Supplementary Materials

Table 1. Comparison between our calculated bandstructures and those reported in MaterialsCloud[1] The band gap, E_g, and direct band gap, E_d, are calculated at the GGA level in both cases (data from MaterialsCloud are indicated as E_g^{ref} and E_d^{ref}). In contrast the binding energy is computed using the Tkatchenko-Scheffler method with Hirshfeld partitioning[2] in our work, E_b, and both the DF2C09[3], E_b^{DF2C09}, and rVV10[4], E_b^{rVV10}, functionals in MaterialsCloud.

name	E_b	E_b^{DF2C09}	E_b^{rVV10}	E_g	E_d	E_g^{ref}	E_d^{ref}
1T-$AsSn_2$	-	-96.4	-88.5	0.0	0.0	-	-
1T-$AuTe_2$	-67.3	-74.3	-75.1	0.0	0.0	-	-
1T-$BiTe_2$	-	-81.7	-83.1	0.0	0.0	-	-
1T-CaI_2	-15.2	-9.9	-15.3	3.85	4.43	3.84	4.42
1T-$CdBr_2$	-11.2	-10.8	-17.5	3.27	3.27	3.24	3.24
1T-$CdCl_2$	-11.2	-11.0	-17.8	3.94	3.94	3.89	3.89
1T-CdI_2	-12.5	-10.7	-17.2	2.43	2.65	2.41	2.62
1T-$CoBr_2$	-13.9	-16.8	-23.3	0.38	0.41	0.20	0.21
1T-$CoCl_2$	-14.5	-16.2	-22.3	0.37	0.40	0.17	0.19
1T-CoI_2	-12.5	-18.3	-24.3	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-CoO_2	-39.3	-22.6	-34.2	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$CoTe_2$	-50.6	-51.4	-50.7	0.0	0.0	-	-
1T-CrS_2	-	-53.0	-59.1	0.0	0.0	-	-
1T-$CrSe_2$	-36.0	-23.3	-29.7	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$CrTe_2$	-33.4	-41.1	-45.3	0.0	0.0	-	-
1T-$FeBr_2$	-14.7	-15.5	-22.2	0.0	0.0	3.71	3.71
1T-$FeCl_2$	-10.6	-15.3	-22.1	0.0	0.0	0.88	0.88
1T-FeI_2	-16.2	-16.9	-23.3	0.0	0.0	2.82	3.05
1T-$GeBr_2$	-	-10.8	-16.5	2.35	2.85	-	-
1T-GeI_2	-12.2	-12.1	-17.6	2.14	2.55	2.14	2.54
1T-HfS_2	-27.9	-18.1	-23.2	1.24	2.05	1.29	2.11
1T-$HfSe_2$	-23.7	-18.8	-23.9	0.58	1.47	0.64	1.52
1T-$HfTe_2$	-25.6	-23.4	-26.4	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$HgBr_2$	-	-10.9	-18.5	2.73	2.73	-	-
1T-$IrTe_2$	-50.5	-55.0	-55.1	0.0	0.0	-	-
1T-$MgBr_2$	-13.5	-10.2	-15.3	4.76	4.76	4.78	4.78
1T-$MgCl_2$	-12.0	-12.3	-17.7	6.02	6.02	6.03	6.03
1T-MgI_2	-13.8	-10.8	-16.2	3.62	4.01	3.60	4.00
1T-$MnBr_2$	-13.2	-15.4	-22.2	2.88	3.17	1.85	1.85
1T-$MnCl_2$	-11.0	-14.8	-21.5	3.72	3.79	2.06	2.06
1T-MnI_2	-14.8	-17.0	-23.3	1.89	2.18	1.40	1.40
1T-MoS_2	-41.7	-28.6	-33.5	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-NBa_2	-136.4	-44.0	-45.2	0.0	0.0	-	-
1T-NCa_2	-135.0	-71.7	-71.4	0.0	0.0	-	-
1T-NSr_2	-128.4	-57.2	-57.1	0.0	0.0	-	-
1T-NbS_2	-42.3	-27.2	-30.9	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$NbSe_2$	-37.8	-28.3	-32.7	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$NbTe_2$	-34.4	-28.3	-31.8	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$NiBr_2$	-14.2	-18.1	-24.4	1.35	1.36	1.18	1.18
1T-$NiCl_2$	-15.5	-16.3	-22.6	1.50	1.50	1.30	1.30
1T-NiI_2	-16.0	-21.5	-26.9	0.98	1.16	0.97	1.08
1T-NiO_2	-6.0	-17.0	-28.5	1.31	1.51	1.32	1.54

.....

table continued

name	E_b	E_b^{DF2C09}	E_b^{rVV10}	E_g	E_d	E_g^{ref}	E_d^{ref}
1T-$NiTe_2$	-50.6	-48.9	-48.0	0.0	0.0	-	-
1T-OTl_2	-38.1	-19.4	-27.3	1.08	1.08	1.00	1.00
1T-PSn_2	-	-106	-96.0	0.0	0.0	-	-
1T-PbI_2	-10.4	-10.1	-16.2	2.61	2.94	2.54	2.87
1T-$PdTe_2$	-42.0	-50.8	-50.9	0.21	0.61	-	-
1T-PtO_2	-28.7	-20.6	-33.7	1.72	2.16	1.69	2.16
1T-PtS_2	-25.2	-27.3	-33.0	1.77	1.89	1.78	1.90
1T-$PtSe_2$	-27.1	-29.6	-35.2	1.37	1.53	1.34	1.55
1T-$PtTe_2$	-34.7	-45.3	-47.1	0.74	1.07	-	-
1T-$RhTe_2$	-54.4	-54.9	-54.4	0.0	0.0	-	-
1T-STl_2	-31.6	-19.2	-	1.38	1.61	1.39	1.73
1T-$SiTe_2$	-19.4	-19.9	-25.6	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-SnS_2	-17.0	-17.0	-24.1	1.55	1.79	1.51	1.79
1T-$SnSe_2$	-17.3	-17.3	-25.0	0.77	1.09	0.75	1.09
1T-TaS_2	-32.5	-25.2	-29.7	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$TaSe_2$	-30.2	-25.1	-30.4	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$TiBr_2$	-17.6	-15.3	-21.8	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$TiCl_2$	-24.1	-14.9	-21.6	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-TiS_2	-36.1	-25.7	-29.4	0.0	0.0	0006	0.43
1T-$TiSe_2$	-33.2	-25.2	-29.6	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-$TiTe_2$	-30.9	-28.1	-30.2	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-TmI_2	-22.4	-10.5	-16.1	0.0	0.0	1.06	1.11
1T-VBr_2	-16.2	-15.8	-22.1	1.27	1.32	1.30	1.30
1T-VCl_2	-18.5	-15.5	-22.1	1.36	1.44	1.41	1.44
1T-VI_2	-16.9	-16.4	-22.4	1.21	1.24	1.17	1.21
1T-VS_2	-40.9	-27.7	-31.3	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-VSe_2	-33.8	-25.4	-30.2	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-VTe_2	-28.7	-27.1	-30.1	0.0	0.0	0.00	0.00
1T-YbI_2	-20.2	-10.6	-16.1	0.60	0.63	0.75	0.77
1T-$YbSe_2$	-	-128.	-300.	0.0	0.0	-	-
1T-$ZnBr_2$	-7.6	-11.4	-20.0	3.48	3.56	3.43	3.56
1T-$ZnCl_2$	-12.2	-11.1	-16.8	4.51	4.52	4.46	4.47
1T-ZnI_2	-13.4	-12.4	-17.9	2.01	2.31	2.00	2.31
1T-ZrS_2	-32.1	-19.0	-24.1	1.12	1.68	1.15	1.69
1T-$ZrSe_2$	-30.5	-20.0	-25.0	0.40	1.09	0.50	1.13
1T-$ZrTe_2$	-29.0	-26.1	-28.4	0.0	0.0	0.00	0.00
2H-$CrSe_2$	-	-	-43.8	0.79	0.79	-	-
2H-GeI_2	-8.0	-8.8	-13.3	2.07	2.63	2.04	2.61
2H-$LaBr_2$	-28.5	-11.2	-16.8	0.0	0.0	0.00	0.00
2H-MoS_2	-38.4	-23.8	-30.3	1.75	1.75	1.62	1.66
2H-$MoSe_2$	-34.9	-23.3	-30.4	1.52	1.52	1.48	1.48
2H-$MoTe_2$	-32.7	-25.2	-30.4	1.15	1.15	1.07	1.07
2H-NbS_2	-43.6	-74.6	-69.8	0.0	0.0	0.00	0.00
2H-$NbSe_2$	-28.8	-61.7	-59.9	0.0	0.0	0.00	0.00
2H-$ReSe_2$	-33.1	-28.3	-30.3	0.0	0.0	0.00	0.00
2H-TaS_2	-32.2	-65.7	-61.7	0.0	0.0	0.00	0.00
2H-$TaSe_2$	-24.6	-23.5	-29.1	0.0	0.0	0.00	0.00
2H-WS_2	-33.2	-22.7	-29.9	1.89	1.89	1.81	1.81
2H-WSe_2	-31.0	-22.6	-30.0	1.64	1.64	1.58	1.58
2H-WTe_2	-27.2	-24.7	-30.0	1.16	1.16	0.00	0.00
2H-$ZrCl_2$	-25.0	-14.6	-21.4	0.97	1.63	1.00	1.59

Table 2. Calculated electronic properties of the building-block MLs for vdWHs compared to the results presented in C2DB[5] E_g, E_d, E_v and ΔE_{soc} are respectively the band gap, the optical gap, valence band maximum (VBM) and the shift of VBM under the effect of spin-orbital coupling (E_v-E_v^{nonsoc}). All energies are in eV. The quantities labelled with the super-script "ref" are those contained in C2DB obtained with the HSE functional. Quantities labelled with the super-script "GW" are C2DB results of *GW* calculations.

