

Analisis Sifat Elektronik Superkonduktor Topologi XC (X=V, Nb) Berstruktur Heksagonal: Tinjauan *Density Functional Theory*

Electronic Properties of Topological Superconductors XC (X = V, Nb) with Hexagonal Structure: A Density Functional Theory Perspective

Erik Bhekti Yutomo^{1*}, Suci Faniandari¹, Oki Ade Putra¹

¹Departemen Fisika, Fakultas Sains dan Matematika, Universitas Diponegoro, Semarang, 50275, Indonesia

Email: *erikbhekti@fisika.fsm.undip.ac.id; sfaniandari@fisika.fsm.undip.ac.id; okiadep@fisika.fsm.undip.ac.id

Received: 14th July 2025; Revised: 14th August 2025; Accepted: 21th August 2025

Abstrak – Superkonduktor topologi merupakan kelas material yang menarik karena kemampuannya dalam menggabungkan sifat superkonduktivitas dengan karakter pita energi yang topologis. Dalam studi ini, kami menyelidiki sifat elektronik dari dua logam transisi karbida, yaitu VC dan NbC, dalam fase heksagonal. Perhitungan dilakukan menggunakan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT) dengan mempertimbangkan efek *spin-orbit coupling* (SOC) untuk mengungkap kemungkinan karakter pita topologi non-trivial. Hasil struktur pita energi menunjukkan bahwa kedua material memiliki sifat logam, yang ditandai oleh keberadaan keadaan elektron pada energi Fermi. VC memperlihatkan dua titik Dirac pada lintasan Γ -M dan K- Γ , serta satu titik Weyl pada titik K. Sementara itu, NbC menunjukkan dua titik Dirac dan satu titik triply degenerate pada lintasan Γ -A. Ketika efek SOC diperhitungkan, fitur-fitur topologis ini tidak hanya tetap muncul, tetapi juga menjadi lebih terdefinisi, khususnya pada titik K dan sepanjang lintasan Γ -A. Densitas keadaan terproyeksi (PDOS) mengindikasikan bahwa fitur-fitur topologis tersebut berasal dari hibridisasi kuat antara orbital logam transisi (V 3d dan Nb 4d) dengan orbital C 2p. Hasil ini menunjukkan bahwa VC dan NbC fase heksagonal merupakan kandidat kuat untuk material superkonduktor topologi, yang potensial untuk diaplikasikan dalam teknologi kuantum generasi mendatang.

Kata kunci: *Density Functional Theory*; NbC; pita energi; superkonduktor topologi; VC

Abstract – Topological superconductors are a class of materials that combine superconductivity with nontrivial topological electronic band structures. In this study, we investigate the electronic properties of two transition metal carbides, VC and NbC, in their hexagonal phases. The calculations are performed using the *Density Functional Theory* (DFT) approach, with explicit consideration of *spin-orbit coupling* (SOC) to explore the possible emergence of nontrivial band topology. The calculated band structures reveal metallic behavior in both materials, characterized by the presence of electronic states at the Fermi level. VC exhibits two Dirac points along the Γ -M and K- Γ paths, as well as a Weyl point at the K point. In contrast, NbC shows two Dirac points and one triply degenerate point along the Γ -A path. Upon inclusion of SOC, these topological features not only persist but become more pronounced, particularly near the K point and along the Γ -A direction. The projected density of states (PDOS) analysis indicates that these topological features originate from strong hybridization between the transition metal d orbitals (V 3d and Nb 4d) and the carbon 2p orbitals. These results suggest that hexagonal-phase VC and NbC are promising candidates for topological superconductors, with potential applications in future quantum technologies.

Keywords: *Density Functional Theory*; NbC; band structures; Topological superconductor; VC.

