito com 60 (sessenta) dias de antecedência à outra Parte, juntamente com aviso de recebimento, e pode ser alterado por mútuo consentimento por escrito.

CLÁUSULA 8ª: INDENIZAÇÃO E SOLUÇÃO DE CONTROVÉRSIAS

Este Contrato não cria direitos legalmente exigíveis e não pode ser a base de qualquer reivindicação legal entre as Partes.

As Partes devem isentar de responsabilidade a outra parte por todo e qualquer dano, despesa, reclamação e/ou ação decorrentes de negligência, má conduta e/ou outras atividades ilícitas delas próprias.

Dúvidas e controvérsias oriundas da interpretação ou execução deste Acordo devem ser resolvidas amigavelmente por ambas as Partes. Caso não seja possível uma solução amigável, elas deverão indicar consensualmente um terceiro, pessoa natural, para atuar como árbitro.

As Partes asseguram que os indivíduos que assinam este Acordo têm autoridade para firmá-lo na qualidade indicada. Este Acordo foi redigido em inglês e em português em vias idênticas, sendo as vias em cada um desses idiomas consideradas originais. Em caso de qualquer divergência de interpretação deste Acordo de Cooperação, prevalecerá o texto em inglês.

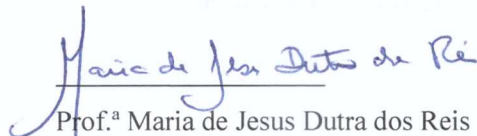
PELA Universidade Sungkyunkwan
SUNGKYUNKWAN-RO, 25-2
JONGNO-GU, SEUL, COREIA DO SUL
03063

PELA Universidade Federal de São Carlos
RODOVIA WASHINGTON LUÍS, KM 235
SÃO CARLOS (SP), BRASIL
13565-905



Prof. Ji-Beom Yoo
Presidente


Data: 22/03/2024



Prof.^a Maria de Jesus Dutra dos Reis
Vice-Reitora e Reitora em exercício

Data: 17/01/2024

ANEXO A – Formato de apresentação do programa, projeto ou atividade cultural, educacional, científica e acadêmica específica a ser implementada conjuntamente no âmbito deste Acordo

| | |
|---|--|
| Natureza/título da atividade | Projeto de pesquisa conjunto “Efeito do padrão Moiré nas propriedades físicas de heteroestruturas de van der Waals”, selecionado pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) no âmbito da Chamada de Propostas Conjuntas: <i>National Research Foundation of Korea</i> (NRF) e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) 2022 |
| Fonte de financiamento | Processo FAPESP n.º 22/08329-0, referente à Chamada de Propostas Conjuntas: <i>National Research Foundation of Korea</i> (NRF) e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) 2022 |
| Pesquisador principal – Universidade Federal de São Carlos | Prof.ª Dr.ª Yara Galvão Gobato |
| Pesquisador principal – Universidade Sungkyunkwan | Prof. Dr. Jeongyong Kim |
| Assinatura por e em nome da Universidade Federal de São Carlos | Nome: Prof.ª Dr.ª Maria de Jesus Dutra dos Reis Cargo: Vice-Reitora e Reitora em exercício Assinatura:  Data: 17/01/2024 |
| Assinatura por e em nome da Universidade Sungkyunkwan | Nome: Prof. Dr. Ji-Beom Yoo Cargo: Presidente Assinatura:  Data: 22/03/2024 |

ANEXO B – Projeto de pesquisa a ser desenvolvido em conjunto: “Efeito do padrão Moiré nas propriedades físicas de heteroestruturas de van der Waals”

Vide projeto anexo.

**Projeto de Pesquisa - Chamada de Propostas Conjuntas:
National Research Foundation of Korea (NRF) e Fundação de
Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) 2022**

(versão em português)

Título: Efeito do padrão Moiré nas propriedades físicas de heteroestruturas de van der Waals

Coordenador da Coréia do Sul: Prof. Dr. Jeongyong Kim

Instituição: Department of Energy Science- Sungkyunkwan University- Coréia do Sul

Coordenador(a) do Brasil: Prof. Yara Galvão Gobato

Instituição: Departamento de Física- Universidade Federal de São Carlos (UFSCAR)-Brasil

Duração: 24 meses, começando em janeiro 2023

Resumo do Projeto

O projeto de pesquisa tem como objetivo realizar um estudo sistemático do efeito do padrão de Moiré nas propriedades óticas de heteroestruturas de van der Waals (vdW) tanto do ponto de vista de física fundamental como para o desenvolvimento de dispositivos optoeletrônicos baseados nesses sistemas. Para isso, pretendemos iniciar uma colaboração científica entre laboratórios da Coréia do Sul e do estado de São Paulo envolvendo estudos em sistemas baseados em heteroestruturas de vdW. Em particular, o projeto tem os seguintes objetivos específicos: (1) Implementar estratégias para obter amostras/dispositivos de heteroestruturas de vdW de alta qualidade; (2) Estudar os efeitos do padrão moiré na interação exciton-exciton e rendimento quântico de éxcitons de inter-camadas (3) Estudar as propriedades eletrônicas e óticas de heteroestruturas de vdW com diferentes ângulos de alinhamento entre as camadas; (4) Aplicar as conclusões obtidas para projetar/modelar novos dispositivos baseados em heteroestruturas de vdW; (5) Desenvolver e testar protótipos; (6) discutir oportunidades para projetos de colaboração futuros de longo prazo.