name	E_g	E_d	E_v	ΔE_{soc}	E_g^{ref}	E_d^{ref}	E_v^{ref}	ΔE_{soc}^{ref}	E_g^{GW}	E_d^{GW}	E_v^{GW}
1T-CaI_2	4.56	5.22	-7.10	0.41	4.81	5.27	-6.99	0.39	6.92	7.19	-8.22
1T-$CdBr_2$	4.32	4.32	-7.94	0.17	4.16	4.16	-7.93	0.17	5.48	5.48	-8.90
1T-$CdCl_2$	5.36	5.36	-8.87	0.05	5.18	5.18	-8.98	0.03	6.72	6.72	-10.0
1T-CdI_2	2.99	3.36	-6.56	0.40	2.99	3.30	-6.62	0.38	4.04	4.33	-7.36
1T-$GeBr_2$	3.09	3.61	-7.24	0.02	3.15	3.66	-7.14	0.02	4.13	4.63	-7.87
1T-GeI_2	2.64	3.05	-6.34	0.14	2.67	3.10	-6.30	0.11	3.35	3.76	-6.85
1T-HfS_2	2.04	2.90	-7.06	0.07	2.15	3.06	-6.89	0.09	2.94	3.83	-7.50
1T-$HfSe_2$	1.10	2.02	-6.01	0.19	1.22	2.19	-5.81	0.21	1.79	2.70	-6.33
1T-$HgBr_2$	3.79	3.79	-7.69	0.13	2.93	2.93	-7.68	0.14	3.79	3.79	-8.28
1T-$MgBr_2$	5.86	5.86	-8.16	0.20	5.74	5.74	-8.04	0.19	7.72	7.72	-9.47
1T-$MgCl_2$	7.49	7.49	-9.22	0.05	7.29	7.29	-9.23	0.04	9.60	9.60	-10.8
1T-MgI_2	4.16	4.64	-6.72	0.42	4.20	4.55	-6.67	0.41	5.74	6.06	-7.75
1T-NiO_2	3.29	3.38	-9.97	-0.04	3.31	3.38	-9.84	0.00	2.35	2.52	-8.20
1T-OTl_2	1.51	1.51	-5.40	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1T-PbI_2	2.65	2.91	-6.72	0.17	2.30	2.55	-6.80	0.14	3.22	3.48	-7.55
1T-$PdTe_2$	0.09	0.83	-4.45	0.46	0.00	0.00	0.00	4.82	0.00	0.00	0.00
1T-PtO_2	3.50	3.95	-8.04	0.26	3.15	3.61	-8.04	0.10	3.59	3.97	-7.73
1T-PtS_2	2.65	2.79	-6.92	0.12	2.49	2.61	-6.87	0.09	2.95	3.11	-6.97
1T-$PtSe_2$	1.72	2.08	-5.85	0.35	1.64	1.93	-5.84	0.26	2.38	2.57	-6.24
1T-$PtTe_2$	0.62	1.31	-4.52	0.58	0.60	1.17	-4.51	0.50	1.24	1.85	-4.90
1T-STl_2	1.89	2.07	-5.15	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1T-SnS_2	2.48	2.75	-7.45	-0.01	2.36	2.63	-7.38	0.00	3.15	3.40	-7.94
1T-$SnSe_2$	1.44	1.81	-6.62	0.03	1.33	1.71	-6.46	0.05	1.91	2.28	-6.88
1T-TiS_2	0.71	1.11	-6.42	0.00	1.18	1.72	-6.10	0.01	0.00	0.00	0.00
1T-YbI_2	2.35	2.40	-5.19	0.38	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1T-$ZnBr_2$	4.61	4.73	-7.82	0.18	4.56	4.58	-7.81	0.11	5.86	5.86	-8.71
1T-$ZnCl_2$	6.12	6.12	-8.80	0.05	5.93	5.94	-8.94	0.00	7.44	7.44	-9.93
1T-ZnI_2	2.59	3.01	-6.44	0.36	2.60	2.99	-6.44	0.32	3.58	4.00	-7.11
1T-ZrS_2	1.95	2.56	-7.20	0.03	2.17	2.85	-6.97	0.04	2.89	3.58	-7.50
1T-$ZrSe_2$	0.94	1.68	-6.15	0.14	1.20	2.02	-5.89	0.17	1.69	2.47	-6.31
2H-GeI_2	2.36	2.93	-6.32	0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2H-MoS_2	2.22	2.22	-6.44	0.06	2.09	2.09	-5.98	0.08	2.53	2.53	-5.96
2H-$MoSe_2$	1.95	1.95	-5.81	0.08	1.80	1.80	-5.31	0.10	2.12	2.12	-5.27
2H-$MoTe_2$	1.50	1.50	-5.25	0.10	1.37	1.37	-4.81	0.13	1.56	1.56	-4.72
2H-WS_2	2.20	2.20	-6.08	0.21	2.05	2.05	-5.67	0.22	2.53	2.53	-6.02
2H-WSe_2	1.88	1.88	-5.46	0.23	1.73	1.73	-4.99	0.25	2.10	2.13	-5.32
2H-WTe_2	1.30	1.30	-4.92	0.25	1.14	1.14	-4.50	0.28	1.38	1.38	-4.77
2H-$ZrCl_2$	1.55	2.29	-4.58	0.03	1.50	2.16	-4.07	0.02	1.99	2.56	-4.43

Table 3. Summary of the electronic properties of all the type-II vdWHs with pseudo-direct band gap Here we report the vdWH composition (ML-A and ML-B), the band gap, E_g, the valence band offset, ΔE_v, and the conduction band offset, ΔE_c. S_A and S_B are the number of primitive cells of ML A and B in the superstructure.

ML-A	ML-B	E_g	ΔE_v	ΔE_c	ΔE_g	S_A	S_B
1T-CaI_2	1T-$CdBr_2$	3.48	0.84	1.07	0.84	7	9
1T-CaI_2	1T-$CdCl_2$	3.59	1.77	0.97	0.97	3	4
1T-CaI_2	1T-$GeBr_2$	2.96	0.14	1.60	0.14	13	16
1T-CaI_2	1T-$HgBr_2$	3.20	0.59	1.36	0.59	16	19
1T-CaI_2	1T-PtO_2	2.56	0.94	2.00	0.94	9	19
1T-CaI_2	1T-$ZnCl_2$	4.43	1.70	0.13	0.13	12	19
1T-CdI_2	1T-$CdBr_2$	2.94	1.38	0.05	0.05	12	13
1T-MgI_2	1T-$CdBr_2$	3.10	1.22	1.06	1.06	12	13
1T-STl_2	1T-$CdBr_2$	1.54	2.78	0.35	0.35	1	1
1T-YbI_2	1T-$CdBr_2$	1.57	2.75	0.79	0.79	12	13
1T-$ZnBr_2$	1T-$CdBr_2$	4.20	0.12	0.41	0.12	21	19
1T-$MgBr_2$	1T-$CdCl_2$	4.65	0.71	1.21	0.71	1	1
1T-MgI_2	1T-$CdCl_2$	3.21	2.15	0.95	0.95	16	19
1T-$CdCl_2$	1T-NiO_2	2.19	1.11	3.17	1.11	13	25
1T-STl_2	1T-$CdCl_2$	1.64	3.71	0.24	0.24	12	13
1T-YbI_2	1T-$CdCl_2$	1.67	3.68	0.68	0.68	16	19
1T-$ZnBr_2$	1T-$CdCl_2$	4.31	1.05	0.30	0.30	13	12
1T-$ZnCl_2$	1T-$CdCl_2$	5.29	0.07	0.84	0.07	19	16
1T-CdI_2	1T-$GeBr_2$	2.42	0.68	0.57	0.57	12	13
1T-CdI_2	1T-HfS_2	1.55	0.50	1.45	0.50	3	4
1T-CdI_2	1T-$HgBr_2$	2.66	1.13	0.33	0.33	1	1
1T-CdI_2	1T-PbI_2	2.49	0.16	0.50	0.16	21	19
1T-CdI_2	1T-PtS_2	2.30	0.36	0.69	0.36	9	13
1T-STl_2	1T-CdI_2	1.59	1.41	0.30	0.30	13	12
1T-CdI_2	1T-SnS_2	1.59	0.89	1.40	0.89	3	4
1T-YbI_2	1T-CdI_2	1.62	1.37	0.74	0.74	1	1
1T-CdI_2	1T-ZrS_2	1.31	0.64	1.68	0.64	3	4
1T-MgI_2	1T-$GeBr_2$	2.58	0.52	1.59	0.52	12	13
1T-$GeBr_2$	1T-NiO_2	0.56	2.74	2.54	2.54	9	19
1T-OTl_2	1T-$GeBr_2$	1.26	1.83	0.25	0.25	4	3
1T-$GeBr_2$	1T-PtO_2	2.69	0.81	0.40	0.40	4	7
1T-$PtSe_2$	1T-$GeBr_2$	1.71	1.38	0.01	0.01	16	13
1T-$PtTe_2$	1T-$GeBr_2$	0.38	2.72	0.25	0.25	1	1
1T-STl_2	1T-$GeBr_2$	1.01	2.08	0.88	0.88	1	1
1T-$GeBr_2$	1T-SnS_2	2.27	0.22	0.83	0.22	13	16
1T-YbI_2	1T-$GeBr_2$	1.04	2.05	1.31	1.31	12	13
1T-ZnI_2	1T-$GeBr_2$	2.30	0.80	0.29	0.29	1	1
2H-GeI_2	1T-$GeBr_2$	2.17	0.92	0.19	0.19	12	13
2H-WS_2	1T-$GeBr_2$	1.94	1.15	0.26	0.26	12	7
1T-GeI_2	1T-PbI_2	2.27	0.38	0.37	0.37	21	19
1T-GeI_2	1T-PtO_2	1.80	1.70	0.84	0.84	7	13
1T-GeI_2	1T-PtS_2	2.08	0.57	0.56	0.56	9	13
1T-STl_2	1T-GeI_2	1.45	1.19	0.44	0.44	13	12
1T-GeI_2	1T-$SnSe_2$	1.17	0.28	1.47	0.28	7	9
1T-GeI_2	1T-TiS_2	0.63	0.08	2.00	0.08	12	19
1T-YbI_2	1T-GeI_2	1.48	1.16	0.88	0.88	1	1
1T-GeI_2	1T-ZnI_2	2.49	0.10	0.15	0.10	12	13
1T-GeI_2	2H-MoS_2	2.13	0.09	0.51	0.09	7	13
1T-MgI_2	1T-HfS_2	1.71	0.34	2.46	0.34	3	4

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	ΔE_v	ΔE_c	ΔE_g	S_A	S_B
1T-OTl_2	1T-HfS_2	0.39	1.66	1.12	1.12	13	12
1T-PbI_2	1T-HfS_2	1.71	0.34	0.94	0.34	12	19
1T-PtS_2	1T-HfS_2	1.90	0.14	0.75	0.14	13	12
1T-STl_2	1T-HfS_2	0.14	1.90	1.75	1.75	13	16
1T-YbI_2	1T-HfS_2	0.17	1.87	2.18	1.87	3	4
2H-WSe_2	1T-HfS_2	0.45	1.60	1.43	1.43	16	13
1T-OTl_2	1T-$HfSe_2$	0.48	0.61	1.02	0.61	21	19
1T-STl_2	1T-$HfSe_2$	0.23	0.86	1.65	0.86	16	19
1T-$HfSe_2$	1T-TiS_2	0.30	0.41	0.79	0.41	13	16
1T-YbI_2	1T-$HfSe_2$	0.27	0.83	2.09	0.83	13	16
1T-MgI_2	1T-$HgBr_2$	2.82	0.97	1.35	0.97	1	1
1T-OTl_2	1T-$HgBr_2$	1.50	2.29	0.01	0.01	13	9
1T-$HgBr_2$	1T-PtO_2	3.15	0.35	0.64	0.35	7	13
1T-$PtTe_2$	1T-$HgBr_2$	0.62	3.17	0.01	0.01	13	12
1T-STl_2	1T-$HgBr_2$	1.25	2.54	0.64	0.64	13	12
1T-YbI_2	1T-$HgBr_2$	1.28	2.51	1.07	1.07	1	1
1T-ZnI_2	1T-$HgBr_2$	2.54	1.25	0.05	0.05	13	12
2H-$MoSe_2$	1T-$HgBr_2$	1.91	1.88	0.04	0.04	12	7
1T-$MgBr_2$	1T-NiO_2	1.48	1.81	4.38	1.81	13	25
1T-$MgBr_2$	1T-$ZnCl_2$	5.49	0.64	0.37	0.37	16	19
1T-MgI_2	1T-PbI_2	2.65	0.00	1.52	0.00	19	16
1T-MgI_2	1T-PtS_2	2.46	0.20	1.71	0.20	9	13
1T-MgI_2	1T-SnS_2	1.75	0.73	2.41	0.73	3	4
1T-MgI_2	1T-$ZnBr_2$	3.51	1.10	0.65	0.65	13	16
1T-MgI_2	1T-$ZnCl_2$	4.05	2.08	0.12	0.12	3	4
1T-MgI_2	1T-ZrS_2	1.47	0.48	2.70	0.48	3	4
1T-PbI_2	1T-NiO_2	0.04	3.25	2.61	2.61	7	19
1T-PtO_2	1T-NiO_2	1.36	1.93	2.14	1.93	7	9
1T-PtS_2	1T-NiO_2	0.24	3.06	2.42	2.42	12	19
1T-$ZnBr_2$	1T-NiO_2	1.14	2.15	3.47	2.15	7	13
1T-$ZnCl_2$	1T-NiO_2	2.12	1.18	4.01	1.18	7	12
1T-OTl_2	1T-PbI_2	1.33	1.32	0.18	0.18	12	7
1T-OTl_2	1T-PtO_2	0.86	2.64	0.65	0.65	3	4
1T-OTl_2	1T-$PtSe_2$	1.27	0.45	0.24	0.24	13	12
1T-STl_2	1T-OTl_2	1.26	0.25	0.63	0.25	3	4
1T-OTl_2	1T-SnS_2	0.43	2.05	1.07	1.07	13	12
1T-YbI_2	1T-OTl_2	1.29	0.22	1.07	0.22	9	13
1T-OTl_2	1T-ZrS_2	0.15	1.80	1.35	1.35	13	12
1T-OTl_2	1T-$ZrSe_2$	0.19	0.75	1.31	0.75	21	19
1T-OTl_2	2H-GeI_2	1.45	0.91	0.06	0.06	4	3
1T-PbI_2	1T-PtO_2	2.18	1.32	0.47	0.47	9	19
1T-PbI_2	1T-PtS_2	2.46	0.19	0.19	0.19	7	12
1T-$PtTe_2$	1T-PbI_2	0.45	2.20	0.18	0.18	4	3
1T-STl_2	1T-PbI_2	1.08	1.57	0.81	0.81	9	7
1T-PbI_2	1T-SnS_2	1.75	0.73	0.90	0.73	12	19
1T-YbI_2	1T-PbI_2	1.11	1.54	1.24	1.24	19	16
1T-ZnI_2	1T-PbI_2	2.37	0.28	0.22	0.22	9	7
1T-PbI_2	1T-ZrS_2	1.47	0.48	1.18	0.48	12	19
2H-WTe_2	1T-PbI_2	0.84	1.81	0.46	0.46	12	7
1T-PtS_2	1T-PtO_2	2.37	1.13	0.28	0.28	3	4
1T-$PtSe_2$	1T-PtO_2	1.31	2.19	0.41	0.41	9	13
1T-STl_2	1T-PtO_2	0.61	2.89	1.28	1.28	4	7