1. Pendahuluan

Komputer kuantum telah menjadi topik sentral dalam riset teknologi informasi karena potensinya melampaui batas-batas komputasi klasik [1,2]. Dengan memanfaatkan prinsip dasar mekanika kuantum seperti superposisi dan keterikatan, sistem ini menjanjikan efisiensi luar biasa dalam pemrosesan informasi, dengan aplikasi luas mulai dari kriptografi kuantum, perancangan obat dan material baru, kecerdasan buatan, hingga simulasi sistem kompleks seperti iklim global [3, 4]. Meski demikian, realisasi praktis dari komputer kuantum masih menghadapi kendala utama berupa dekoherensi, yaitu gangguan terhadap keadaan kuantum akibat interaksi dengan lingkungan [5, 6]. Untuk mengatasi masalah ini, pendekatan komputer kuantum topologi telah dikembangkan, di mana informasi disimpan dalam sifat topologis sistem kuantum. Skema ini menjanjikan ketahanan yang lebih tinggi terhadap gangguan lokal karena perlindungan topologis [7, 8]. Salah satu entitas utama dalam pendekatan ini adalah *Majorana fermion*, partikel kuasipartikel eksotik yang diyakini muncul dalam sistem superkonduktor topologi [9], [10, 11].

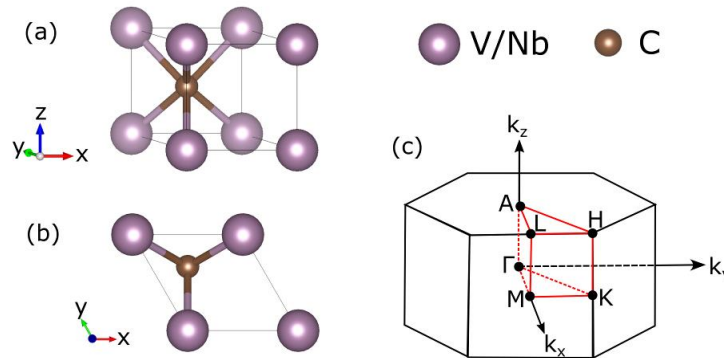
Superkonduktor topologi adalah material yang menggabungkan sifat superkonduktivitas dengan pita energi yang topologis, yang mana kondisi ini ideal untuk memfasilitasi munculnya *Majorana fermion* [12,13]. Oleh karena itu, pencarian dan perancangan material superkonduktor topologi menjadi topik penting dalam fisika material kontemporer. Dalam konteks ini, logam transisi karbida merupakan kelas material yang sangat menjanjikan. Mereka memiliki struktur kristal sederhana, kestabilan kimia dan termal yang baik, serta temperatur transisi superkonduktor (T_c) yang cukup tinggi [14-16]. Beberapa contoh material yang telah banyak dikaji mencakup CrC dan MoC, yang menunjukkan sifat superkonduktivitas bersamaan dengan karakter topologis *nontrivial*, serta T_c masing-masing ~ 35 K dan ~ 14 K [17, 18]. Sementara banyak studi fokus pada logam transisi karbida dalam struktur *rock-salt* (kubik) [17, 19-21], penelitian terbaru menunjukkan bahwa beberapa di antaranya termasuk VC dan NbC dapat stabil dalam fase heksagonal [22]. Fase ini membuka peluang munculnya fenomena topologi baru, yang tidak dapat ditemukan pada struktur kubik [22].

VC dan NbC fase heksagonal dipilih dalam studi ini berdasarkan prediksi teoretis terbaru yang menunjukkan kestabilan struktural keduanya dalam fase tersebut. Namun, disisi lain, sifat elektronik dari VC dan NbC dalam fase heksagonal masih sangat jarang dikaji. Padahal, pemahaman mendalam terhadap sifat elektronik ini sangat penting untuk mengidentifikasi kemungkinan munculnya keadaan superkonduktor topologi. Untuk menyelidiki sifat elektronik secara menyeluruh, pendekatan komputasi berbasis teori fungsi kerapatan atau *Density Functional Theory* (DFT) digunakan dalam penelitian ini. DFT merupakan metode kuantum mekanik yang telah terbukti andal dalam menjelaskan sifat dasar material padat, seperti struktur pita elektronik dan densitas keadaan [23-25]. Dengan DFT, sifat intrinsik dari material dapat dieksplorasi secara mendalam tanpa ketergantungan terhadap eksperimen awal, menjadikannya alat yang sangat berguna dalam studi prediktif dan desain material baru. Dengan demikian, penelitian ini bertujuan untuk menyelidiki sifat elektronik dari VC dan NbC dalam fase heksagonal yang stabil secara struktural menggunakan pendekatan DFT, guna mengevaluasi potensi keduanya sebagai material superkonduktor topologi yang relevan untuk teknologi kuantum masa depan.

