


ARTICLE

Uncovering and tailoring hidden Rashba spin-orbit splitting in centrosymmetric crystals

Linding Yuan ^{1,2}, Qihang Liu^{3,4}, Xiuwen Zhang⁵, Jun-Wei Luo^{1,2,6}, Shu-Shen Li^{1,2,6} & Alex Zunger³

N e ca effec a d e ec g e e ab ed b
e a e c d a e e e ce f ce a e-
e e a e a a c effec . E a e
c de effec ed ca ed e ab e ce f 6e e
(-ce e c e) c a e D e e a effec¹,
e Ra ba effec², ca ac 6 -c a ec e³, 6a e
a a a d de 6a 6e effec⁴, a d 6a e Ha effec
-d e a (2D) a ed c e⁵. A g ce -
e c e a e ed ac e e effec , e e a a ge
c a f e e g ba c a e (GCS) deed
ce e c, b e c f d 6 d a ec -
ce e c ca ec e (LSS) (-ce -
e c e g). T e e “ dde effec ” efe e

ce Γ_1 Γ_2 c c d, c f e c f e d²⁰, e
 Γ_3 g a e e e Γ_4 f e R-1 Γ_5 f a R-2
 Γ_6 ("R-1 f R-2") b Γ_7 e f i - c e c a c a-
 R-2 c d a d a c Γ_8 a e e c c f i e d
 a b e a e g b a Γ_9 e .
 A e a e f R-2 c d BaN S₂¹⁰, c a f i g e-
 c d a e d N (II) c e c Γ_{10} f c e e d 2D a e f
 edge- a Γ_{11} a e a da e d a a d c a e e
 e a g a e , a c e Γ_{12} P4/ . C d c Γ_{13} a d
 c e b e a e e ^{22,23} d c a e a a e a c
 Pa Pa a a g e . O Γ_{14} DFT+U c a c a (= 3 eV, J=0.95
 eV) a e d c a - e e a e a -f e a a g e c a e
 c a N e f $0.7 \mu_B$ f a b . ($0.6 \mu_B$ f a
 a e) e e e a -f e a a g e c a e Γ_{15}
 a b e a e - a g e c d e b $43 \text{ eV} (f.)^{-1}$
 f a b a d 28 eV(f.)⁻¹ f a e . T e e DFT+U
 c a c a a d e e d a BaN S₂ d e g e a a e
 a f a a a g e c a -f e a a g e c a
 c e a g e e d - Γ_{16} e f $2 \sim 3 \text{ eV}$. G Γ_{17} e d f f i c

f e a g e e e - Γ_{18} a e e + f a e a d
 e e e a (c d c Γ_{19} a d c e b) b e Γ_{20} ^{22,23}
 f e a c Pa Pa a a g e , e e e e e
 a d a - a g e c a e f BaN S₂ a Γ_{21} d e e c e a
 c c a f a g e c d e . O e a e d a c e c -
 a a d e a c d a c e e - a g e c Ge e a
 G a d e A a (GGA) c a c a a g e e e
 e a e d e , 1%^{10,22}. I e - a g e c d e ,
 BaN S₂ e e b Γ_{22} e a d e - e e a

ec β (eaf e, e ed β -Ra ba ba d). We eef e
 de f e $\delta E_{AB}(k)$ a a c e e ce f e R-2 effec
 a fied b a Ra ba a e $\alpha_R(R2) = 0.24 V$. T e a ed
 ec c fie d f e add / b ac e R-1 $\delta E_{AB}(k)$ / f
 e R-2 $\delta E_{AB}(k)$ f e α - a d β -Ra ba ba d ,
 e ec 6e , a e $\bar{X} - \bar{M}$ d ec . F e 3a e
 c e d Ra ba a e $\alpha_R = \delta E_{AB}(k - \bar{X}) / 2(k - \bar{X})$,
 c e b a ea e $E_c : \alpha_R$ f e α -Ra ba ba d
 cea e a d e β -Ra ba ba d cea e a e f e a e