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	ΔE_v	ΔE_c	ΔE_g	S_A	S_B
1T-YbI_2	1T-PtO_2	0.64	2.86	1.71	1.71	4	7
1T-$ZnBr_2$	1T-PtO_2	3.28	0.22	1.34	0.22	9	13
2H-GeI_2	1T-PtO_2	1.77	1.73	0.59	0.59	4	7
2H-$MoSe_2$	1T-PtO_2	1.27	2.23	0.68	0.68	12	13
2H-$ZrCl_2$	1T-PtO_2	0.03	3.47	1.52	1.52	16	19
1T-$PtSe_2$	1T-PtS_2	1.59	1.06	0.13	0.13	12	13
1T-PtS_2	1T-SnS_2	1.95	0.54	0.71	0.54	13	12
1T-YbI_2	1T-PtS_2	0.92	1.73	1.43	1.43	9	13
1T-PtS_2	1T-ZrS_2	1.67	0.28	0.99	0.28	13	12
2H-GeI_2	1T-PtS_2	2.05	0.60	0.31	0.31	3	4
1T-STl_2	1T-$PtSe_2$	1.02	0.70	0.87	0.70	13	16
1T-$PtSe_2$	1T-$SnSe_2$	0.68	0.77	1.04	0.77	13	12
1T-$PtSe_2$	1T-TiS_2	0.14	0.57	1.57	0.57	13	16
1T-YbI_2	1T-$PtSe_2$	1.05	0.67	1.31	0.67	7	9
1T-$PtSe_2$	1T-$ZrSe_2$	0.64	0.30	1.07	0.30	13	12
2H-$MoTe_2$	1T-$PtSe_2$	1.11	0.61	0.39	0.39	13	12
1T-$PtTe_2$	2H-GeI_2	0.57	1.80	0.06	0.06	13	12
1T-STl_2	1T-SnS_2	0.18	2.30	1.70	1.70	13	16
1T-STl_2	2H-GeI_2	1.20	1.16	0.69	0.69	13	12
1T-STl_2	2H-MoS_2	0.94	1.28	0.95	0.95	7	12
1T-STl_2	2H-$MoSe_2$	1.29	0.65	0.59	0.59	12	19
1T-STl_2	2H-WS_2	1.27	0.93	0.62	0.62	12	19
1T-STl_2	2H-WSe_2	1.57	0.31	0.32	0.31	13	19
1T-YbI_2	1T-SnS_2	0.22	2.27	2.14	2.14	3	4
1T-ZnI_2	1T-SnS_2	1.47	1.01	1.12	1.01	13	16
2H-GeI_2	1T-SnS_2	1.35	1.14	1.01	1.01	7	9
1T-YbI_2	1T-$SnSe_2$	0.01	1.43	2.35	1.43	13	16
1T-$SnSe_2$	1T-ZrS_2	1.37	0.58	0.07	0.07	12	13
2H-GeI_2	1T-$SnSe_2$	1.14	0.30	1.22	0.30	16	19
2H-$MoTe_2$	1T-$SnSe_2$	0.07	1.37	1.43	1.37	16	13
2H-GeI_2	1T-TiS_2	0.61	0.10	1.75	0.10	9	13
1T-YbI_2	1T-$ZnBr_2$	1.98	2.64	0.38	0.38	13	16
1T-YbI_2	1T-ZnI_2	1.33	1.25	1.02	1.02	12	13
1T-YbI_2	2H-MoS_2	0.97	1.25	1.38	1.25	4	7
1T-YbI_2	2H-$MoSe_2$	1.32	0.62	1.03	0.62	12	19
1T-YbI_2	2H-$MoTe_2$	1.44	0.06	0.92	0.06	9	13
1T-YbI_2	2H-WS_2	1.30	0.90	1.06	0.90	4	7
1T-YbI_2	2H-WSe_2	1.60	0.28	0.75	0.28	12	19
1T-ZnI_2	1T-ZrS_2	1.19	0.76	1.40	0.76	13	16
2H-GeI_2	1T-ZrS_2	1.07	0.88	1.30	0.88	7	9
2H-GeI_2	2H-MoS_2	2.10	0.12	0.26	0.12	4	7
2H-WS_2	2H-GeI_2	2.13	0.23	0.07	0.07	7	4
2H-$ZrCl_2$	2H-GeI_2	0.62	1.74	0.93	0.93	19	13
2H-WS_2	2H-MoS_2	1.87	0.35	0.33	0.33	1	1
2H-$ZrCl_2$	2H-MoS_2	0.36	1.86	1.19	1.19	16	19
2H-$MoTe_2$	2H-$MoSe_2$	1.39	0.56	0.11	0.11	16	19
2H-WSe_2	2H-$MoSe_2$	1.60	0.35	0.28	0.28	1	1
2H-WTe_2	2H-$MoSe_2$	1.06	0.89	0.25	0.25	16	19
2H-$MoTe_2$	2H-WS_2	1.36	0.84	0.14	0.14	13	16
2H-WTe_2	2H-$MoTe_2$	1.17	0.33	0.13	0.13	1	1
2H-$ZrCl_2$	2H-WS_2	0.69	1.51	0.86	0.86	16	19

Table 4. Summary of the electronic properties of all the type-II vdWHs with indirect band gap Here we report the vdWH composition (ML-A and ML-B), the band gap, E_g, the optical band gap, E_d, the valence band offset, ΔE_v, the conduction band offset, ΔE_c. We have defined $\Delta E_g = \min(E_g^A, E_g^B) - E_g^{vdWH}$ as the difference between the minimum band gap of the isolated MLs, E_g^A and E_g^B, and that of the vdWH E_g^{vdWH}. ΔE_d is the same quantity for for the optical band gap. S_A and S_B are the number of primitive cells of ML A and B in the superstructure.

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	ΔE_g	ΔE_d	S_A	S_B
1T-CaI_2	1T-NiO_2	0.42	0.61	2.87	4.14	2.87	2.77	7	19
1T-CaI_2	1T-SnS_2	2.13	2.30	0.35	2.43	0.35	0.45	13	19
1T-CaI_2	1T-$ZnBr_2$	3.89	4.01	0.72	0.66	0.66	0.72	9	13
1T-CaI_2	1T-ZrS_2	1.85	2.09	0.10	2.71	0.10	0.47	9	13
1T-$CdBr_2$	1T-NiO_2	1.26	1.42	2.04	3.06	2.04	1.97	9	19
1T-$CdBr_2$	1T-PtO_2	3.39	3.55	0.11	0.93	0.11	0.40	7	12
2H-WSe_2	1T-$CdBr_2$	1.84	2.26	2.48	0.03	0.03	-0.37	19	13
2H-WTe_2	1T-$CdBr_2$	1.30	1.96	3.02	0.00	0.00	-0.66	4	3
2H-$ZrCl_2$	1T-$CdBr_2$	0.96	1.51	3.36	0.59	0.59	0.77	13	9
2H-$ZrCl_2$	1T-$CdCl_2$	1.07	1.72	4.29	0.48	0.48	0.57	4	3
1T-CdI_2	1T-PtO_2	2.02	2.12	1.48	0.98	0.98	1.23	7	13
1T-CdI_2	1T-$SnSe_2$	1.38	1.70	0.06	1.61	0.06	0.11	7	9
2H-$ZrCl_2$	1T-CdI_2	1.01	1.30	1.98	0.54	0.54	0.99	19	12
1T-GeI_2	1T-$GeBr_2$	2.20	2.31	0.89	0.44	0.44	0.74	12	13
1T-PbI_2	1T-$GeBr_2$	2.58	2.79	0.51	0.07	0.07	0.12	7	9
2H-$MoSe_2$	1T-$GeBr_2$	1.67	2.02	1.43	0.28	0.28	-0.07	19	12
2H-$MoTe_2$	1T-$GeBr_2$	1.10	1.48	1.99	0.39	0.39	0.01	4	3
2H-WSe_2	1T-$GeBr_2$	1.32	1.77	1.78	0.56	0.56	0.12	19	12
2H-WTe_2	1T-$GeBr_2$	0.77	1.44	2.32	0.53	0.53	-0.14	4	3
2H-$ZrCl_2$	1T-$GeBr_2$	0.43	1.02	2.66	1.12	1.12	1.26	13	9
1T-GeI_2	1T-HfS_2	1.33	1.46	0.71	1.31	0.71	1.44	3	4
1T-GeI_2	1T-$HgBr_2$	2.44	2.67	1.35	0.20	0.20	0.38	1	1
1T-GeI_2	1T-SnS_2	1.37	1.65	1.11	1.26	1.11	1.11	3	4
1T-GeI_2	1T-ZrS_2	1.09	1.23	0.86	1.55	0.86	1.33	3	4
2H-WSe_2	1T-GeI_2	1.75	2.40	0.88	0.12	0.12	-0.51	7	4
2H-WTe_2	1T-GeI_2	1.21	1.64	1.43	0.09	0.09	-0.34	13	9
2H-$ZrCl_2$	1T-GeI_2	0.87	1.28	1.77	0.68	0.68	1.01	19	12
1T-$HfSe_2$	1T-HfS_2	1.00	1.52	1.04	0.09	0.09	0.50	12	13
1T-HfS_2	1T-NiO_2	0.38	0.73	2.91	1.67	1.67	2.17	4	7
1T-$PtSe_2$	1T-HfS_2	0.84	1.70	1.20	0.88	0.88	0.38	1	1
1T-ZnI_2	1T-HfS_2	1.43	1.60	0.62	1.16	0.62	1.31	7	9
1T-HfS_2	1T-ZrS_2	1.81	2.41	0.14	0.24	0.14	0.14	1	1
2H-GeI_2	1T-HfS_2	1.30	1.41	0.74	1.06	0.74	1.50	3	4
2H-MoS_2	1T-HfS_2	1.42	1.59	0.62	0.80	0.62	0.63	4	3
2H-$MoSe_2$	1T-HfS_2	0.80	1.11	1.25	1.15	1.15	0.84	9	7
2H-$MoTe_2$	1T-HfS_2	0.23	0.39	1.81	1.27	1.27	1.11	13	12
2H-WS_2	1T-HfS_2	1.07	1.25	0.98	1.13	0.98	0.95	4	3
1T-$PtSe_2$	1T-$HfSe_2$	0.94	1.85	0.16	0.78	0.16	0.17	1	1
1T-$HfSe_2$	1T-SnS_2	1.05	1.61	1.44	0.05	0.05	0.41	12	13
1T-$HfSe_2$	1T-$SnSe_2$	0.84	1.73	0.61	0.26	0.26	0.08	1	1
1T-$HfSe_2$	1T-ZrS_2	0.76	1.25	1.18	0.33	0.33	0.77	12	13
1T-$HfSe_2$	1T-$ZrSe_2$	0.80	1.54	0.14	0.29	0.14	0.14	1	1
2H-$MoSe_2$	1T-$HfSe_2$	0.89	1.05	0.21	1.06	0.21	0.90	4	3
2H-$MoTe_2$	1T-$HfSe_2$	0.33	0.49	0.77	1.17	0.77	1.00	19	16
2H-WSe_2	1T-$HfSe_2$	0.54	0.71	0.55	1.34	0.55	1.17	4	3
1T-$HgBr_2$	1T-NiO_2	1.01	1.23	2.28	2.78	2.28	2.16	3	7
2H-$MoTe_2$	1T-$HgBr_2$	1.34	1.58	2.45	0.16	0.16	-0.08	13	9
.....									