Descrição do Projeto

Heteroestruturas de van der Waals têm atraído grande atenção nos últimos anos devido às suas propriedades óticas, eletrônicas, mecânicas e magnéticas únicas¹⁻⁴¹. Particularmente, vários estudos foram realizados em heteroestruturas baseadas em monocamadas de dicalcogenetos de metal de transição (TMD). Os TMDs são materiais semicondutores que apresentam “gap” direto em dois vales não equivalentes $\pm K$ no espaço recíproco, e também possuem fortes efeitos excitônicos devidos ao confinamento quântico bidimensional, alta massa efetiva e blindagem dielétrica reduzida^{4,7}. Além disso, esses sistemas possuem forte interação spin-órbita e falta de simetria de inversão no cristal, o que resulta na quebra a degenerescência dos estados de spin e acoplamento dos graus de liberdade do spin e do vale. Como consequência, os vales $\pm K$ podem ser acessados individualmente usando luz circularmente polarizada à direita ($\sigma+$) ou circularmente polarizada à esquerda ($\sigma-$)^{4,7,12}. Sob a aplicação de campos magnéticos externos, novos fenômenos interessantes podem ser observados nesses sistemas, como o efeito Zeeman dos vales e polarização dos vales induzida por campos magnéticos^{7,15}.

A física do exciton desses materiais 2D se torna ainda mais rica quando tais materiais são empilhados verticalmente para formar heteroestruturas de

van der Waals (vdW) ^{6-9,11,26, 35-36}. De fato, quando duas camadas de van der Waals (vdW) atômicamente finas são empilhadas verticalmente com diferentes alinhamento atômicos entre as camadas pode exibir variações periódicas, levando a um novo tipo de super-rede no plano conhecido como super-rede/padrão moiré ^{22,35-36,39}. O período dessas super-redes de moiré é determinado pelo descasamento da constante da rede e pelo ângulo de alinhamento entre as duas camadas. Na maioria dos casos, essas heteroestruturas vdW têm um alinhamento de banda do tipo II e são sujeitas a efeitos importantes das super-redes de Moiré que dependem do ângulo de alinhamento entre as camadas envolvidas ^{8,28,35-36}. A forte interação de Coulomb entre portadores de carga em materiais TMD dá origem à formação de excitons de interlayer (IEs) com elétrons e buracos localizados em diferentes camadas de TMD. Além disso, existem também algumas heteroestruturas onde a função de onda do elétron (ou buraco) é distribuída em ambas as camadas, e esses excitons são chamados de excitons híbridos ^{13-14,35-36}. Esses excitons híbridos são observados em heteroestruturas de TMD quando as bandas de condução ou as bandas de valência entre as duas camadas estão próximas em energia ¹³⁻¹⁴. Existem dois tipos de heteroestrutura: heteroestruturas quase comensuráveis e heteroestruturas incomensuráveis, dependendo se as duas camadas compartilham os mesmos átomos de calcogênio ^{28,5-36}. Em heteroestruturas quase comensuráveis (por exemplo, $\text{MoSe}_2/\text{WSe}_2$), as constantes de rede são muito semelhantes, levando a uma grande variedade de tamanhos possíveis de super-células de moiré (~1–100 nm) ou de densidades de supercélulas. Em heteroestruturas incomensuráveis que consistem em duas monocamadas TMD com diferentes átomos de calcogênio (por exemplo, $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$), as constantes de rede diferem substancialmente (em ~4%) e a maior super-célula moiré possível é ~8 nm ³⁵⁻³⁶. Estas diferenças entre tipos de heteroestruturas tem um impacto importante nas propriedades ópticas dependentes do ângulo de alinhamento entre as camadas. Por exemplo, para heteroestruturas incomensuráveis, pode-se esperar um confinamento lateral mais forte que poderia resultar em mudanças mais importantes nas propriedades ópticas dos excitons intra-camada e inter-camada ³⁵⁻³⁶.

De forma geral, os IEs são observados para ângulos de empilhamento próximos de 0° (empilhamento AA) e 60° (empilhamento AB), nos quais a diferença de momento entre os vales dos TMDs é desprezível, permitindo a recombinação radiativa dos portadores de carga nos pontos K, levando a um aumento considerável da intensidade da fotoluminescência dos excitons IEs, com pico de emissão deslocado para menores energias com relação aos éxcitons das monocamadas (éxciton de intra-camada). Os IEs possuem altas energias de ligação (>100meV) tornando-os estáveis à temperatura ambiente e são robustos contra a dissociação em campos elétricos aplicados ^{6-9,35-36,39}. Tais sistemas são sistemas bastante promissores para investigar diversos

fenômenos físicos tais como elétrons correlacionados, condensação de éxcitons de alta temperatura e a física de vale-spin emergente devido à natureza dipolar dos IEs^{35-36,39}. Este padrão moiré e a profundidade de potencial lateral, que pode localizar IEs, pode ser controlado tanto pelos materiais escolhidos como pelo ângulo de orientação relativo entre as camadas tendo um impacto importante na resposta óptica desses sistemas. O ângulo de entre as camadas na heteroestrutura é geralmente determinado pela técnica de geração de segundo harmônico resolvida em polarização (SHG).

Devido ao dipolo elétrico inerente dos IEs, seus auto-estados de energia também podem ser controlados por campos elétricos, o que abre oportunidades muito interessantes para investigar a condensação de excitons de alta temperatura^{10,39}, emissão de fóton único^{11,18} e optoeletrônica de spin de vale^{12,39}. Como a interação entre os éxcitons inter-camadas localizados no padrão de moiré depende de sua separação espacial, o fator g efetivo dessas partículas ligadas depende sensivelmente do ângulo entre as camadas. Particularmente, para heteroestruturas WSe_2 - $MoSe_2$ com ângulos entre camadas próximos a 0° , um fator g efetivo na faixa de $g \sim +6$ é observado enquanto que para ângulos de torção próximos a 54° , geralmente é observado um valor de $g \sim -15$ ^{9,15-16,35-36}. Esses valores são muito diferentes dos fatores g observados em monocamadas de TMD ($g \sim -4$)¹²⁻¹⁵. Em ambos os casos, os valores podem ser explicados por métodos teóricos de primeiros princípios que levam em conta o caráter do momento angular dos estados de condução e valência em materiais de monocamada e bicamada. No entanto, existe uma dispersão de resultados experimentais de fatores g reportados na literatura. A origem desta dispersão e o impacto nas interações exciton-exciton, não são ainda muito bem compreendidos. Particularmente interessante para esta proposta é também a situação em que em combinações de materiais e ângulos de alinhamento possam ser cuidadosamente escolhidos, para que os excitons intra e intercamadas possam hibridizar, resultando no aumento ressonante dos efeitos da super-rede moiré^{13,14,36}. O efeito da hibridização pode ser continuamente ajustável com ângulo de alinhamento nas proximidades de 0° e 60° . Como resultado da hibridização, são esperadas características excitônicas adicionais no contraste de refletância (RC), que são associadas a efeitos de super-rede moiré levando à formação de minibandas para excitons hibridizados^{13,14}. Este efeito ocorre porque os excitons são formados a partir de buracos que residem em uma camada ligada a uma superposição de estados de elétrons nas monocamadas adjacentes dependente do ângulo de alinhamento^{13,14}. Quando as heteroestruturas estão quase alinhadas, a mistura ressonante dos estados leva a efeitos importantes do padrão moiré da heteroestrutura na dispersão do éxciton e no espectro óptico. Três excitons hibridizados ressonantes foram previstos e observados recentemente próximos ao éxciton intra-camada e perto de ângulos de alinhamento de 0° e 60° ^{13,14}. Além disso, espera-se que bicamadas com diferentes átomos de calcogeneto,