ea₁ fied de e de ce f e ba d a $\bar{X} - \bar{M}$ d₁ec
 (ee Fg. 3a). S c a fied de e de ce f α_R c fi₁ aga
 a e R-2 α_R e R-1
 e b₁ea $\bar{X} - \bar{M}$ d₁ec $\alpha_R(R2) = 0$ e ab e ce f a e e₁ a fied.
 U a ca f e ec₁ c fied, e de ca ed a₁gef c
 f e $\bar{X} - \bar{M}$ ba d bec e g₁ad a e₁ega ed e f
 e₁ - a₁ e₁ ec₁ a a e₁ f S a₁ effec₁ 25.
 S b e e₁, Fg. 3c a e a ed fied a fie
 b a a e DWS (E . (1)) f e - c e f b
 b₁a c e f₁ 14% >80% a e ag₁ de f E_e c₁ea e
 f₁ 0 50 V⁻¹. H e₁e₁, D(φ_k) ba₁e c a ged
 ce E_e >50 V⁻¹ (a₁ a₁ fied). I e₁ a
 DWS f e c₁ e d₁ - d c e
 b a a a₁ e e a e a ed e ec₁ c fied. I
 a₁ f₁ a₁ d₁ ea₁ e e e a e ec₁ c d e fied
 ac₁ e e ba d bec e c e a ed a e₁ a₁gef c -
 c a g₁ e₁ega a g₁ e ec₁ e₁ e R-2
 effec₁ e₁ g₁ e a ed D(φ) acc₁ d₁ g₁
 E . (3). T e a d a fica f D(φ_k) b e a ed e ec₁ c
 fied e a a e (a) a d₁ e f α_R f₁ e ba d
 a $\bar{X} - \bar{M}$ d₁ec a d e e e a ce e f e
 a₁gef c e₁ega a e₁ a e c₁ea e f e a
 e ec₁ c d e fied.

W e₁, E_e, eac e₁ 25 V⁻¹, α_R f b₁ - a d -
 e e₁ g₁ d₁ be bec e ea₁ fied de e de b₁ a e f
 e g₁, c a a₁ fied de e de ce a a a g₁
 $\bar{X} - \bar{M}$ d₁ec . Fg. 3c a e e e f D(φ_k) f
 e $\bar{X} - \bar{M}$ ba d E_e, e₁e₁, ba₁e d fied b e
 e e₁ a fied, d ca g₁ e a e e a f ca ed e
 f e₁ e₁ - a₁ e₁ ec₁ . T e ea₁ c a g₁ f α_R a g₁
 $\bar{X} - \bar{M}$ d₁ec a Fg. 3a a₁ e e e e f₁ e
 e e₁ a fied d ced a e₁, .e., E . (3) e c a ed Ra ba
 a₁ e e₁ f e R-2 e ec₁ c fied. T e c a ed Ra ba
 de f e R-1 g₁ (E . (3)), d ca g₁ a fied
 e e ca g₁ e f₁ b R-1 a d R-2 effec₁ b₁ e .
 S ec fica₁ e effec₁ e ec₁ c fied a₁ e e e₁ R-1
 a d₁ R-2 Ra ba effec₁ a e₁ f e a ed
 e e₁ a e ec₁ c fied e e₁ a ca e ec₁ c fied
 g₁ a g₁ f₁ e d e f e d d a ca ec₁,
 e g₁ ed b e a₁gef c a d e c₁ e d g₁
 ec₁ .

We a a f g₁ e e ca f a e₁ a -
 a e ed R-1 e a e, e α -S Te₆ a₁ e α -GeTe (a
 a da d fe₁ e ec₁ c b₁ R-1 c d ed c ed 2013²⁶
 a d e e₁ e a c fi₁ ed 2016^{27,28}), e₁ e ca
 de f e₁ e₁ - a₁ e₁ ec₁ a d e c₁ e d g₁
 a₁gef c bec e e₁ega ed d e e ac₁ f e₁
 e₁ e₁ b ed a e (de a ee S e e a₁
 N e 1). Acc₁ d₁ g₁ e fied de de c₁ bed b E . (3),
 c a₁gef c e₁ega g₁ e a e d a d e fied fe b
 ba d a e a d g₁ e₁ a fi e Ra ba
 a₁ a f R-2 g₁ BaNS₂. A d ac g₁ e
 T e a f₁ S a g₁ [111] d₁ec₁, e α -GeTe de g₁ a
 a e a₁ f₁ - ce₁ e₁ c₁ b ed a a e
 ce₁ e₁ c₁ c a a e. We de a e a e
 ce₁ e₁ c₁ c a a e a₁gef c a e e₁ e d -
 c b ed a g₁ e₁ - a₁ e₁ ec₁, ead g₁ a e f ec
 c e a f e ca d e fied a d g₁ Ra ba
 effec₁ e ce₁ e₁ c₁ c a a e acc₁ d₁ g₁ E . (3).