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	ΔE_g	ΔE_d	S_A	S_B
2H-WS_2	1T-$HgBr_2$	2.18	2.52	1.61	0.02	0.02	-0.33	7	4
2H-WSe_2	1T-$HgBr_2$	1.56	1.82	2.23	0.32	0.32	0.06	19	12
2H-WTe_2	1T-$HgBr_2$	1.01	1.32	2.77	0.29	0.29	-0.02	13	9
2H-$ZrCl_2$	1T-$HgBr_2$	0.67	0.92	3.12	0.88	0.88	1.37	19	12
1T-$MgCl_2$	1T-NiO_2	2.54	2.71	0.76	4.96	0.76	0.67	4	7
1T-MgI_2	1T-NiO_2	0.04	0.37	3.25	4.12	3.25	3.02	3	7
1T-MgI_2	1T-PtO_2	2.18	2.31	1.32	1.99	1.32	1.64	4	7
1T-SnS_2	1T-NiO_2	0.77	0.91	2.52	1.71	1.71	1.84	4	7
1T-ZrS_2	1T-NiO_2	0.52	0.87	2.77	1.43	1.43	1.68	4	7
1T-OTl_2	1T-PtS_2	1.14	1.62	1.51	0.37	0.37	-0.11	1	1
1T-$PtTe_2$	1T-OTl_2	0.62	1.25	0.88	0.00	0.00	0.06	7	9
1T-OTl_2	1T-$SnSe_2$	0.23	0.42	1.22	1.28	1.22	1.09	19	16
1T-OTl_2	2H-MoS_2	1.19	1.46	1.03	0.32	0.32	0.05	7	9
2H-$MoTe_2$	1T-OTl_2	1.35	1.73	0.16	0.15	0.15	-0.23	1	1
2H-WTe_2	1T-OTl_2	1.02	1.67	0.49	0.28	0.28	-0.36	1	1
2H-$ZrCl_2$	1T-OTl_2	0.68	1.26	0.83	0.87	0.83	0.25	13	12
2H-GeI_2	1T-PbI_2	2.24	2.35	0.41	0.12	0.12	0.57	16	13
2H-$MoSe_2$	1T-PbI_2	1.74	2.10	0.91	0.21	0.21	-0.15	13	7
2H-$MoTe_2$	1T-PbI_2	1.17	1.65	1.48	0.33	0.33	-0.15	7	4
2H-WS_2	1T-PbI_2	2.01	2.35	0.64	0.19	0.19	-0.16	19	9
2H-WSe_2	1T-PbI_2	1.39	1.89	1.26	0.49	0.49	-0.01	13	7
2H-$ZrCl_2$	1T-PbI_2	0.50	1.15	2.15	1.05	1.05	1.13	7	4
1T-ZnI_2	1T-PtO_2	1.90	2.04	1.60	0.69	0.69	0.97	4	7
2H-MoS_2	1T-PtO_2	1.89	2.33	1.61	0.33	0.33	-0.11	1	1
2H-$MoTe_2$	1T-PtO_2	0.70	0.93	2.80	0.80	0.80	0.56	7	9
2H-WS_2	1T-PtO_2	1.54	1.98	1.96	0.66	0.66	0.22	1	1
2H-WSe_2	1T-PtO_2	0.92	1.03	2.58	0.96	0.96	0.85	12	13
2H-WTe_2	1T-PtO_2	0.37	0.60	3.13	0.93	0.93	0.70	7	9
1T-$PtTe_2$	1T-PtS_2	0.26	0.51	2.40	0.37	0.37	0.81	7	9
1T-STl_2	1T-PtS_2	0.89	1.08	1.76	1.00	1.00	1.00	3	4
1T-ZnI_2	1T-PtS_2	2.18	2.60	0.48	0.41	0.41	0.19	3	4
2H-MoS_2	1T-PtS_2	2.17	2.37	0.48	0.05	0.05	-0.14	9	7
2H-$MoSe_2$	1T-PtS_2	1.55	1.78	1.11	0.40	0.40	0.17	19	16
2H-$MoTe_2$	1T-PtS_2	0.98	1.32	1.67	0.52	0.52	0.17	1	1
2H-WS_2	1T-PtS_2	1.82	2.04	0.83	0.38	0.38	0.16	9	7
2H-WSe_2	1T-PtS_2	1.20	1.45	1.46	0.68	0.68	0.43	19	16
2H-WTe_2	1T-PtS_2	0.65	1.03	2.00	0.65	0.65	0.27	1	1
2H-$ZrCl_2$	1T-PtS_2	0.31	0.42	2.34	1.24	1.24	1.87	13	12
1T-$PtTe_2$	1T-$PtSe_2$	0.38	0.56	1.33	0.24	0.24	0.75	16	19
1T-$PtSe_2$	1T-SnS_2	0.89	1.84	1.60	0.83	0.83	0.24	1	1
1T-$PtSe_2$	1T-ZrS_2	0.60	1.21	1.34	1.11	1.11	0.87	1	1
1T-$PtSe_2$	2H-MoS_2	1.64	1.93	0.58	0.08	0.08	0.15	9	13
2H-$MoSe_2$	1T-$PtSe_2$	1.67	1.83	0.05	0.28	0.05	0.12	4	3
2H-WSe_2	1T-$PtSe_2$	1.32	1.59	0.39	0.55	0.39	0.29	9	7
2H-WTe_2	1T-$PtSe_2$	0.78	0.90	0.94	0.52	0.52	0.40	13	12
2H-$ZrCl_2$	1T-$PtSe_2$	0.44	0.61	1.28	1.11	1.11	1.47	16	13
1T-$PtTe_2$	2H-MoS_2	0.31	0.70	1.92	0.32	0.32	0.62	12	19
1T-STl_2	1T-ZnI_2	1.30	1.48	1.29	0.59	0.59	0.59	1	1
1T-STl_2	2H-$MoTe_2$	1.41	1.77	0.09	0.48	0.09	-0.27	3	4
2H-$ZrCl_2$	1T-STl_2	1.31	1.45	0.58	0.24	0.24	0.62	13	9
2H-MoS_2	1T-SnS_2	1.47	1.82	1.01	0.76	0.76	0.40	4	3
2H-$MoSe_2$	1T-SnS_2	0.84	1.29	1.64	1.11	1.11	0.66	9	7

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	ΔE_g	ΔE_d	S_A	S_B
2H-$MoTe_2$	1T-SnS_2	0.28	0.53	2.21	1.22	1.22	0.97	13	12
2H-WS_2	1T-SnS_2	1.11	1.51	1.37	1.08	1.08	0.69	4	3
2H-WSe_2	1T-SnS_2	0.49	1.06	1.99	1.39	1.39	0.82	9	7
1T-ZnI_2	1T-$SnSe_2$	1.26	1.46	0.18	1.32	0.18	0.35	19	21
2H-MoS_2	1T-$SnSe_2$	1.26	1.45	0.18	0.96	0.18	0.36	13	9
2H-$MoSe_2$	1T-$SnSe_2$	0.63	0.96	0.81	1.32	0.81	0.85	4	3
2H-WS_2	1T-$SnSe_2$	0.91	1.14	0.54	1.29	0.54	0.67	13	9
2H-WSe_2	1T-$SnSe_2$	0.28	0.66	1.16	1.59	1.16	1.15	4	3
1T-$ZrSe_2$	1T-TiS_2	0.44	0.62	0.27	0.50	0.27	0.49	7	9
2H-$MoSe_2$	1T-TiS_2	0.10	0.26	0.61	1.85	0.61	0.85	13	12
2H-WS_2	1T-TiS_2	0.37	0.63	0.34	1.82	0.34	0.48	19	16
1T-YbI_2	2H-GeI_2	1.23	1.34	1.13	1.12	1.12	1.07	1	1
2H-$ZrCl_2$	1T-$ZnBr_2$	1.37	1.49	3.25	0.18	0.18	0.80	9	7
2H-$MoTe_2$	1T-ZnI_2	1.39	1.67	1.19	0.11	0.11	-0.17	4	3
2H-WSe_2	1T-ZnI_2	1.61	1.95	0.98	0.27	0.27	-0.07	19	12
2H-WTe_2	1T-ZnI_2	1.06	1.42	1.52	0.24	0.24	-0.12	4	3
2H-$ZrCl_2$	1T-ZnI_2	0.72	0.88	1.86	0.83	0.83	1.41	13	9
1T-$ZrSe_2$	1T-ZrS_2	0.90	1.38	1.05	0.04	0.04	0.30	12	13
2H-MoS_2	1T-ZrS_2	1.19	1.36	0.76	1.04	0.76	0.87	4	3
2H-$MoSe_2$	1T-ZrS_2	0.56	0.88	1.39	1.39	1.39	1.07	9	7
2H-WS_2	1T-ZrS_2	0.83	1.01	1.12	1.36	1.12	1.19	4	3
2H-WSe_2	1T-ZrS_2	0.21	0.62	1.74	1.67	1.67	1.26	9	7
2H-$MoSe_2$	1T-$ZrSe_2$	0.60	0.77	0.34	1.35	0.34	0.91	4	3
2H-$MoTe_2$	1T-$ZrSe_2$	0.04	0.21	0.91	1.46	0.91	1.29	19	16
2H-WS_2	1T-$ZrSe_2$	0.87	1.11	0.07	1.32	0.07	0.57	13	9
2H-WSe_2	1T-$ZrSe_2$	0.25	0.43	0.69	1.63	0.69	1.25	4	3
2H-$MoSe_2$	2H-GeI_2	1.85	2.12	0.51	0.09	0.09	-0.17	19	12
2H-$MoTe_2$	2H-GeI_2	1.29	1.55	1.07	0.21	0.21	-0.05	13	9
2H-WSe_2	2H-GeI_2	1.51	1.81	0.86	0.37	0.37	0.07	19	12
2H-WTe_2	2H-GeI_2	0.96	1.33	1.40	0.34	0.34	-0.02	13	9
2H-$MoSe_2$	2H-MoS_2	1.60	1.96	0.63	0.35	0.35	-0.01	12	13
2H-$MoTe_2$	2H-MoS_2	1.03	1.42	1.19	0.47	0.47	0.08	7	9
2H-WSe_2	2H-MoS_2	1.25	1.62	0.98	0.63	0.63	0.26	12	13
2H-WTe_2	2H-MoS_2	0.70	1.13	1.52	0.60	0.60	0.17	7	9
2H-$MoSe_2$	2H-WS_2	1.92	2.14	0.27	0.03	0.03	-0.19	12	13
2H-$ZrCl_2$	2H-$MoSe_2$	0.71	0.96	1.23	0.83	0.83	0.99	12	13
2H-$ZrCl_2$	2H-$MoTe_2$	0.83	1.16	0.67	0.72	0.67	0.34	13	12
2H-WSe_2	2H-WS_2	1.57	1.81	0.62	0.30	0.30	0.07	12	13
2H-WTe_2	2H-WS_2	1.03	1.33	1.17	0.27	0.27	-0.03	7	9
2H-$ZrCl_2$	2H-WSe_2	0.99	1.14	0.89	0.56	0.56	0.74	12	13
2H-$ZrCl_2$	2H-WTe_2	0.96	1.34	0.34	0.59	0.34	-0.04	13	12