como WS_2/WSe_2 , exibam também um potencial de moiré mais profundo porque uma maior incompatibilidade de rede leva a uma tensão local mais forte e a variações de espaçamento de camada³⁵⁻³⁶. De forma geral, diversas previsões teóricas motivam novos estudos ópticos e magneto-ópticas de excitons intracamada e IE em diferentes heteroestruturas, tais como heteroestruturas $MoSe_2-WS_2$ ou WS_2-WSe_2 ³⁶ e etc.

Como mencionado acima, existem várias questões ainda em aberto relacionadas ao efeito do padrão moiré nas propriedades físicas de heteroestruturas de van der Waals³⁵⁻³⁶. Por exemplo, compreender se os excitons poderiam ser localizados dentro das supercélulas moiré seria uma questão fundamental com grandes implicações para diversas aplicações tais como para gerar emissores quânticos para informação quântica com quiralidade ajustável^{11,18,,35-36}. No momento, esse assunto ainda é bastante polêmico e existem alguns trabalhos contraditórios na literatura pois a observação de single photons nessas heteroestruturas poderia também ser devido a presença de “strain” local ou defeitos. Além disso, existe também grande interesse em investigar fases eletrônicas correlacionadas usando espectroscopia óptica em heteroestruturas de van der Waals onde a densidade de portadores e o campo elétrico podem ser controlados pela tensão de “gate” em dispositivos tipo FET³⁶. Em particular, essas heteroestruturas TMD poderiam ser uma nova plataforma para estudos interessantes para simular por exemplo, o modelo de Hubbard^{35-36,41} e com a vantagem sem precedentes de que tanto a largura quanto a força de interação devem ser amplas³⁶.

Além disso, foi recentemente demonstrado que os materiais ferromagnéticos bidimensionais são também materiais promissores para uma nova geração de dispositivos “spintrônicos”^{3,33,37-40}. Particularmente, combinando materiais ferromagnetos 2D (FMs) com TMDs, há uma vantagem em usar efeitos de proximidade magnética para tornar os materiais TMDs em materiais magnéticos sem necessidade de uso de íons magnéticos^{3,40}. Além disso, o efeito de proximidade magnética em monocamadas TMD devido ao uso de uma camada ferromagnética empilhada no topo, pode também ser ajustada mudando o ângulo entre as camadas e também aplicando campo elétrico ou controlando a dopagem por “gate” elétrico⁴⁰. Nesse projeto, pretendemos investigar heteroestruturas contendo magnetos 2Ds com diferentes ângulos de alinhamento. A possibilidade de uso de diferentes ferramentas como diferentes materiais, controle de efeitos de proximidade, efeito Zeeman, campo elétrico, dopagem e variando ângulos entre camadas motiva consideravelmente explorar heteroestruturas/dispositivos de van der Waals com TMDs empilhados e também com ferromagnetos 2D³⁷⁻⁴⁰.

No entanto, para realizar os diversos estudos acima mencionados é necessário a obtenção de amostras de alta qualidade. Essa é uma condição essencial para tanto para estudos de física fundamental quanto para possíveis

aplicações. Por exemplo, a obtenção de amostras de alta qualidade evitaria ter amostras com padrão de moiré altamente desordenado e permitiria a observação de estruturas finas de ressonâncias de excitons que poderiam ser atribuídas a mini-bandas de moiré. Portanto, é de grande importância desenvolver estratégias de preparação de amostras para melhorar a qualidade ótica de heteroestruturas de vdW. Essas estratégias envolvem o encapsulamento de nitreto de boro hexagonal (hBN) ou encapsulamento alternativo de materiais dielétricos 2D de baixo custo, uso de ponta de AFM para reduzir bolhas, otimização do procedimento usado para tratamentos térmicos para reduzir contaminação de polímeros necessários na preparação de amostras e etc. Além disso, a melhoria do rendimento quântico de IEs em heteroestruturas vdW com diferentes ângulos de alinhamento é também uma questão importante para possíveis aplicações em optoeletrônica. É importante ressaltar que a equipe brasileira já iniciou recentemente a preparação de heteroestruturas de van der Waals hBN-MoSe₂-WS₂-hBN com diferentes ângulos de alinhamento entre camadas (Projeto Fapesp Regular Proc: 19/23488-5). Esse esforço envolveu um trabalho sistemático de alunos da UFSCAR em preparação de amostras no LNLS com a supervisão da pesquisadora Ingrid Barcelos (co-orientadora destes alunos). Além disso, estamos também iniciando uma colaboração com o pesquisador Alisson Cadore que é especialista em preparação de dispositivos e foi recentemente contratado no LNLS para preparação de dispositivos 2Ds. Diversas amostras já foram preparadas no LNLS e os tratamentos térmicos foram recentemente realizados na UFSCAR. Alguns estudos óticos em nosso grupo e magneto-óticos usando infraestrutura de equipamentos multiusuários Fapesp na UFSCAR já foram realizados com sucesso nesses sistemas. É importante ressaltar que as amostras recentemente preparadas pela nossa equipe tem apresentado em alta qualidade ótica, após tratamento térmico, com emissões óticas intensas e largura de linhas finas (da ordem de 6meV para melhores amostras) o que motiva diversas estratégias de otimização de condições de tratamento térmico, uso de pontas de AFM para reduzir bolhas e etc para melhorar o acoplamento das camadas, reduzir contaminação de polímeros, além de teste de diferentes tipos de polímeros para transferência de camadas e etc para aprimoramentos destas amostras para preparação de dispositivos no LNLS e diversos outros estudos nesses sistemas e em outras heteroestruturas. Além disso, é interessante ressaltar que um dos alunos de doutorado responsável pela preparação de heteroestruturas de vdW da nossa equipe foi contemplado com uma bolsa PDSE para uma estadia de 10 meses (com início em setembro 2022) no grupo do Prof. Christian Schuller na Universidade de Regensburg que já produz amostras de alta qualidade e esta nova colaboração estabelecida com nosso grupo deve também contribuir para melhorias de qualidade de amostras 2Ds produzidas no Brasil. Outra informação importante é que a coordenadora desse projeto possui um projeto SPRINT-Fapesp vigente (Proc: 22/00419-0) que envolve a preparação de amostras/dispositivos de