2. Metode Komputasi

Seluruh simulasi berbasis DFT dalam penelitian ini dilakukan menggunakan paket kode Quantum ESPRESSO [26,27]. Untuk atom V, Nb, dan C, digunakan *pseudopotensial* tipe *projected augmented wave* (PAW) guna menghasilkan konfigurasi elektron valensi yang akurat [28]. Sementara itu, konfigurasi elektron inti diambil berdasarkan nilai standar masing-masing unsur. Interaksi pertukaran dan korelasi dimodelkan menggunakan pendekatan *Generalized Gradient Approximation* (GGA) dengan tipe *Perdew–Burke–Ernzerhof* (PBE), yang dikenal luas karena ketepatannya dalam merepresentasikan sifat elektronik sistem logam transisi dan senyawa karbida [29]. Optimasi parameter kisi dan posisi atom untuk struktur heksagonal VC dan NbC dilakukan menggunakan algoritma Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) [30-33], dengan kriteria konvergensi gaya ditetapkan pada 10^{-3} Ry/Bohr (~ 30 meV/Å). Dalam tahap ini, parameter kisi sepanjang sumbu x, y, dan z diperbolehkan berubah. Adapun struktur kristal dari VC dan NbC ditunjukkan oleh Gambar 1(a) untuk tampak samping dan Gambar 1(b) untuk tampak atas. Hasil optimasi struktur menunjukkan bahwa parameter kisi untuk VC dalam fase heksagonal adalah $a = b = 2,841$ Å dan $c = 2,667$ Å. Hingga saat ini, belum ditemukan studi terdahulu yang melaporkan parameter kisi VC dalam fase heksagonal, sehingga hasil ini dapat menjadi referensi

awal bagi studi eksperimental maupun komputasi selanjutnya terkait kestabilan dan sifat elektronik VC dalam fase ini. Sementara itu, untuk NbC, diperoleh parameter kisi $a = b = 3,058 \text{ \AA}$ dan $c = 2,876 \text{ \AA}$. Nilai ini sangat dekat dengan data dari studi komputasi sebelumnya yang melaporkan $a = b = 3,055 \text{ \AA}$ dan $c = 2,875 \text{ \AA}$, menunjukkan bahwa hasil optimasi struktur yang digunakan dalam studi ini telah tervalidasi dengan baik [22]. Kesesuaian ini memperkuat keandalan parameter struktur dalam mendukung analisis sifat elektronik lebih lanjut.



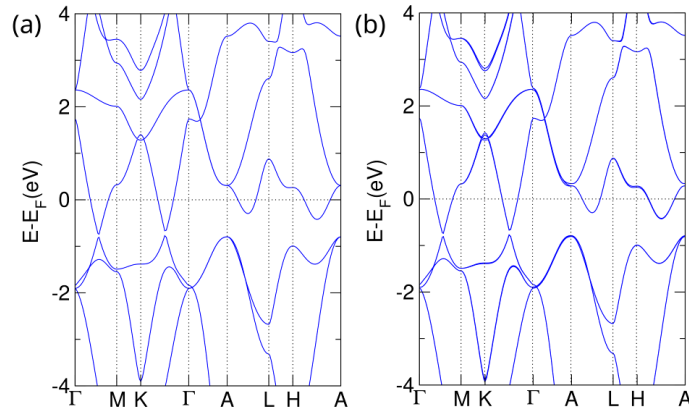
Gambar 1. Struktur kristal dari VC dan NbC tampak samping (a), tampak atas (b), dan lintasan perhitungan struktur elektronik pada zona Brillouin tak tereduksi.