Table 5. Summary of the electronic properties of all the type-I vdWHs. Here we report the vdWH composition (ML-A and ML-B), the band gap, E_g, the optical band gap, E_d, the valence band offset, ΔE_v, the conduction band offset, ΔE_c. S_A and S_B are the number of primitive cells of ML A and B in the superstructure.

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	S_A	S_B
1T-CdI_2	1T-CaI_2	2.99	3.36	0.54	1.02	13	12
1T-GeI_2	1T-CaI_2	2.64	3.05	0.76	1.16	13	12
1T-HfS_2	1T-CaI_2	2.04	2.90	0.04	2.47	25	16
1T-$HfSe_2$	1T-CaI_2	1.10	2.02	1.09	2.38	13	9
1T-CaI_2	1T-$MgBr_2$	4.56	5.22	1.06	0.25	3	4
1T-CaI_2	1T-$MgCl_2$	4.56	5.22	2.12	0.82	16	25
1T-MgI_2	1T-CaI_2	4.16	4.64	0.38	0.01	19	16
1T-OTl_2	1T-CaI_2	1.51	1.51	1.70	1.35	19	12
1T-PbI_2	1T-CaI_2	2.65	2.91	0.38	1.53	1	1
1T-$PdTe_2$	1T-CaI_2	0.09	0.83	2.65	1.81	9	7
1T-PtS_2	1T-CaI_2	2.65	2.79	0.18	1.72	19	12
1T-$PtSe_2$	1T-CaI_2	1.72	2.08	1.25	1.59	13	9
1T-$PtTe_2$	1T-CaI_2	0.62	1.31	2.58	1.35	9	7
1T-STl_2	1T-CaI_2	1.89	2.07	1.95	0.72	16	13
1T-$SnSe_2$	1T-CaI_2	1.44	1.81	0.48	2.63	4	3
1T-TiS_2	1T-CaI_2	0.71	1.11	0.68	3.17	7	4
1T-YbI_2	1T-CaI_2	2.35	2.40	1.92	0.29	19	16
1T-ZnI_2	1T-CaI_2	2.59	3.01	0.66	1.31	16	13
1T-$ZrSe_2$	1T-CaI_2	0.94	1.68	0.95	2.67	13	9
2H-GeI_2	1T-CaI_2	2.36	2.93	0.78	1.41	19	16
2H-MoS_2	1T-CaI_2	2.22	2.22	0.66	1.67	19	9
2H-$MoSe_2$	1T-CaI_2	1.95	1.95	1.29	1.32	13	7
2H-$MoTe_2$	1T-CaI_2	1.50	1.50	1.85	1.20	19	12
2H-WS_2	1T-CaI_2	2.20	2.20	1.02	1.34	19	9
2H-WSe_2	1T-CaI_2	1.88	1.88	1.64	1.04	13	7
2H-WTe_2	1T-CaI_2	1.30	1.30	2.18	1.07	19	12
2H-$ZrCl_2$	1T-CaI_2	1.55	2.29	2.53	0.48	7	4
1T-$CdBr_2$	1T-$CdCl_2$	4.32	4.32	0.93	0.11	12	13
1T-$GeBr_2$	1T-$CdBr_2$	3.09	3.61	0.70	0.53	1	1
1T-GeI_2	1T-$CdBr_2$	2.64	3.05	1.59	0.09	12	13
1T-HfS_2	1T-$CdBr_2$	2.04	2.90	0.88	1.40	16	13
1T-$HfSe_2$	1T-$CdBr_2$	1.10	2.02	1.92	1.30	21	19
1T-$HgBr_2$	1T-$CdBr_2$	3.79	3.79	0.25	0.29	12	13
1T-$CdBr_2$	1T-$MgBr_2$	4.32	4.32	0.22	1.32	12	13
1T-$CdBr_2$	1T-$MgCl_2$	4.32	4.32	1.28	1.89	13	16
1T-OTl_2	1T-$CdBr_2$	1.51	1.51	2.53	0.28	4	3
1T-PbI_2	1T-$CdBr_2$	2.65	2.91	1.21	0.46	7	9
1T-$PdTe_2$	1T-$CdBr_2$	0.09	0.83	3.49	0.74	1	1
1T-PtS_2	1T-$CdBr_2$	2.65	2.79	1.02	0.65	4	3
1T-$PtSe_2$	1T-$CdBr_2$	1.72	2.08	2.08	0.52	19	16
1T-$PtTe_2$	1T-$CdBr_2$	0.62	1.31	3.42	0.28	1	1
1T-SnS_2	1T-$CdBr_2$	2.48	2.75	0.48	1.35	16	13
1T-$SnSe_2$	1T-$CdBr_2$	1.44	1.81	1.32	1.56	13	12
1T-TiS_2	1T-$CdBr_2$	0.71	1.11	1.52	2.09	13	9
1T-$CdBr_2$	1T-$ZnCl_2$	4.32	4.32	0.86	0.94	7	9
1T-ZnI_2	1T-$CdBr_2$	2.59	3.01	1.50	0.24	1	1
1T-ZrS_2	1T-$CdBr_2$	1.95	2.56	0.74	1.63	16	13
1T-$ZrSe_2$	1T-$CdBr_2$	0.94	1.68	1.79	1.59	21	19
2H-GeI_2	1T-$CdBr_2$	2.36	2.93	1.62	0.34	12	13

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	S_A	S_B
2H-MoS_2	1T-$CdBr_2$	2.22	2.22	1.50	0.60	19	12
2H-$MoSe_2$	1T-$CdBr_2$	1.95	1.95	2.13	0.24	19	13
2H-$MoTe_2$	1T-$CdBr_2$	1.50	1.50	2.69	0.13	4	3
2H-WS_2	1T-$CdBr_2$	2.20	2.20	1.85	0.27	19	12
1T-CdI_2	1T-$CdCl_2$	2.99	3.36	2.31	0.06	13	16
1T-$GeBr_2$	1T-$CdCl_2$	3.09	3.61	1.63	0.63	12	13
1T-GeI_2	1T-$CdCl_2$	2.64	3.05	2.52	0.20	13	16
1T-HfS_2	1T-$CdCl_2$	2.04	2.90	1.81	1.50	21	19
1T-$HfSe_2$	1T-$CdCl_2$	1.10	2.02	2.85	1.41	13	12
1T-$HgBr_2$	1T-$CdCl_2$	3.79	3.79	1.18	0.39	16	19
1T-$CdCl_2$	1T-$MgCl_2$	5.36	5.36	0.35	1.79	19	21
1T-OTl_2	1T-$CdCl_2$	1.51	1.51	3.46	0.39	16	13
1T-PbI_2	1T-$CdCl_2$	2.65	2.91	2.14	0.56	3	4
1T-$PdTe_2$	1T-$CdCl_2$	0.09	0.83	4.42	0.84	12	13
1T-PtO_2	1T-$CdCl_2$	3.50	3.95	0.82	1.03	19	12
1T-PtS_2	1T-$CdCl_2$	2.65	2.79	1.95	0.75	16	13
1T-$PtSe_2$	1T-$CdCl_2$	1.72	2.08	3.01	0.63	13	12
1T-$PtTe_2$	1T-$CdCl_2$	0.62	1.31	4.35	0.39	12	13
1T-SnS_2	1T-$CdCl_2$	2.48	2.75	1.41	1.46	13	12
1T-$SnSe_2$	1T-$CdCl_2$	1.44	1.81	2.25	1.67	1	1
1T-TiS_2	1T-$CdCl_2$	0.71	1.11	2.45	2.20	4	3
1T-ZnI_2	1T-$CdCl_2$	2.59	3.01	2.43	0.34	12	13
1T-ZrS_2	1T-$CdCl_2$	1.95	2.56	1.67	1.74	13	12
1T-$ZrSe_2$	1T-$CdCl_2$	0.94	1.68	2.72	1.70	13	12
2H-GeI_2	1T-$CdCl_2$	2.36	2.93	2.55	0.45	16	19
2H-MoS_2	1T-$CdCl_2$	2.22	2.22	2.43	0.70	19	13
2H-$MoSe_2$	1T-$CdCl_2$	1.95	1.95	3.06	0.35	13	9
2H-$MoTe_2$	1T-$CdCl_2$	1.50	1.50	3.62	0.24	16	13
2H-WS_2	1T-$CdCl_2$	2.20	2.20	2.78	0.38	19	13
2H-WSe_2	1T-$CdCl_2$	1.88	1.88	3.41	0.07	13	9
2H-WTe_2	1T-$CdCl_2$	1.30	1.30	3.95	0.11	16	13
1T-GeI_2	1T-CdI_2	2.64	3.05	0.22	0.14	1	1
1T-$HfSe_2$	1T-CdI_2	1.10	2.02	0.54	1.35	9	7
1T-CdI_2	1T-$MgBr_2$	2.99	3.36	1.60	1.27	13	16
1T-CdI_2	1T-$MgCl_2$	2.99	3.36	2.66	1.84	3	4
1T-CdI_2	1T-MgI_2	2.99	3.36	0.16	1.01	1	1
1T-OTl_2	1T-CdI_2	1.51	1.51	1.16	0.33	13	9
1T-$PdTe_2$	1T-CdI_2	0.09	0.83	2.11	0.78	19	16
1T-$PtSe_2$	1T-CdI_2	1.72	2.08	0.70	0.57	4	3
1T-$PtTe_2$	1T-CdI_2	0.62	1.31	2.04	0.33	19	16
1T-TiS_2	1T-CdI_2	0.71	1.11	0.14	2.14	19	12
1T-CdI_2	1T-$ZnBr_2$	2.99	3.36	1.26	0.36	7	9
1T-CdI_2	1T-$ZnCl_2$	2.99	3.36	2.24	0.90	9	13
1T-ZnI_2	1T-CdI_2	2.59	3.01	0.12	0.29	13	12
1T-$ZrSe_2$	1T-CdI_2	0.94	1.68	0.41	1.64	9	7
2H-GeI_2	1T-CdI_2	2.36	2.93	0.24	0.39	13	12
2H-MoS_2	1T-CdI_2	2.22	2.22	0.12	0.64	13	7
2H-$MoSe_2$	1T-CdI_2	1.95	1.95	0.75	0.29	7	4
2H-$MoTe_2$	1T-CdI_2	1.50	1.50	1.31	0.18	13	9
2H-WS_2	1T-CdI_2	2.20	2.20	0.48	0.32	13	7
2H-WSe_2	1T-CdI_2	1.88	1.88	1.10	0.01	7	4
2H-WTe_2	1T-CdI_2	1.30	1.30	1.64	0.05	13	9