heteroestruturas 2Ds contendo magnetos 2Ds na Holanda o que deve também contribuir para obtenção de amostras do exterior e otimização de preparação de amostras no Brasil. Desta forma, tanto as colaborações internacionais como a infraestrutura do LNLS garantem a produção de amostras de alta qualidade para desenvolver esse projeto de pesquisa.

De forma geral, este projeto de pesquisa propõe uma investigação detalhada sobre propriedades ópticas e magnéticas de bicamadas com diferentes ângulos de alinhamento e de alta qualidade, através de medidas experimentais e modelagem teórica de propriedades físicas emergentes de excitons intracamada e intercamada. Estudos envolvendo técnicas experimentais complementares no exterior (por exemplo, nano-espectroscopia em 300K e em baixas temperaturas, espectroscopia de excitação (micro-PLE) e etc) e novos estudos ópticos no Brasil nessas heteroestruturas certamente terá um impacto importante para investigar muitas questões que ainda estão em aberto na literatura o que deve resultar na publicação de trabalhos científicos. Como mencionado anteriormente, pretendemos preparar amostras e investigar experimentalmente diversos fenômenos emergentes em amostras com padrões moiré em heteroestruturas de vdW de alta qualidade e construir o modelo teórico necessário não apenas para descrevê-los, mas também para examinar diferentes estratégias para sintonizar e controlar efeitos, com base em uma combinação única de instalações experimentais complementares, da equipe do Prof. Dr. Jeongyong Kim Universidade Sungkyunkwan e Profa. Yara Galvao Gobato Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), Dra. Ingrid Barcelos no Laboratório Brasileiro de Luz Síncrotron (LNLS) e apoio teórico e computacional da equipe do Prof. Andrey Chaves da Universidade Federal do Ceará (UFC).

Programa de Pesquisa:

- (a) Preparação de heteroestruturas/dispositivos 2D de alta qualidade de diferentes materiais e ângulos de empilhamento;
- (b) Realizar medidas de nano-espectroscopia em heteroestruturas de van der Waals com camadas de diferentes ângulos de alinhamento entre elas.
- (c) Estudar o efeito da tensão “gate” em dispositivos tipo FET baseados em heteroestruturas de vdW com diferentes ângulos de alinhamento nas propriedades ópticas e magneto-ópticas de excitons intercamadas .
- (d) Estudar o efeito da dopagem nas propriedades ópticas e magnéticas de magnetos 2D usando espectroscopia Raman, SHG e fotoluminescência em baixa temperatura com resolução nanométrica.

(e) Estudo dos efeitos de proximidade magnética em heteroestruturas hBN/magnetos 2D /TMD/hBN com diferentes ângulos de alinhamento.

Programa de Pesquisa e Papel dos Parceiros:

A execução deste projeto será organizada por diferentes tarefas de trabalho (WP) descritas abaixo:

WP1: Fabricação de amostras/dispositivos

Tarefa 1: Técnicas de esfoliação, transferência de camada seca e tratamento térmico para a fabricação de amostras/dispositivos de heteroestruturas vdW de alta qualidade compostas por diferentes combinações de TMDs e magnetos 2D, com diferentes ângulos de alinhamento, serão realizadas simultaneamente por alunos de doutorado/mestrado da SKKU e UFSCAR no grupo de pesquisa no LNLS, em colaboração com a equipe da Dra. Ingrid D. Barcelos e Allison Cadore.

Tarefa 2: Os ângulos de alinhamento entre camadas serão determinados por medições de SHG dependentes de polarização em 300K, em colaboração com outros grupos brasileiros. No momento, estamos realizando medidas de SHG em um sistema confocal multiusuário Fapesp em 300K no IFSC-USP São Carlos. É interessante mencionar também que temos uma colaboração com o Prof Odilon Couto Jr que está montando um setup de SHG em baixas temperaturas em um projeto jovem pesquisador Fapesp para investigar materiais 2Ds. Essa montagem seria interessante para investigar transições de fase magnética em heteroestruturas contendo magnetos 2Ds. O Prof Odilon já manifestou interesse em colaborar com nossa equipe nesse tema de pesquisa.

WP2- Medições ópticas

Tarefa 1: As propriedades nano-ópticas (nano-PL e nano-Raman) serão investigadas na Coreia do Sul. As medidas de nano-PL e do nano-Raman dependente de temperatura (3-350K) serão realizados para confirmar a formação de excitons IEs. O estudo de PL dependente de energia de excitação (PLE) também será realizado em SKKU para determinar a excitação de ressonância de IEs.

Tarefa 2: A dependência do tempo de vida do éxciton no ângulo de alinhamento será investigada pelo sistema PL resolvido no tempo em SKKU e a dependência da localização dos IEs no período moiré deve ser revelada. Esta informação será usada para estabelecer o modelo de difusão e transporte de excitons IEs localizados em moiré em diferentes ângulos de alinhamento.