Setelah struktur mencapai kondisi optimal, dilakukan perhitungan *self-consistent field* (SCF) menggunakan energi *cut-off* sebesar 100 Ry (1,3 keV), dengan *mesh k-point* $10 \times 10 \times 10$, dan batas konvergensi energi total sebesar 10^{-4} Ha (~ 3 meV). Perhitungan struktur pita elektronik dilakukan mengikuti lintasan Γ -M-K- Γ -A-L-H-A dalam zona Brillouin tak tereduksi (lihat Gambar 1(c)). Untuk memperoleh hasil rapat keadaan/*density of states* (DOS) yang lebih halus, digunakan perhitungan *non-self-consistent field* (NSCF) dengan *mesh k-point* yang diperbesar menjadi $20 \times 20 \times 20$, sambil mempertahankan parameter lain dari perhitungan SCF. Dalam kajian ini, *spin-orbit coupling* (SOC) dipertimbangkan secara eksplisit dalam perhitungan pita elektronik untuk menyelidiki kemungkinan adanya karakter pita topologi seperti *band inversion* atau celah pita *nontrivial*, yang menjadi indikator penting dalam sistem superkonduktor topologi.

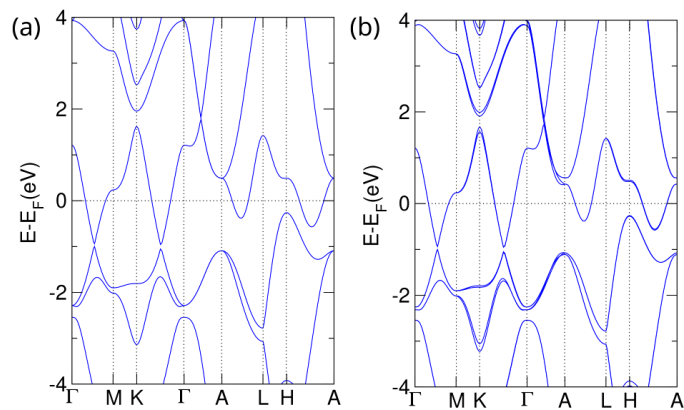
3. Hasil dan Pembahasan

Struktur pita energi dari material VC dan NbC dalam fase heksagonal telah dianalisis untuk dua kondisi: tanpa dan dengan SOC, seperti ditunjukkan pada Gambar 2(a, b) dan Gambar 3(a, b). Hasil ini bertujuan untuk mengungkap karakteristik elektronik *nontrivial* yang berhubungan dengan fenomena topologi pita dan potensi superkonduktivitas. Pada Gambar 2(a) (tanpa SOC), pita energi VC memperlihatkan sifat logam, ditandai dengan energi Fermi yang memotong pita energi. Analisis lebih lanjut menunjukkan keberadaan dua titik Dirac yang masing-masing berada pada lintasan Γ -M dan K- Γ , di sekitar energi $-0,87$ eV, serta satu titik Weyl pada titik K dengan energi sekitar $1,42$ eV. Titik Dirac ini muncul akibat perpotongan linear dua pita energi tanpa pembentukan celah energi, dan merupakan salah satu tanda khas dari material *semimetal* Dirac. Kehadiran titik Dirac menunjukkan bahwa sistem ini dapat mendukung eksitasi fermionik mirip partikel Dirac yang bersifat tidak bermuatan dan tahan terhadap gangguan kecil [34, 35]. Sedangkan titik Weyl merupakan hasil dari degenerasi dua pita yang menyentuh secara linear namun tidak memiliki simetri *time-reversal* atau inversi secara lengkap, dan masing-masing memiliki *chirality* tertentu. Fitur ini adalah ciri dari material *semimetal* Weyl, dan dalam konteks material logam transisi, ini merupakan indikasi kuat adanya fase topologi *nontrivial* dalam sistem [36].

Saat efek SOC diperhitungkan (Gambar 2(b)), fitur-fitur utama pita energi tetap terlihat, namun terjadi pemisahan pita yang signifikan, terutama di sekitar titik K, termasuk pada area titik Weyl, serta sepanjang lintasan Γ -A. Pemisahan pita akibat SOC memperjelas karakteristik topologis pita energi dan menunjukkan bahwa VC memiliki respon kuat terhadap interaksi spin-orbit, yang merupakan ciri penting dari material topologi *nontrivial* [13,15]. Hal ini menjadikan VC sebagai kandidat kuat dalam kelas *semimetal* topologi yang potensial menjadi superkonduktor topologi.