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	S_A	S_B
1T-HfS_2	1T-$GeBr_2$	2.04	2.90	0.18	0.87	9	7
1T-$HfSe_2$	1T-$GeBr_2$	1.10	2.02	1.22	0.78	19	16
1T-$GeBr_2$	1T-$HgBr_2$	3.09	3.61	0.45	0.24	13	12
1T-$GeBr_2$	1T-$MgBr_2$	3.09	3.61	0.92	1.84	12	13
1T-$GeBr_2$	1T-$MgCl_2$	3.09	3.61	1.98	2.42	7	9
1T-$PdTe_2$	1T-$GeBr_2$	0.09	0.83	2.79	0.21	1	1
1T-PtS_2	1T-$GeBr_2$	2.65	2.79	0.32	0.12	4	3
1T-$SnSe_2$	1T-$GeBr_2$	1.44	1.81	0.62	1.03	13	12
1T-TiS_2	1T-$GeBr_2$	0.71	1.11	0.82	1.57	13	9
1T-$GeBr_2$	1T-$ZnBr_2$	3.09	3.61	0.58	0.94	16	19
1T-$GeBr_2$	1T-$ZnCl_2$	3.09	3.61	1.56	1.47	3	4
1T-ZrS_2	1T-$GeBr_2$	1.95	2.56	0.04	1.11	16	13
1T-$ZrSe_2$	1T-$GeBr_2$	0.94	1.68	1.09	1.07	19	16
2H-MoS_2	1T-$GeBr_2$	2.22	2.22	0.80	0.07	12	7
1T-$HfSe_2$	1T-GeI_2	1.10	2.02	0.33	1.21	4	3
1T-GeI_2	1T-$MgBr_2$	2.64	3.05	1.82	1.41	13	16
1T-GeI_2	1T-$MgCl_2$	2.64	3.05	2.87	1.98	3	4
1T-GeI_2	1T-MgI_2	2.64	3.05	0.38	1.15	1	1
1T-OTl_2	1T-GeI_2	1.51	1.51	0.94	0.19	13	9
1T-$PdTe_2$	1T-GeI_2	0.09	0.83	1.90	0.65	19	16
1T-$PtSe_2$	1T-GeI_2	1.72	2.08	0.49	0.43	4	3
1T-$PtTe_2$	1T-GeI_2	0.62	1.31	1.82	0.19	19	16
1T-GeI_2	1T-$ZnBr_2$	2.64	3.05	1.48	0.50	7	9
1T-GeI_2	1T-$ZnCl_2$	2.64	3.05	2.45	1.03	9	13
1T-$ZrSe_2$	1T-GeI_2	0.94	1.68	0.19	1.50	9	7
2H-GeI_2	1T-GeI_2	2.36	2.93	0.03	0.25	13	12
2H-$MoSe_2$	1T-GeI_2	1.95	1.95	0.53	0.15	7	4
2H-$MoTe_2$	1T-GeI_2	1.50	1.50	1.10	0.04	13	9
2H-WS_2	1T-GeI_2	2.20	2.20	0.26	0.18	13	7
1T-HfS_2	1T-$HgBr_2$	2.04	2.90	0.63	1.11	4	3
1T-HfS_2	1T-$MgBr_2$	2.04	2.90	1.10	2.72	13	12
1T-HfS_2	1T-$MgCl_2$	2.04	2.90	2.16	3.29	1	1
1T-HfS_2	1T-PtO_2	2.04	2.90	0.99	0.47	3	4
1T-HfS_2	1T-SnS_2	2.04	2.90	0.39	0.04	1	1
1T-$SnSe_2$	1T-HfS_2	1.44	1.81	0.44	0.16	12	13
1T-TiS_2	1T-HfS_2	0.71	1.11	0.64	0.70	19	16
1T-HfS_2	1T-$ZnBr_2$	2.04	2.90	0.76	1.81	13	12
1T-HfS_2	1T-$ZnCl_2$	2.04	2.90	1.74	2.34	1	1
1T-$ZrSe_2$	1T-HfS_2	0.94	1.68	0.91	0.20	12	13
1T-$HfSe_2$	1T-$HgBr_2$	1.10	2.02	1.68	1.02	9	7
1T-$HfSe_2$	1T-$MgBr_2$	1.10	2.02	2.15	2.62	13	12
1T-$HfSe_2$	1T-$MgCl_2$	1.10	2.02	3.20	3.19	12	13
1T-$HfSe_2$	1T-MgI_2	1.10	2.02	0.71	2.36	16	13
1T-$HfSe_2$	1T-PbI_2	1.10	2.02	0.71	0.85	13	9
1T-$HfSe_2$	1T-PtO_2	1.10	2.02	2.03	0.38	9	13
1T-$HfSe_2$	1T-PtS_2	1.10	2.02	0.90	0.66	19	21
1T-$HfSe_2$	1T-$ZnBr_2$	1.10	2.02	1.81	1.71	1	1
1T-$HfSe_2$	1T-$ZnCl_2$	1.10	2.02	2.78	2.25	12	13
1T-$HfSe_2$	1T-ZnI_2	1.10	2.02	0.42	1.07	19	16
1T-$HfSe_2$	2H-GeI_2	1.10	2.02	0.30	0.96	16	13
1T-$HfSe_2$	2H-MoS_2	1.10	2.02	0.42	0.71	9	13
1T-$HfSe_2$	2H-WS_2	1.10	2.02	0.07	1.03	9	13

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	S_A	S_B
1T-$HgBr_2$	1T-$MgBr_2$	3.79	3.79	0.47	1.60	13	16
1T-$HgBr_2$	1T-$MgCl_2$	3.79	3.79	1.53	2.18	3	4
1T-PbI_2	1T-$HgBr_2$	2.65	2.91	0.97	0.17	16	19
1T-$PdTe_2$	1T-$HgBr_2$	0.09	0.83	3.24	0.45	13	12
1T-PtS_2	1T-$HgBr_2$	2.65	2.79	0.77	0.36	13	9
1T-$PtSe_2$	1T-$HgBr_2$	1.72	2.08	1.84	0.23	4	3
1T-SnS_2	1T-$HgBr_2$	2.48	2.75	0.24	1.07	4	3
1T-$SnSe_2$	1T-$HgBr_2$	1.44	1.81	1.07	1.27	16	13
1T-TiS_2	1T-$HgBr_2$	0.71	1.11	1.27	1.81	19	12
1T-$HgBr_2$	1T-$ZnBr_2$	3.79	3.79	0.13	0.70	7	9
1T-$HgBr_2$	1T-$ZnCl_2$	3.79	3.79	1.11	1.23	3	4
1T-ZrS_2	1T-$HgBr_2$	1.95	2.56	0.49	1.35	4	3
1T-$ZrSe_2$	1T-$HgBr_2$	0.94	1.68	1.54	1.31	9	7
2H-GeI_2	1T-$HgBr_2$	2.36	2.93	1.37	0.05	1	1
2H-MoS_2	1T-$HgBr_2$	2.22	2.22	1.25	0.31	7	4
1T-$MgBr_2$	1T-$MgCl_2$	5.86	5.86	1.06	0.57	12	13
1T-MgI_2	1T-$MgBr_2$	4.16	4.64	1.44	0.26	16	19
1T-OTl_2	1T-$MgBr_2$	1.51	1.51	2.76	1.60	16	13
1T-PbI_2	1T-$MgBr_2$	2.65	2.91	1.44	1.77	9	13
1T-$PdTe_2$	1T-$MgBr_2$	0.09	0.83	3.71	2.05	12	13
1T-PtO_2	1T-$MgBr_2$	3.50	3.95	0.12	2.25	19	12
1T-PtS_2	1T-$MgBr_2$	2.65	2.79	1.24	1.96	16	13
1T-$PtSe_2$	1T-$MgBr_2$	1.72	2.08	2.31	1.84	13	12
1T-$PtTe_2$	1T-$MgBr_2$	0.62	1.31	3.64	1.60	12	13
1T-STl_2	1T-$MgBr_2$	1.89	2.07	3.01	0.97	12	13
1T-SnS_2	1T-$MgBr_2$	2.48	2.75	0.71	2.67	13	12
1T-$SnSe_2$	1T-$MgBr_2$	1.44	1.81	1.54	2.88	1	1
1T-TiS_2	1T-$MgBr_2$	0.71	1.11	1.74	3.41	4	3
1T-YbI_2	1T-$MgBr_2$	2.35	2.40	2.98	0.53	16	19
1T-$ZnBr_2$	1T-$MgBr_2$	4.61	4.73	0.34	0.91	13	12
1T-ZnI_2	1T-$MgBr_2$	2.59	3.01	1.72	1.56	12	13
1T-ZrS_2	1T-$MgBr_2$	1.95	2.56	0.96	2.95	13	12
1T-$ZrSe_2$	1T-$MgBr_2$	0.94	1.68	2.01	2.91	27	25
2H-GeI_2	1T-$MgBr_2$	2.36	2.93	1.84	1.66	16	19
2H-MoS_2	1T-$MgBr_2$	2.22	2.22	1.72	1.91	19	13
2H-$MoSe_2$	1T-$MgBr_2$	1.95	1.95	2.35	1.56	13	9
2H-$MoTe_2$	1T-$MgBr_2$	1.50	1.50	2.91	1.45	16	13
2H-WS_2	1T-$MgBr_2$	2.20	2.20	2.08	1.59	13	9
2H-WSe_2	1T-$MgBr_2$	1.88	1.88	2.70	1.28	4	3
2H-WTe_2	1T-$MgBr_2$	1.30	1.30	3.24	1.32	16	13
2H-$ZrCl_2$	1T-$MgBr_2$	1.55	2.29	3.59	0.73	4	3
1T-MgI_2	1T-$MgCl_2$	4.16	4.64	2.50	0.83	3	4
1T-OTl_2	1T-$MgCl_2$	1.51	1.51	3.81	2.17	13	12
1T-PbI_2	1T-$MgCl_2$	2.65	2.91	2.49	2.35	12	19
1T-$PdTe_2$	1T-$MgCl_2$	0.09	0.83	4.77	2.63	13	16
1T-PtO_2	1T-$MgCl_2$	3.50	3.95	1.17	2.82	4	3
1T-PtS_2	1T-$MgCl_2$	2.65	2.79	2.30	2.54	13	12
1T-$PtSe_2$	1T-$MgCl_2$	1.72	2.08	3.36	2.41	1	1
1T-$PtTe_2$	1T-$MgCl_2$	0.62	1.31	4.70	2.17	13	16
1T-STl_2	1T-$MgCl_2$	1.89	2.07	4.06	1.54	13	16
1T-SnS_2	1T-$MgCl_2$	2.48	2.75	1.76	3.24	1	1
1T-$SnSe_2$	1T-$MgCl_2$	1.44	1.81	2.60	3.45	12	13