Tarefa 3: Espectros PL dependentes da potência de excitação de IEs na UFSCAR / SKKU serão obtidos para investigar o efeito da interação exciton-exciton na energia de IE.

Tarefa 4: O estudo de propriedades optoeletrônicas, especialmente para os estados excitônicos, será realizado pelas técnicas de micro-fotoluminescência (μ -PL) e contraste de refletância em dispositivos com “gate” elétrico, que tem sido amplamente utilizada na UFSCAR.

Tarefa 5: Estudos de magneto-PL serão realizados usando a instalação magneto-PL da UFSCAR (laboratório com equipamento multiusuário Fapesp) para determinar fatores g de vale, investigar efeitos da dopagem, de deformação (“strain” uniaxial) e campos elétricos.

Tarefa 6: O estudo dos fônons moiré será realizado por espectroscopia Raman em 300K em colaboração no grupo de semicondutores do Departamento de Física da UFSCAR.

Tarefa 7: O estudo das propriedades magnéticas de heteroestruturas 2D com diferentes ângulos será realizado por espectroscopia Raman dependente da temperatura e SHG e MOKE resolvidos polarizados em colaborações com grupos da UFSCAR e com outros grupos do estado de São Paulo. Investigaremos os efeitos de proximidade magnética em dispositivos hBN/FM2D/TMD/hBN (onde FM2D é o material ferromagnético/antiferromagnético) sob dopagem e campos elétricos aplicados.

Tarefa 8: Construir um modelo teórico para quase-partículas e excitons em bicamadas torcidas é uma tarefa muito desafiadora. Colaboraremos com o Prof Andrey Chaves (Universidade Federal do Ceará) para suporte teórico desta proposta de pesquisa.

WP3- Modelo teórico para quase-partículas moiré em camadas empilhadas vdW.

O tamanho tipicamente grande das células unitárias dos padrões de moiré são bastante conhecidos por tornar proibitivos os custos computacionais dos cálculos da teoria funcional da densidade (DFT) de bicamadas com diferentes ângulos. Portanto, neste projeto, pretendemos desenvolver uma abordagem que nos permita entender resultados experimentais através de um modelo contínuo que capture as principais características do confinamento moiré, sendo computacionalmente muito mais barato. Isso será feito em duas etapas:

Tarefa 1: Cálculo DFT dos estados eletrônicos das diferentes bicamadas de interesse para o projeto, assumindo estruturas monocristalinas com todas as ordens de empilhamento possíveis. A natureza monocristalina desses cálculos

nos permitirá definir uma célula unitária efetivamente pequena, o que facilitará os cálculos.

Tarefa 2: Identificar as diferentes ordens de empilhamento local que compõem o padrão moiré em uma determinada homo/heteroestrutura. O “patching” da DFT obtém estados eletrônicos correspondentes a cada região da ordem de empilhamento local, criando assim um perfil de potencial moiré efetivo em todo o plano. Resolvendo a equação de Schrodinger (numericamente) em um modelo contínuo na presença de tal potencial moiré periódico, levando assim às estruturas de banda moiré quasi-particle (elétrons moiré, buracos, excitons e fônons), cujas propriedades serão usadas para explicar os vários resultados que serão testados experimentalmente neste projeto de pesquisa.

WP4: Efeitos proximidade magnética em heteroestruturas de vdW contendo materiais magnéticos e monocamadas de TMDs .

As propriedades excitônicas dessas heteroestruturas serão investigadas experimentalmente tanto na UFSCAR como na Coréia do Sul. Esses estudos terão também suporte teórico de Andrey Chaves (UFC). Especificamente, estamos interessados em investigar o efeito de proximidade magnéticas nos excitons moiré em heteroestruturas vdW com diferentes ângulos de alinhamento.

1.3 Resultados Esperados

Este projeto de pesquisa permitirá o desenvolvimento de amostras ou dispositivos de alta qualidade baseados em heteroestruturas de vdW, com alto impacto tecnológico, novas funcionalidades, propriedades personalizadas e desempenho aprimorado. A proposta tem interesse estratégico para aumentar a competitividade industrial e desenvolver a tecnologia para exploração em novos optoeletrônicos/spintrônicos..

A proposta é também uma nova abordagem para a engenharia de propriedades de padrão de moiré e seu impacto nas propriedades óticas e magnéticas de heteroestruturas de vdW . A proposta contribui tanto para propriedades físicas fundamentais como para o desenvolvimento de aplicações promissórias em optoeletrônica e spintrônica. O programa de trabalho deve contribuir para a compreensão desses materiais emergentes que provavelmente poderão explorar em dispositivos optoeletrônicos avançados e spintrônicos baseados em magnetos 2D. Conseqüentemente a proposta deve contribuir para fortalecer o perfil da Coreia do Sul/Brasil na área de materiais 2Ds e conseqüentemente aumentar interesse internacional de ambas equipes.

2.1. Planejamento anual

| Year | Objetivo | Descrição |
|------|---|---|
| 2023 | Preparação de amostras e dispositivos baseados em heteroestruturas de vdW | Utilizar métodos de esfoliação e transferência seca para produzir amostras/dispositivos de heteroestruturas de van der Waals com diferentes ângulos de alta qualidade para estudo de excitons de moiré |
| | Investigação de propriedades óticas de excitons de moiré | Estudo de propriedades óticas e efeitos de interação exciton-exciton na eficiência quântica de excitons IEs |
| 2024 | Investigação de efeitos de correlação eletrônica e propriedades magnéticas de heteroestruturas de vdW | Estudo dos efeitos da dopagem nas propriedades óticas e magnéticas de heteroestruturas VdWs incluindo heteroestruturas contendo magnetos 2Ds. Os estudos serão realizados por diferentes técnicas experimentais tais como, espectroscopia Raman em função da temperatura, medidas de SHG e fotoluminescência. |
| | Estudos de efeitos de proximidade magnética | Estudo de propriedades magnéticas em heteroestruturas 2Ds com diferentes ângulos de alinhamento contendo magnetos 2Ds |