Design principles for increasing the strength of the R-2 effect.
 R-2 a e a₁ a₁ e d e b a₁ g₁ g₁ ba g₁ e₁ 103.84.10c

Fg. 2b DWS $D\left(\frac{\downarrow}{\alpha/\beta}(A, k_{\bar{X}-\bar{\Gamma}})\right) = D\left(\frac{\downarrow}{\alpha/\beta}(B, k_{\bar{X}-\bar{\Gamma}})\right) =$
 2% f₁ - d c e f b A a d B b₁a c e .
 S a₁, e a₁gef c f e - c e f e
 b₁a c A 43% c fi ed, a d a f b₁a c B 57% c fi ed
 ec₁ α DWS $D\left(\frac{\uparrow}{\alpha/\beta}(A, k_{\bar{X}-\bar{\Gamma}})\right) = D\left(\frac{\uparrow}{\alpha/\beta}(B, k_{\bar{X}-\bar{\Gamma}})\right)$
 14% f₁ - c e . T e a₁gef c f e
 $\bar{X} - \bar{\Gamma}$ ba d a e e e a de ca ed g₁ b g₁ -
 a₁ e₁ ec₁ α a d β . S c a₁gef c de ca a
 a a e ad a c e ec e a f e de g₁ g₁
 ca e₁ a d e fied α b a β , e eac
 ca d e e g₁ ed b a₁gef c a de g₁ e₁ e
 e₁ a₁ge Ra ba a₁ e e₁ α_R acc₁ d₁ g₁ E . (3).

Uni cation of R-1 and R-2 into a single theoretical framework.
 T e "R-1 R-2" e₁ (Fg. 3a) g₁ e a
 e a g₁ a e e₁ a e ec₁ c fied E_e a R-2 e , e
 e ec₁ c fied E(r) ac g₁ e ec₁ a e₁ f E_e a d
 e e₁ a ca d e (d) e ec₁ c fied E_d(r),

$$E(r) = E_d(r) + E_e \quad (4)$$

T , b R-1 a d R-2 g₁ a₁ge a c
 f da e a ce be g₁ e d e e ec₁ c fied f e ca
 ec₁ a e₁ a f₁ e g₁ ba c₁ a a e₁ e₁ e. S c
 ca d e e ec₁ c fied "g₁" d d a ca ec₁ .
 T e f da e a d f e ce be ee R-1 a d R-2 effec₁ a
 R-2 e g₁ d de b e g₁ a g₁ e e₁ ba d
 a₁ g₁ f₁ g₁ - a₁ e₁ ec₁, e₁ea e R-1
 ca e c g₁ a f₁ b d de b e g₁ ba g₁ a e₁ .
 Fg. 1e a a e a ed e ec₁ c fied f e
 de ge e₁ac f e ba d a $\bar{X} - \bar{\Gamma}$ d₁ec₁ a d a e α_R
 ea₁ f₁ e₁ a E_e = 0 a a a , E_e = 10 V⁻¹
 a a d d a₁ge a e. T be a₁ g₁ c a e

a d ec abe Ge - a e ec a e
e e . De R-2 a e a e a ge
dde ga d e ce ca a a ca
be efi f add a de c e :

28. Kye a , J. e a. D e a g g b a d face Ra ba effec
fe e e ec c α -GeTe. *B* 94, 205111 (2016).
29. T a , H. e a. C ea a f b c a g e ec
d b a - ag e c e a /B₂O₃ e face. 8, 5564 (2018).
30. Ca , R. & Pa e , M. U fied a ac f ec a d a c a d
de f c a e *L* . 55, 2471–2474 (1985).
31. G e E. K., D e e R. M. De f c a e (S e Sc e ce &
B e Med a, 2013).
32. S a , L. J. & Sc e , M. De f c a e f e e e g a
. *L* . 51, 1888–1891 (1983).
33. Pe de , J. P., B e , K. & E e f, M. Ge e a ed g a d e a a
ade e *L* . 77, 3865–3868 (1996).
34. K e e, G. & F e , J. Effic e c f ab- a e e g c a c a f
e a a d e c d c g a a e- a e ba e. C
6, 15–50 (1996).
35. M , H. J. & Pac , J. D. S e c a f B e - e e g a
. *B* 13, 5188–5192 (1976).
36. L e c e e , A., A . V. & Zaa e , J. De f c a e a d
e g e ac : O b a d e g M -H b a d a *B*
52, R5467 (1995).
37. Ne g e b a e , J. & Sc ef