UNIVERSITAS GADJAH MADA
Kajian Spin-split Anisotropik pada Sistem Janus MoSi2P2As2: Kajian Komputasional Berbasis Density Functional Theory
Ahmad Mansyur Kamigero, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D.
Universitas Gadjah Mada, 2025 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

INTISARI

Kajian *Spin-split* Anisotropik pada Sistem Janus $MoSi_2P_2As_2$: Kajian Komputasional Berbasis *Density Functional Theory*

Oleh

Ahmad Mansyur Kamigero
21/481915/PA/21000

Spin-Orbit Interaction (SOI) tetap menimbulkan dekoherensi dalam *transport* spin. Salah satu cara untuk mengatasinya adalah dengan material yang memiliki keadaan *persistent spin textures* (PST). Ji dkk. (2022) melaporkan bahwa PST dapat ditemukan pada material 2D yang memiliki *in-plane mirror symmetry,* tetapi tanpa simetri inversi dan *time-reversal* symmetry. Dalam penelitian ini, dilakukan kajian komputasional berbasis *Density Functional Theory* pada sistem *pristine* 2D $MoSi_2Z_4$ (Z = As, P) yang kemudian dibuat struktur janus $MoSi_2P_2As_2$. Hasil kalkulasi struktur menunjukkan terdapat perubahan *point group* dari C_{2h} menjadi C_s. Kalkulasi struktur elektronik menunjukkan material ini bersifat semimetalik, kemudian struktur spinnya menunjukkan bahwa material ini memiliki karakteristik *canted* PST. Selain itu, dari pendekatan model efektif *k.p* diperoleh parameter Rashba sebesar $\alpha_{1,LUS} = 0.04\ eV\text{Å}$ yang mana material ini berpotensi sebagai kandidat *transport* material pada SFET.

Kata kunci : *Density Functional Theory* , *Spin Orbit Interaction*, Material 2D, Janus $MoSi_2Z4$, *Persistent spin textures*

UNIVERSITAS GADJAH MADA
Kajian Spin-split Anisotropik pada Sistem Janus MoSi2P2As2: Kajian Komputasional Berbasis Density Functional Theory
Ahmad Mansyur Kamigero, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D.
Universitas Gadjah Mada, 2025 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

ABSTRACT

Anisotropic *Spin-split* Study in Janus $MoSi_2P_2As_2$ systems (Z = As, P and $Z \neq Z'$): A Computational Study Based on Density Functional Theory

By

Ahmad Mansyur Kamigero
21/481915/PA/21000

Spin-Orbit Interaction (SOI) still induces decoherence in spin *transport*. One way to address this issue is by using materials that exhibit *persistent spin texture*s (PST). Ji et al. (2022) reported that PST can be found in 2D materials that possess in-plane mirror symmetry but lack both inversion and time-reversal symmetry. In this study, a computational investigation based on Density Functional Theory was conducted on the pristine 2D $MoSi_2Z_4$ system (Z = As, P), followed by the construction of a Janus structure, $MoSi_2P_2As_2$. Structural calculations reveal a change in point group symmetry from C_{2h} to C_s. Electronic structure calculations indicate that the material exhibits semimetallic behavior, while the spin structure shows that the material possesses *canted* PST characteristics. Furthermore, using an effective k·p model approach, a Rashba parameter of $\alpha_{1,LUS} = 0.04\ eV$Å was obtained, suggesting that this material holds potential as a candidate for *transport* material in spin field-effect transistors (SFETs)

Kata kunci : *Density Functional Theory* , *Spin Orbit Interaction*, 2D Material, Janus $MoSi_2Z4$, *Persistent Spin Texture*