2.2. Plano de trabalho

| Plano de trabalho | Primeiro ano | | | | Segundo ano | | | |
|---|--------------|-----|-----|-----|-------------|-----|-----|-----|
| | 1/4 | 2/4 | 3/4 | 4/4 | 1/4 | 2/4 | 3/4 | 4/4 |
| Preparação de amostras/dispositivos de heteroestruturas de vdW | | | | | | | | |
| Caracterização Ótica | | | | | | | | |
| Modelagem | | | | | | | | |
| Visitas para medidas complementares, seminários e discussões de resultados de projeto e artigos | | | | | | | | |

3. Infraestruturas das Instituições envolvidas

A Universidade Sungkyunkwan (SKKU) é uma instituição reconhecida mundialmente. É uma universidade líder com forte desempenho acadêmico e de pesquisa. A SKKU ocupa a 97^a e a 122^a posição no QS e THE World University Rankings, respectivamente, que é 10^a na Ásia e 1^a em universidades privadas na Coreia, e recebe 450 M\$ em financiamento de pesquisa em 2021. A SKKU tem acordos de parceria com cerca de 700 universidades internacionais em 71 países. O laboratório do Prof. Kim em SKKU é

especializado em imagens de espectroscopia nano-óptica de nano-materiais. Um resultado de pesquisa recente foi a visualização e manipulação de excitons emissores de luz e suas interações em semicondutores quânticos para encontrar suas aplicações como futuros dispositivos optoeletrônicos. O Prof Kim publicou diversos resultados referentes sobre a identificação de complexos de excitons em semicondutores 2D [Nanoscale 43, 4843 (2014), **252 citações**; ACS Nano 10, 2399 (2016), **168 citações**; Nano Letters 18, 4523 (2018)], afunilamento de exciton ajustável [Nano Letts. 21, 43 (2021)], supressão da aniquilação exciton-exciton não radiativa em TMDs 2D [Nat. Comun. 12, 7095 (2021)] e a modulação de propriedades elétricas ópticas anisotrópicas de 2D ReS₂ por dopagem de elétrons [ACS Nano 13, 14437 (2019); ACS Nano 15, 13770 (2021)]. O Prof Kim tem coordenado uma série de projetos de pesquisa da NRF relacionados a propriedades ópticas de semicondutores 2D e foi premiado com o Samsung Research Funding Grant como PI para 2018-2021. A colaboração internacional tem sido o componente-chave de suas realizações de pesquisa bem-sucedidas, dos quais os parceiros são, para citar alguns, Ajay Sood (IISc), Tony Low (U. Minnesota), Alexey Chernikov (Tech. U. Dresden), T. Taniguchi (NIMS), Andrey Chaves (U. Fed. Ceará). Especialmente, o Prof. Kim já iniciou uma colaboração de pesquisa com o Prof. A. Chaves, que é co-PI desta proposta e publicou um artigo em conjunto [Nat. Comun. 12, 7095 (2021)]. O laboratório do Prof. Kim é bem equipado com instrumentos de espectroscopia e imagem óptica de última geração, juntamente com a configuração adequada para esfoliação e transferência a seco para preparar as heteroestruturas de van der Waals. Desta forma, a capacidade geral do Prof. Kim de realizar a pesquisa em temas emergentes foi comprovada pela obtenção de diversos resultados de alto impacto de pesquisas anteriores.

Planos de Intercâmbio de Pesquisa

4.1. Justificativas de necessidade de Colaboração

De uma perspectiva genérica, o projeto visa iniciar uma cooperação científica de longa data entre os principais parceiros de pesquisa na Coréia do Sul e no Brasil, com infraestruturas complementares, para investigar fenômenos físicos emergentes em materiais/heteroestruturas 2D e também para a engenharia de suas propriedades físicas para a próxima geração de dispositivos optoeletrônicos. Para tanto, desenvolveremos os seguintes objetivos técnicos: (1) Desenvolver procedimentos para preparação/otimização de heteroestruturas/dispositivos TMD de alta qualidade. (2) Investigar os efeitos de ângulos entre camadas, substratos e “gate” elétrica aplicada nas propriedades física de excitons inter-camadas e intra-camadas em diferentes heteroestruturas VdW, por um lado, e propriedades de vale magneto-óptico, por outro;

A proposta é uma abordagem de engenharia das propriedades desejadas da amostras/dispositivos vdW com base em diferentes métodos e infraestruturas complementares que possuem alta probabilidade de sucesso. O programa de pesquisa deve contribuir na compreensão de física fundamental dessas heteroestruturas vdW 2D emergentes que poderão ser exploradas para aplicações em energia e optoeletrônica. O projeto contribuirá para os perfis científicos e tecnológicos da Coreia do Sul e do Brasil contribuindo para o desenvolvimento do aprendizado e domínio de habilidades altamente especializadas necessárias para uso futuro de materiais em aplicações.

Propomos também uma variedade de atividades de intercâmbio de equipes de pesquisa com instalações complementares disponíveis na Coreia do Sul e no Brasil, incluindo trocas de conhecimento na preparação de amostras de heteroestruturas de van der Waals, medições ópticas de heteroestruturas/dispositivos vdW, seminários e reuniões para discutir novas ideias que são relevantes para definir novos estudos em materiais/dispositivos. Estão previstas duas visitas entre as instituições para as equipes do Brasil e da Coreia do Sul. Essas visitas permitirão preparar amostras, investigar novas amostras/dispositivos e realizar medidas de propriedades ópticas com técnicas complementares de heteroestruturas/dispositivos semicondutores 2D em ambos os laboratórios. Este projeto será também importante para iniciar uma colaboração de longo prazo e iniciar novos projetos conjuntos de pesquisa, com a Fapesp-Brasil (projetos temáticos) / agências de fomento da Coreia do Sul e etc As expertises complementares de nossos grupos de pesquisa aliadas às instalações de instrumentação únicas de cada instituição (diferentes técnicas de nano-espectroscopia na Coreia do Sul e preparação de amostras e infra-estrutura magneto-óptica no Brasil) e os temas relevantes do projeto proposto certamente resultarão em publicações conjuntas em revistas de alto impacto.

