


ARTICLE

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

Linding Yuan <sup>1,2</sup>, Qihang Liu<sup>3,4</sup>, Xiuwen Zhang<sup>5</sup>, Jun-Wei Luo<sup>1,2,6</sup>, Shu-Shen Li<sup>1,2,6</sup> & Alex Zunger<sup>3</sup>



ce  $\Gamma_1$   $\Gamma_2$  c c d, c f e c f e d<sup>20</sup>, e  
 $\Gamma_6$  g a e e e  $\Gamma_6$  f e R-1  $\Gamma_6$  f a R-2  
 ("R-1 f R-2") b  $\Gamma_6$  e f  $\Gamma_6$  - c e c a c a-  
 R-2 c d a d a c  $\Gamma_6$  a e e c c f i e d  
 a b e a e  $\Gamma_6$  b a  $\Gamma_6$  e .  
 A e a e f R-2 c d BaN S<sub>2</sub><sup>10</sup>, c a f i  $\Gamma_6$ -  
 c d a e d N (II) c e c  $\Gamma_6$  f c e e d 2D a e f  
 e d g e - a  $\Gamma_6$  a e a da e d a a d c a e e  
 e a g a e , a c e  $\Gamma_6$  P4/ . C d c  $\Gamma_6$  a d  
 c e b e a e e <sup>22,23</sup> d c a e a a e a c  
 Pa Pa a a g e . O  $\Gamma_6$  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  $\Gamma_6$  b . (  $0.6 \mu_B$  f  $\Gamma_6$  a  
 a e ) e e e a - f e a a g e c a e  $\Gamma_6$  e  
 a b e a e - a g e c d e b  $43 \text{ eV}(\text{f.})^{-1}$   
 f  $\Gamma_6$  b a d  $28 \text{ eV}(\text{f.})^{-1}$  f a e . T e e DFT+U  
 c a c a a d e e d a BaN S<sub>2</sub> 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  $\Gamma_6$  e e d -  $\Gamma_6$  e f  $\Gamma_6$  2 3 eV. G  $\Gamma_6$  e d f f i c

f e a  $\Gamma_6$  e e e -  $\Gamma_6$  a e e + f a e  $\Gamma_6$  a d  
 e e e a (c d c  $\Gamma_6$  a d c e b ) b e  $\Gamma_6$  <sup>22,23</sup>  
 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  $\Gamma_6$  BaN S<sub>2</sub> a  $\Gamma_6$  d e e c e a  
 c c a f a g e c d e . O  $\Gamma_6$  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  $\Gamma_6$  a (GGA) c a c a a g e e e  
 e a e d e , 1%<sup>10,22</sup>. I e - a g e c d e ,  
 BaN S<sub>2</sub> e e b  $\Gamma_6$  e a d e - e e  $\Gamma_6$  a



ec  $\beta$  ( eaf e, e ed  $\beta$ -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 e  $\alpha_R(R2) = 0.24 V$  . T e a ed  
 e 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  $\alpha$ - a d  $\beta$ -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 e  $\alpha_R = \delta E_{AB}(k - \bar{X}) / 2(k - \bar{X})$ ,  
 c e b a ea e e  $E_c : \alpha_R$  f e  $\alpha$ -Ra ba ba d  
 cea e a d e  $\beta$ -Ra ba ba d cea e a e f e 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. Kyea, J. e. a. D e a g g b a d fface Ra ba effec  
fe e e e c c α-GeTe. . . . . *B* 94, 205111 (2016).
29. T a, H. e a. C ea a f b c a g e e c  
d b a - a g e c e a / B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> e fface. . . . . 8, 5564 (2018).
30. Ca, R. & Pa e e, M. U fied a a c f e c a d a c a d  
de f c a e e. . . . . *L* . 55, 2471–2474 (1985).
31. G e E. K., D e e e R. M. D e f c a e e (S e e Sc e ce &  
B e Med a, 2013).
32. S a, L. J. & Sc e e, M. D e f c a e e f e e e g a . . . . .  
. . . . . *L* . 51, 1888–1891 (1983).
33. Pe e e, J. P., B e e, K. & E e e f, M. G e e a e d g a d e a e a  
a d e e. . . . . *L* . 77, 3865–3868 (1996).
34. K e e, G. & F e e e, J. E f f i c e c f a b- a e e g c a c a f e  
e a a d e c d c e g a a e- a e b a e. C . . . . .  
6, 15–50 (1996).
35. M e e e, H. J. & P a c, J. D. S e c a f e B e - e e g a . . . . .  
. . . . . *B* 13, 5188–5192 (1976).
36. L e c e e, A., A e V. & Z a a e, J. D e f c a e e a d  
e g e a c : O b a e d e g M -H b b a d a e. . . . . *B*  
52, R5467 (1995).
37. N e g e b a e, J. & S c e f