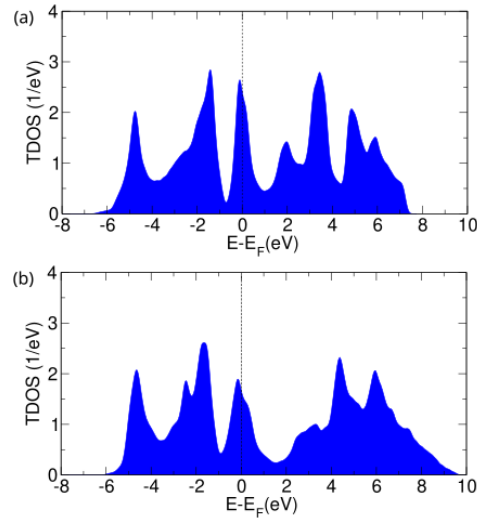
Gambar 2. Struktur pita energi dari VC yang dihitung tanpa mempertimbangkan efek *spin-orbit coupling* (SOC) (a) dan mempertimbangkan efek SOC.



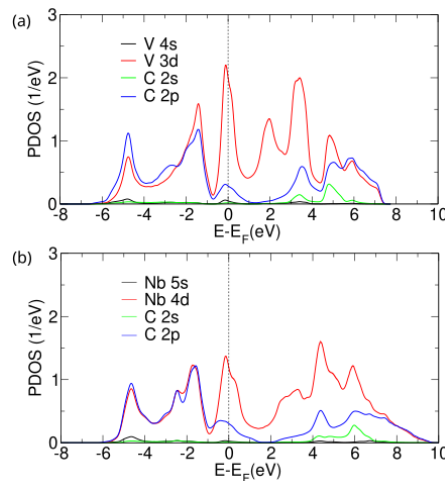
Gambar 3. Struktur pita energi dari NbC yang dihitung tanpa mempertimbangkan efek *spin-orbit coupling* (SOC) (a) dan mempertimbangkan efek SOC.

Sementara itu, struktur pita NbC tanpa SOC (Gambar 3(a)) juga menunjukkan sifat logam, dengan energi Fermi yang memotong pita energi. Ditemukan dua titik Dirac yang terletak pada lintasan Γ -M dan K- Γ , di sekitar energi $-0,99$ eV, serta satu titik *triply degenerate* pada lintasan Γ -A, di mana tiga pita energi bertemu secara terdegenerasi. Keberadaan titik Dirac dan *triply degenerate* ini merupakan fitur yang sangat khas dari sistem *semimetal* topologi, dan telah banyak dikaitkan dengan mekanisme superkonduktivitas topologis pada material lain seperti MoN dan ScC [14, 37]. Ketika SOC diaktifkan (Gambar 3(b)), terlihat pemisahan pita yang signifikan, khususnya pada titik K dan sepanjang lintasan Γ -A. Selain itu, titik *triply degenerate* menjadi lebih jelas dan tajam, memperkuat bukti bahwa NbC memiliki struktur pita topologis *nontrivial*. Hal ini menandakan bahwa SOC tidak menghilangkan fitur topologis utama, melainkan justru memperjelasnya, dan memperkuat kemungkinan bahwa NbC juga merupakan kandidat kuat untuk material superkonduktor topologi.

Untuk mendukung analisis struktur pita energi, kami juga menghitung densitas keadaan total/*total density of states* (TDOS) dan densitas keadaan terproyeksi/*projected density of states* (PDOS) dari VC dan NbC dalam fase heksagonal. Hasilnya ditunjukkan pada Gambar 4(a, b) dan Gambar 5(a, b). Gambar 4(a) dan 4(b) masing-masing menunjukkan TDOS dari VC dan NbC. Pada kedua grafik tersebut, dapat diamati bahwa nilai TDOS pada energi Fermi tidak sama dengan nol, yang berarti terdapat sejumlah keadaan elektronik yang tersedia untuk diisi pada tingkat energi tersebut. Hal ini menandakan bahwa baik VC maupun NbC memiliki sifat logam (*metallic*), sejalan dengan hasil yang diperoleh dari struktur pita energi pada Gambar 2 dan 3. Kehadiran keadaan elektronik pada energi Fermi merupakan syarat penting dalam pembentukan pasangan Cooper, dan karenanya merupakan dasar yang kuat untuk mendiskusikan potensi superkonduktivitas pada kedua material ini.