4.2. Capacidade de Pesquisa da equipe brasileira

A equipe da Universidade Federal de São Carlos é conhecida por diferentes instalações de microscopia eletrônica (TEM, STEM ant etc), instalações ópticas como Espectroscopia micro-Raman, fotoluminescência e magneto-fotoluminescência na presença de altos campos magnéticos para investigar propriedades estruturais, ópticas e de transporte de diferentes nano-sistemas (Phys. Rev. Lett. 104, 086401 (2010); Phys. Rev. B 43, 4843 (1991)). A Profa. Gobato também adquiriu experiência na área de optoeletrônica e também spintrônica (Phys. Rev. B 73, 155317 (2006), J. Appl. Phys. 106, 023518 (2009) (Nano Letters 19, 82 (2019))). Mais recentemente, ela começou a investigar as propriedades ópticas de materiais vdW 2D crescidos por epitaxia de van der Waals e propriedades magneto-ópticas de heteroestruturas/dispositivos baseados em heteroestruturas de vdW esfoliados (Nanoscale 10, 4807 (2018))

(Nanoscale 13, 15853 (2021) , Nanoscale 14, 5758 (2022), Phys. Rev. Appl. 16, 64055 (2021), e mais recentemente <https://arxiv.org/abs/2204.01813v1>).

Ingrid D. Barcelos é líder de grupo no laboratório de preparação de amostras microscópicas (LAM) do Laboratório Brasileiro de Luz Síncrotron (LNLS)-Campinas. Ela tem larga experiência no processo de preparação de amostras de diferentes nano-sistemas: estruturas 1D e 2D, heteroestruturas vdW e também caracterização óptica e litografia e-beam e etc (Nano Letters 14, 3919 (2014)) (Nanoscale 7, 11620 (2015)) (Nanoscale 12, 13460 (2020)) (ACS Photonics 8, 3017 (2021)) (2D Materials 9 035007 (2022)). Além disso, possui experiência em nano-espectroscopia de luz síncrotron no infravermelho para investigar propriedades vibracionais, polaritons e dispositivos nanofotônicos em materiais 1D e 2D (ACS Photonics 5, 1912 (2018)) (Nanoscale 11, 21218 (2019)) (Nano Letters 19, 708 (2019)) (Advanced Optical Materials 8, 1901091 (2020)) (Nature Communications 12, 1 (2021)).

A equipe do Prof Andrey Chaves tem grande experiência na área de Física da Matéria Condensada, atuando principalmente nos seguintes temas: confinamento quântico, excitons e propriedades eletrônicas e de transporte em heteroestruturas semicondutoras 0-2D, grafeno e materiais bidimensionais lamelares, e redes vórtices em supercondutores com diversas publicações de alto impacto.

4.3 Planejamento de visitas

Devido à importância do tema de pesquisa proposto entre a Universidade Sungkyunkwan, UFSCAR e LNLS, este projeto de pesquisa deve atrair alunos de pós-graduação de ambas instituições e contribuirá para formação de pesquisadores em ambas as instituições. O desenvolvimento de novos materiais como diferentes materiais 2D, magnetos 2D e amostras/dispositivos heteroestruturas de vdW será um desafio para estudantes/pesquisadores; O projeto tem como foco temas emergentes com crescente interesse em dispositivos para optoeletrônica e spintrônica baseados em materiais 2D. Essas áreas provavelmente se beneficiarão da engenharia de propriedades dos materiais/dispositivos e serão de considerável interesse para as empresas/indústrias de ambos os países. O investimento neste projeto na infraestrutura já existente fornecerão muitas possibilidades interessantes para o desenvolvimento de pesquisa em nanociência e nanotecnologia ao longo de vários anos e apoiarão novos projetos em novas heteroestruturas 2D para optoeletrônica e spintrônica.

Em particular, planejamos pelo menos 2 visitas das equipes brasileiras (ou equipe da Coreia do Sul) à Coreia do Sul (ao Brasil) que contribuirão para estudos complementares no Brasil e na Coreia do Sul. Os principais objetivos dessas visitas seriam discutir os experimentos, projetar novas amostras/dispositivos, preparar e aperfeiçoar qualidade de amostras, realizar

experimentos utilizando infraestruturas complementares de ambas universidades (medidas nano-ópticas incluindo medidas em baixas temperaturas, espectroscopia de excitação da emissão na Coréia do Sul e medidas óticas e magneto-ópticas no Brasil), apresentar seminários para pesquisadores e estudantes, discutir novos resultados, redigir artigos para publicações de revistas de alto impacto e discutir projetos de pesquisa conjunta de longo prazo.

Referências

1. A.K. Geim, I. V. Grigorieva, Van der Waals heterostructures, *Nature*, 499, 419 (2013).
2. Chernikov, A. et al. Exciton binding energy and non hydrogenic Rydberg series in monolayer WS₂. *Phys. Rev. Lett.* 113, (2014).
3. Huang, B. et al. Emergent phenomena and proximity effects in two-dimensional magnets and heterostructures. *Nat. Mater.* 2020 19, 1276–1289 (2020).
4. Mueller, T. & Malic, E. Exciton physics and device application of two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors. *npj 2D Mater. Appl.* 2018 2, 1–12 (2018).
5. K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A. H. Castro Neto, 2D materials and van der Waals heterostructures, *Science*, 353 (2016)
6. Rivera, P. et al. Interlayer valley excitons in heterobilayers of transition metal dichalcogenides. *Nat. Nanotechnol.* 2018 13, 1004–1015 (2018).
7. Koperski, M. et al. Optical properties of atomically thin transition metal dichalcogenides: observations and puzzles. *Nanophotonics* 6, (2017).
8. Mak, K. F. & Shan, J. Opportunities and challenges of interlayer exciton control and manipulation. *Nat. Nanotechnol.* 2018 13, 974–976 (2018).
9. Nagler, P. et al. Giant magnetic splitting inducing near-unity valley polarization in van der Waals heterostructures. *Nat. Commun.* 2017 8, 1–6 (2017).
10. Wang, Z. et al. Evidence of high-temperature exciton condensation in two-dimensional atomic double layers. *Nat.* 2019 574, 76–80 (2019).