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	S_A	S_B
1T-TiS_2	1T-$MgCl_2$	0.71	1.11	2.80	3.99	19	16
1T-YbI_2	1T-$MgCl_2$	2.35	2.40	4.03	1.11	3	4
1T-$ZnBr_2$	1T-$MgCl_2$	4.61	4.73	1.40	1.48	12	13
1T-$ZnCl_2$	1T-$MgCl_2$	6.12	6.12	0.42	0.95	1	1
1T-ZnI_2	1T-$MgCl_2$	2.59	3.01	2.78	2.13	7	9
1T-ZrS_2	1T-$MgCl_2$	1.95	2.56	2.02	3.53	1	1
1T-$ZrSe_2$	1T-$MgCl_2$	0.94	1.68	3.07	3.49	12	13
2H-GeI_2	1T-$MgCl_2$	2.36	2.93	2.90	2.23	3	4
2H-MoS_2	1T-$MgCl_2$	2.22	2.22	2.78	2.49	4	3
2H-$MoSe_2$	1T-$MgCl_2$	1.95	1.95	3.41	2.14	9	7
2H-$MoTe_2$	1T-$MgCl_2$	1.50	1.50	3.97	2.02	13	12
2H-WS_2	1T-$MgCl_2$	2.20	2.20	3.13	2.16	4	3
2H-WSe_2	1T-$MgCl_2$	1.88	1.88	3.76	1.86	16	13
2H-WTe_2	1T-$MgCl_2$	1.30	1.30	4.30	1.89	13	12
2H-$ZrCl_2$	1T-$MgCl_2$	1.55	2.29	4.64	1.30	19	16
1T-OTl_2	1T-MgI_2	1.51	1.51	1.32	1.34	13	9
1T-$PdTe_2$	1T-MgI_2	0.09	0.83	2.27	1.80	13	12
1T-$PtSe_2$	1T-MgI_2	1.72	2.08	0.87	1.58	9	7
1T-$PtTe_2$	1T-MgI_2	0.62	1.31	2.20	1.34	13	12
1T-STl_2	1T-MgI_2	1.89	2.07	1.57	0.71	13	12
1T-$SnSe_2$	1T-MgI_2	1.44	1.81	0.10	2.62	16	13
1T-TiS_2	1T-MgI_2	0.71	1.11	0.30	3.15	19	13
1T-YbI_2	1T-MgI_2	2.35	2.40	1.54	0.27	1	1
1T-ZnI_2	1T-MgI_2	2.59	3.01	0.28	1.30	13	12
1T-$ZrSe_2$	1T-MgI_2	0.94	1.68	0.57	2.65	16	13
2H-GeI_2	1T-MgI_2	2.36	2.93	0.40	1.40	1	1
2H-MoS_2	1T-MgI_2	2.22	2.22	0.28	1.66	7	4
2H-$MoSe_2$	1T-MgI_2	1.95	1.95	0.91	1.30	19	12
2H-$MoTe_2$	1T-MgI_2	1.50	1.50	1.47	1.19	13	9
2H-WS_2	1T-MgI_2	2.20	2.20	0.64	1.33	7	4
2H-WSe_2	1T-MgI_2	1.88	1.88	1.26	1.03	19	12
2H-WTe_2	1T-MgI_2	1.30	1.30	1.80	1.06	13	9
2H-$ZrCl_2$	1T-MgI_2	1.55	2.29	2.14	0.47	19	12
1T-$PdTe_2$	1T-OTl_2	0.09	0.83	0.96	0.46	7	9
1T-OTl_2	1T-$ZnBr_2$	1.51	1.51	2.42	0.69	21	19
1T-OTl_2	1T-$ZnCl_2$	1.51	1.51	3.39	1.22	1	1
1T-OTl_2	1T-ZnI_2	1.51	1.51	1.04	0.04	4	3
1T-OTl_2	2H-$MoSe_2$	1.51	1.51	0.41	0.04	16	19
1T-OTl_2	2H-WS_2	1.51	1.51	0.68	0.01	7	9
1T-OTl_2	2H-WSe_2	1.51	1.51	0.06	0.31	16	19
1T-$PdTe_2$	1T-PbI_2	0.09	0.83	2.28	0.28	4	3
1T-$PtSe_2$	1T-PbI_2	1.72	2.08	0.87	0.06	19	13
1T-$SnSe_2$	1T-PbI_2	1.44	1.81	0.10	1.10	13	9
1T-TiS_2	1T-PbI_2	0.71	1.11	0.30	1.64	7	4
1T-PbI_2	1T-$ZnBr_2$	2.65	2.91	1.10	0.87	9	13
1T-PbI_2	1T-$ZnCl_2$	2.65	2.91	2.08	1.40	12	19
1T-$ZrSe_2$	1T-PbI_2	0.94	1.68	0.57	1.14	13	9
2H-MoS_2	1T-PbI_2	2.22	2.22	0.28	0.14	19	9
1T-$PdTe_2$	1T-PtS_2	0.09	0.83	2.47	0.09	7	9
1T-$PdTe_2$	1T-$PtSe_2$	0.09	0.83	1.41	0.22	16	19
1T-$PdTe_2$	1T-$PtTe_2$	0.09	0.83	0.07	0.46	1	1
1T-$PdTe_2$	1T-STl_2	0.09	0.83	0.71	1.09	1	1

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	S_A	S_B
1T-$PdTe_2$	1T-YbI_2	0.09	0.83	0.74	1.52	13	12
1T-$PdTe_2$	1T-$ZnBr_2$	0.09	0.83	3.37	1.15	12	13
1T-$PdTe_2$	1T-$ZnCl_2$	0.09	0.83	4.35	1.68	7	9
1T-$PdTe_2$	1T-ZnI_2	0.09	0.83	1.99	0.50	13	12
1T-$PdTe_2$	2H-GeI_2	0.09	0.83	1.87	0.40	13	12
1T-$PdTe_2$	2H-MoS_2	0.09	0.83	1.99	0.14	12	19
1T-$PdTe_2$	2H-$MoSe_2$	0.09	0.83	1.36	0.49	9	13
1T-$PdTe_2$	2H-$MoTe_2$	0.09	0.83	0.80	0.60	3	4
1T-$PdTe_2$	2H-WS_2	0.09	0.83	1.64	0.47	12	19
1T-$PdTe_2$	2H-WSe_2	0.09	0.83	1.01	0.77	9	13
1T-$PdTe_2$	2H-WTe_2	0.09	0.83	0.47	0.74	3	4
1T-$PdTe_2$	2H-$ZrCl_2$	0.09	0.83	0.13	1.33	9	13
1T-SnS_2	1T-PtO_2	2.48	2.75	0.59	0.43	9	13
1T-$SnSe_2$	1T-PtO_2	1.44	1.81	1.42	0.63	12	19
1T-TiS_2	1T-PtO_2	0.71	1.11	1.62	1.17	13	16
1T-PtO_2	1T-$ZnCl_2$	3.50	3.95	0.75	1.87	4	3
1T-ZrS_2	1T-PtO_2	1.95	2.56	0.84	0.71	9	13
1T-$ZrSe_2$	1T-PtO_2	0.94	1.68	1.89	0.67	9	13
1T-$SnSe_2$	1T-PtS_2	1.44	1.81	0.30	0.91	16	19
1T-TiS_2	1T-PtS_2	0.71	1.11	0.50	1.45	13	12
1T-PtS_2	1T-$ZnBr_2$	2.65	2.79	0.90	1.06	21	19
1T-PtS_2	1T-$ZnCl_2$	2.65	2.79	1.88	1.59	1	1
1T-$ZrSe_2$	1T-PtS_2	0.94	1.68	0.77	0.95	16	19
1T-$PtSe_2$	1T-$ZnBr_2$	1.72	2.08	1.97	0.93	1	1
1T-$PtSe_2$	1T-$ZnCl_2$	1.72	2.08	2.94	1.46	12	13
1T-$PtSe_2$	1T-ZnI_2	1.72	2.08	0.58	0.28	16	13
1T-$PtSe_2$	2H-GeI_2	1.72	2.08	0.46	0.18	9	7
1T-$PtSe_2$	2H-WS_2	1.72	2.08	0.23	0.25	3	4
1T-$PtTe_2$	1T-STl_2	0.62	1.31	0.63	0.63	1	1
1T-$PtTe_2$	1T-YbI_2	0.62	1.31	0.66	1.06	13	12
1T-$PtTe_2$	1T-$ZnBr_2$	0.62	1.31	3.30	0.69	12	13
1T-$PtTe_2$	1T-$ZnCl_2$	0.62	1.31	4.28	1.22	7	9
1T-$PtTe_2$	1T-ZnI_2	0.62	1.31	1.92	0.04	13	12
1T-$PtTe_2$	2H-$MoSe_2$	0.62	1.31	1.29	0.03	9	13
1T-$PtTe_2$	2H-$MoTe_2$	0.62	1.31	0.73	0.15	3	4
1T-$PtTe_2$	2H-WS_2	0.62	1.31	1.56	0.01	12	19
1T-$PtTe_2$	2H-WSe_2	0.62	1.31	0.94	0.31	9	13
1T-$PtTe_2$	2H-WTe_2	0.62	1.31	0.40	0.28	3	4
1T-$PtTe_2$	2H-$ZrCl_2$	0.62	1.31	0.05	0.87	9	13
1T-STl_2	1T-YbI_2	1.89	2.07	0.03	0.44	13	12
1T-STl_2	1T-$ZnBr_2$	1.89	2.07	2.67	0.06	16	19
1T-STl_2	1T-$ZnCl_2$	1.89	2.07	3.64	0.59	7	9
2H-WTe_2	1T-STl_2	1.30	1.30	0.24	0.35	4	3
1T-$SnSe_2$	1T-SnS_2	1.44	1.81	0.83	0.21	12	13
1T-TiS_2	1T-SnS_2	0.71	1.11	1.03	0.74	19	16
1T-SnS_2	1T-$ZnBr_2$	2.48	2.75	0.37	1.76	13	12
1T-SnS_2	1T-$ZnCl_2$	2.48	2.75	1.34	2.30	12	13
1T-ZrS_2	1T-SnS_2	1.95	2.56	0.25	0.28	1	1
1T-$ZrSe_2$	1T-SnS_2	0.94	1.68	1.30	0.24	12	13
1T-TiS_2	1T-$SnSe_2$	0.71	1.11	0.20	0.53	9	7
1T-$SnSe_2$	1T-$ZnBr_2$	1.44	1.81	1.20	1.97	1	1
1T-$SnSe_2$	1T-$ZnCl_2$	1.44	1.81	2.18	2.50	16	19