11. Yu, H., Liu, G.-B., Tang, J., Xu, X. & Yao, W. Moiré excitons: From programmable quantum emitter arrays to spin-orbit-coupled artificial lattices. *Sci. Adv.* 3, e1701696 (2017).
12. Arora, A. Magneto-optics of layered two-dimensional semiconductors and heterostructures: Progress and prospects. *J. Appl. Phys.* 129, 120902 (2021).
13. Alexeev, E. M. et al. Resonantly hybridized excitons in moiré superlattices in van der Waals heterostructures. *Nat.* 2019 5677746 567, 81–86 (2019).
14. Ruiz-Tijerina, D. A. & Fal'ko, V. I. Interlayer hybridization and moiré superlattice minibands for electrons and excitons in heterobilayers of transition-metal dichalcogenides. *Phys. Rev. B* 99, 125424 (2019).
15. Woźniak, T., Faria Junior, P. E., Seifert, G., Chaves, A. & Kunstmann, J. Exciton g factors of van der Waals heterostructures from first-principles calculations. *Phys. Rev. B* 101, (2020).
16. Deilmann, T., Krüger, P. & Rohlfing, M. Ab Initio Studies of Exciton g Factors: Monolayer Transition Metal Dichalcogenides in Magnetic Fields. *Phys. Rev. Lett.* 124, (2020).
17. Chen, S. Y. et al. Luminescent Emission of Excited Rydberg Excitons from Monolayer WSe₂. *Nano Lett.* 19, 2464–2471 (2019).
18. Seyler, K. L. et al. Signatures of moiré-trapped valley excitons in MoSe₂/WSe₂ heterobilayers. *Nat.* 2019 5677746 567, 66–70 (2019).
19. Alden, J. S. et al. Strain solitons and topological defects in bilayer graphene. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 110, 11256–11260 (2013).
20. Yoo, H. et al. Atomic and electronic reconstruction at the van der Waals interface in twisted bilayer graphene. *Nat. Mater.* 2019 185 18, 448–453 (2019).
21. Zhang, C. et al. Interlayer couplings, Moiré patterns, and 2D electronic superlattices in MoS₂/WSe₂ hetero-bilayers. *Sci. Adv.* 3, (2017).
22. McGilly, L. J. et al. Visualization of moiré superlattices. *Nat. Nanotechnol.* 2020 157 15, 580–584 (2020).
23. Zhang, X. et al. Phonon and Raman scattering of two-dimensional transition metal dichalcogenides from monolayer, multilayer to bulk material. *Chem. Soc. Rev.* 44, 2757–2785 (2015).
24. Liang, L. et al. Low-Frequency Shear and Layer-Breathing Modes in Raman Scattering of Two-Dimensional Materials. *ACS Nano* 11, 11777–11802 (2017).

25. Lin, K.-Q. et al. Large-Scale Mapping of Moiré Superlattices by Hyperspectral Raman Imaging. *Adv. Mater.* 33, 2008333 (2021).
26. Parzefall, P. et al. Moiré phonons in twisted MoSe₂–WSe₂ heterobilayers and their correlation with interlayer excitons. *2D Mater.* 8, 035030 (2021).
27. Wu, J. Bin et al. Interface Coupling in Twisted Multilayer Graphene by Resonant Raman Spectroscopy of Layer Breathing Modes. *ACS Nano* 9, 7440–7449 (2015).
28. Holler, J. et al. Low-frequency Raman scattering in WSe₂ – MoSe₂ heterobilayers: Evidence for atomic reconstruction. *Appl. Phys. Lett.* 117, 013104 (2020).
29. Puretzky, A. A. et al. Low-Frequency Raman Fingerprints of Two-Dimensional Metal Dichalcogenide Layer Stacking Configurations. *ACS Nano* 9, 6333–6342 (2015).
30. Huang, S. et al. Low-Frequency Interlayer Raman Modes to Probe Interface of Twisted Bilayer MoS₂. *Nano Lett.* 16, 1435–1444 (2016).
31. Maity, I., Naik, M. H., Maiti, P. K., Krishnamurthy, H. R. & Jain, M. Phonons in twisted transition-metal dichalcogenide bilayers: Ultrasoft phonons and a transition from a superlubric to a pinned phase. *Phys. Rev. Res.* 2, 013335 (2020).
32. A. Chaves et al., Bandgap engineering of two-dimensional semiconductor materials, *npj 2D Materials and Applications* 4, 29 (2020).
33. Q. H. Wang et al, The Magnetic Genome of Two-Dimensional van der Waals Materials, *ACS Nano* 16, 5, 6960–7079 (2022).
34. Yongjun Lee et al, Boosting quantum yields in two-dimensional semiconductors via proximal metal plates, *Nat Commun* 12, 7095 (2021)
35. Jiang et al., Interlayer exciton formation, relaxation, and transport in TMD van der Waals heterostructures, *Light: Science & Applications* (2021) 10:72
36. Di Huang et al Excitons in semiconductor moiré superlattices, *Nature Nanotechnology* 17, (2022) 227
37. X. Jiang et al., Recent progress on 2D magnets: Fundamental mechanism, structural design and modification, *Appl. Phys. Rev.* 8, 031305 (2021).
38. S. Zhang, R. Xu, N. Luoc and X. Zou, Two-dimensional magnetic materials: structures, properties and external controls, *Nanoscale* 13, 1398 (2021).
39. K. F. Mak and J. Shan, Opportunities and challenges of interlayer exciton control and manipulation, *Nature Nanotechnology* 13, 974 (2018).

40.Y. Tang et al., Van der Waals heterostructures for spintronics and opto-spintronics, *Nature Nanotechnology* 16, 52 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41565-021-00936-x>

41. Tang et al, Simulation of Hubbard model physics in WSe₂/WS₂ moiré superlattices, *Nature* 579, 353 (2020).