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_g	E_d	ΔE_v	ΔE_c	S_A	S_B
1T-$ZrSe_2$	1T-$SnSe_2$	0.94	1.68	0.47	0.03	1	1
1T-TiS_2	1T-$ZnBr_2$	0.71	1.11	1.40	2.50	16	13
1T-TiS_2	1T-$ZnCl_2$	0.71	1.11	2.38	3.04	13	12
1T-TiS_2	1T-ZnI_2	0.71	1.11	0.02	1.86	13	9
1T-TiS_2	1T-ZrS_2	0.71	1.11	0.78	0.46	19	16
1T-TiS_2	2H-MoS_2	0.71	1.11	0.02	1.50	16	19
1T-YbI_2	1T-$ZnCl_2$	2.35	2.40	3.61	0.16	3	4
2H-WTe_2	1T-YbI_2	1.30	1.30	0.27	0.78	13	9
2H-$ZrCl_2$	1T-YbI_2	1.55	2.29	0.61	0.20	19	12
1T-$ZnBr_2$	1T-$ZnCl_2$	4.61	4.73	0.98	0.53	12	13
1T-ZnI_2	1T-$ZnBr_2$	2.59	3.01	1.38	0.65	16	19
1T-ZrS_2	1T-$ZnBr_2$	1.95	2.56	0.62	2.04	13	12
1T-$ZrSe_2$	1T-$ZnBr_2$	0.94	1.68	1.67	2.00	1	1
2H-GeI_2	1T-$ZnBr_2$	2.36	2.93	1.50	0.75	13	16
2H-MoS_2	1T-$ZnBr_2$	2.22	2.22	1.38	1.01	13	9
2H-$MoSe_2$	1T-$ZnBr_2$	1.95	1.95	2.01	0.65	4	3
2H-$MoTe_2$	1T-$ZnBr_2$	1.50	1.50	2.58	0.54	19	16
2H-WS_2	1T-$ZnBr_2$	2.20	2.20	1.74	0.68	13	9
2H-WSe_2	1T-$ZnBr_2$	1.88	1.88	2.36	0.38	4	3
2H-WTe_2	1T-$ZnBr_2$	1.30	1.30	2.90	0.41	19	16
1T-ZnI_2	1T-$ZnCl_2$	2.59	3.01	2.36	1.18	3	4
1T-ZrS_2	1T-$ZnCl_2$	1.95	2.56	1.60	2.58	12	13
1T-$ZrSe_2$	1T-$ZnCl_2$	0.94	1.68	2.65	2.54	12	13
2H-GeI_2	1T-$ZnCl_2$	2.36	2.93	2.48	1.28	3	4
2H-MoS_2	1T-$ZnCl_2$	2.22	2.22	2.36	1.54	4	3
2H-$MoSe_2$	1T-$ZnCl_2$	1.95	1.95	2.99	1.19	16	13
2H-$MoTe_2$	1T-$ZnCl_2$	1.50	1.50	3.55	1.08	1	1
2H-WS_2	1T-$ZnCl_2$	2.20	2.20	2.71	1.21	4	3
2H-WSe_2	1T-$ZnCl_2$	1.88	1.88	3.34	0.91	16	13
2H-WTe_2	1T-$ZnCl_2$	1.30	1.30	3.88	0.94	1	1
2H-$ZrCl_2$	1T-$ZnCl_2$	1.55	2.29	4.22	0.35	13	12
1T-$ZrSe_2$	1T-ZnI_2	0.94	1.68	0.29	1.36	19	16
2H-GeI_2	1T-ZnI_2	2.36	2.93	0.12	0.10	1	1
2H-MoS_2	1T-ZnI_2	2.22	2.22	0.00	0.36	12	7
2H-$MoSe_2$	1T-ZnI_2	1.95	1.95	0.63	0.01	19	12
2H-WS_2	1T-ZnI_2	2.20	2.20	0.36	0.03	12	7
1T-$ZrSe_2$	2H-GeI_2	0.94	1.68	0.16	1.26	16	13
1T-$ZrSe_2$	2H-MoS_2	0.94	1.68	0.29	1.00	9	13
2H-$MoTe_2$	2H-WSe_2	1.50	1.50	0.21	0.17	19	21
2H-WTe_2	2H-WSe_2	1.30	1.30	0.54	0.03	16	19

Table 6. Full table of all type-III vdWHs Here we report the vdWH composition (ML-A and ML-B), the VBM, E_v, the conduction band minimum(CBM), E_c, of ML A and B. S_A and S_B are the number of primitive cells of ML A and B in the superstructure.

ML-A	ML-B	E_v(A)	E_c(A)	E_v(B)	E_c(B)	S_A	S_B
1T-CdI_2	1T-NiO_2	-6.56	-3.57	-9.97	-6.68	3	7
1T-GeI_2	1T-NiO_2	-6.34	-3.71	-9.97	-6.68	3	7
1T-$PdTe_2$	1T-HfS_2	-4.45	-4.35	-7.06	-5.01	13	16
1T-$PtTe_2$	1T-HfS_2	-4.52	-3.90	-7.06	-5.01	13	16
2H-WTe_2	1T-HfS_2	-4.92	-3.62	-7.06	-5.01	13	12
2H-$ZrCl_2$	1T-HfS_2	-4.58	-3.03	-7.06	-5.01	19	16
1T-$HfSe_2$	1T-NiO_2	-6.01	-4.92	-9.97	-6.68	7	13
1T-$PdTe_2$	1T-$HfSe_2$	-4.45	-4.35	-6.01	-4.92	12	13
1T-$PtTe_2$	1T-$HfSe_2$	-4.52	-3.90	-6.01	-4.92	12	13
2H-WTe_2	1T-$HfSe_2$	-4.92	-3.62	-6.01	-4.92	19	16
2H-$ZrCl_2$	1T-$HfSe_2$	-4.58	-3.03	-6.01	-4.92	9	7
1T-OTl_2	1T-NiO_2	-5.40	-3.90	-9.97	-6.68	12	19
1T-$PdTe_2$	1T-NiO_2	-4.45	-4.35	-9.97	-6.68	9	19
1T-$PtSe_2$	1T-NiO_2	-5.85	-4.14	-9.97	-6.68	4	7
1T-$PtTe_2$	1T-NiO_2	-4.52	-3.90	-9.97	-6.68	9	19
1T-STl_2	1T-NiO_2	-5.15	-3.27	-9.97	-6.68	9	19
1T-$SnSe_2$	1T-NiO_2	-6.62	-5.18	-9.97	-6.68	7	13
1T-TiS_2	1T-NiO_2	-6.42	-5.71	-9.97	-6.68	13	19
1T-YbI_2	1T-NiO_2	-5.19	-2.83	-9.97	-6.68	3	7
1T-ZnI_2	1T-NiO_2	-6.44	-3.85	-9.97	-6.68	4	9
1T-$ZrSe_2$	1T-NiO_2	-6.15	-5.21	-9.97	-6.68	7	13
2H-GeI_2	1T-NiO_2	-6.32	-3.96	-9.97	-6.68	3	7
2H-MoS_2	1T-NiO_2	-6.44	-4.21	-9.97	-6.68	3	4
2H-$MoSe_2$	1T-NiO_2	-5.81	-3.86	-9.97	-6.68	9	13
2H-$MoTe_2$	1T-NiO_2	-5.25	-3.75	-9.97	-6.68	12	19
2H-WS_2	1T-NiO_2	-6.08	-3.89	-9.97	-6.68	3	4
2H-WSe_2	1T-NiO_2	-5.46	-3.58	-9.97	-6.68	9	13
2H-WTe_2	1T-NiO_2	-4.92	-3.62	-9.97	-6.68	12	19
2H-$ZrCl_2$	1T-NiO_2	-4.58	-3.03	-9.97	-6.68	9	13
1T-OTl_2	1T-TiS_2	-5.40	-3.90	-6.42	-5.71	12	13
1T-$PdTe_2$	1T-PtO_2	-4.45	-4.35	-8.04	-4.54	12	19
1T-$PdTe_2$	1T-SnS_2	-4.45	-4.35	-7.45	-4.97	16	19
1T-$PdTe_2$	1T-$SnSe_2$	-4.45	-4.35	-6.62	-5.18	12	13
1T-$PdTe_2$	1T-TiS_2	-4.45	-4.35	-6.42	-5.71	3	4
1T-$PdTe_2$	1T-ZrS_2	-4.45	-4.35	-7.20	-5.25	16	19
1T-$PdTe_2$	1T-$ZrSe_2$	-4.45	-4.35	-6.15	-5.21	12	13
1T-$PtTe_2$	1T-PtO_2	-4.52	-3.90	-8.04	-4.54	7	12
1T-$PtTe_2$	1T-SnS_2	-4.52	-3.90	-7.45	-4.97	16	19
1T-$PtTe_2$	1T-$SnSe_2$	-4.52	-3.90	-6.62	-5.18	12	13
1T-$PtTe_2$	1T-TiS_2	-4.52	-3.90	-6.42	-5.71	3	4
1T-$PtTe_2$	1T-ZrS_2	-4.52	-3.90	-7.20	-5.25	16	19
1T-$PtTe_2$	1T-$ZrSe_2$	-4.52	-3.90	-6.15	-5.21	12	13
1T-STl_2	1T-$SnSe_2$	-5.15	-3.27	-6.62	-5.18	12	13
1T-STl_2	1T-TiS_2	-5.15	-3.27	-6.42	-5.71	9	13
1T-STl_2	1T-ZrS_2	-5.15	-3.27	-7.20	-5.25	13	16
1T-STl_2	1T-$ZrSe_2$	-5.15	-3.27	-6.15	-5.21	16	19
2H-WTe_2	1T-SnS_2	-4.92	-3.62	-7.45	-4.97	13	12
2H-$ZrCl_2$	1T-SnS_2	-4.58	-3.03	-7.45	-4.97	19	16
2H-WTe_2	1T-$SnSe_2$	-4.92	-3.62	-6.62	-5.18	16	13

.....

table continued

ML-A	ML-B	E_v(A)	E_c(A)	E_v(B)	E_c(B)	S_A	S_B
2H-$ZrCl_2$	1T-$SnSe_2$	-4.58	-3.03	-6.62	-5.18	4	3
1T-YbI_2	1T-TiS_2	-5.19	-2.83	-6.42	-5.71	13	19
2H-$MoTe_2$	1T-TiS_2	-5.25	-3.75	-6.42	-5.71	12	13
2H-WSe_2	1T-TiS_2	-5.46	-3.58	-6.42	-5.71	13	12
2H-WTe_2	1T-TiS_2	-4.92	-3.62	-6.42	-5.71	12	13
2H-$ZrCl_2$	1T-TiS_2	-4.58	-3.03	-6.42	-5.71	1	1
1T-YbI_2	1T-ZrS_2	-5.19	-2.83	-7.20	-5.25	3	4
1T-YbI_2	1T-$ZrSe_2$	-5.19	-2.83	-6.15	-5.21	13	16
2H-$MoTe_2$	1T-ZrS_2	-5.25	-3.75	-7.20	-5.25	13	12
2H-WTe_2	1T-ZrS_2	-4.92	-3.62	-7.20	-5.25	13	12
2H-$ZrCl_2$	1T-ZrS_2	-4.58	-3.03	-7.20	-5.25	19	16
2H-WTe_2	1T-$ZrSe_2$	-4.92	-3.62	-6.15	-5.21	19	16
2H-$ZrCl_2$	1T-$ZrSe_2$	-4.58	-3.03	-6.15	-5.21	9	7

References

1. Mounet, N. *et al.* Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds. *Nature Nanotechnology* **13**, 246–252 (2018). URL http://dx.doi.org/10.1038/s41565-017-0035-5. 1611.05234.

2. Tkatchenko, A. & Scheffler, M. Accurate molecular van der Waals interactions from ground-state electron density and free-atom reference data. *Physical Review Letters* **102**, 6–9 (2009).

3. Lee, K., Murray, É., Kong, L., Lundqvist, B. & Langreth, D. Higher-accuracy van der waals density functional. *Phys. Rev. B* **82**, 081101 (2010).

4. Sabatini, R., Gorni, T. & Gironcoli, S. D. Nonlocal van der Waals density functional made simple and efficient. *Phys. Rev. B* **87**, 041108(R) (2013).

5. Haastrup, S. *et al.* The Computational 2D Materials Database: High-throughput modeling and discovery of atomically thin crystals. *2D Materials* **5** (2018).