Gambar 4. Densitas keadaan elektron total/total density of states (TDOS) dari (a) VC, dan (b) NbC.



Gambar 5. Densitas keadaan elektron terproyeksi/projected density of states (PDOS) dari (a) VC, dan (b) NbC.

Untuk memahami kontribusi orbital terhadap fitur topologis pada struktur pita, kami menganalisis PDOS dari masing-masing atom dalam senyawa. Gambar 5(a) menunjukkan PDOS dari VC. Terlihat bahwa orbital V 3d dan C 2p mendominasi di sekitar energi Fermi. Kehadiran titik Dirac pada lintasan Γ -M dan K- Γ , serta titik Weyl di sekitar titik K, dapat dikaitkan dengan hibridisasi kuat antara orbital V 3d dan C 2p. Hibridisasi ini menghasilkan perpotongan pita yang bersifat linear, yang menjadi dasar pembentukan fitur topologi seperti partikel Dirac dan Weyl. Gambar 5(b) memperlihatkan PDOS dari NbC. Dalam hal ini, orbital Nb 4d dan C 2p menunjukkan dominasi yang serupa di dekat energi Fermi. Fitur topologis seperti titik Dirac dan *triple degenerate* yang terdeteksi dalam struktur pita dapat ditelusuri asalnya dari interaksi hibridisasi yang kuat antara orbital Nb 4d dan C 2p. Hibridisasi ini menghasilkan degenerasi pita yang kompleks dan mendukung pembentukan eksitasi fermionik *nontrivial* seperti partikel *triple degenerate*. Hasil PDOS ini memberikan bukti mikroskopik bahwa topologi pita energi pada VC dan NbC tidak hanya muncul akibat efek simetri, tetapi juga berakar pada interaksi orbital tertentu. Ini menegaskan pentingnya pemilihan elemen logam transisi dengan orbital d aktif dalam rekayasa material topologi.

Untuk memperkuat relevansi sifat elektronik pada struktur heksagonal, hasil ini dibandingkan dengan beberapa superkonduktor heksagonal lain yang telah dilaporkan di literatur. Contohnya, MoC berstruktur heksagonal menunjukkan sifat logam dengan titik Dirac yang stabil terhadap SOC dan $T_c \sim 14$ K [38]. Demikian pula, TaC dalam struktur heksagonal memiliki $T_c \sim 10$ K dan juga memperlihatkan fitur topologis yang mirip [22]. Kesamaan dalam sifat logam, kehadiran fitur topologis, dan hibridisasi orbital

d-p antara material yang telah terkonfirmasi superkonduktor dan material VC dan NbC pada studi ini memperkuat argumen bahwa VC dan NbC fase heksagonal merupakan kandidat kuat untuk superkonduktor topologi.

4. Keterbatasan dan Arah Penelitian Selanjutnya

Penelitian ini sepenuhnya dilakukan melalui perhitungan DFT dengan pendekatan GGA-PBE dan metode pseudopotensial. Pendekatan ini mampu memberikan gambaran kualitatif yang akurat mengenai struktur elektronik dan fitur topologis, namun memiliki beberapa keterbatasan. Pertama, T_c belum dihitung karena memerlukan perhitungan kopling elektron-fonon, yang membutuhkan sumber daya komputasi besar. Kedua, analisis kestabilan belum mencakup perhitungan dispersi fonon yang diperlukan untuk memastikan kestabilan dinamik. Selain itu, pengaruh eksternal seperti tekanan, regangan, dan doping kimia belum dieksplorasi, padahal faktor-faktor tersebut berpotensi memodifikasi topologi elektronik dan sifat superkonduktivitas.

Untuk penelitian lanjutan, disarankan melakukan perhitungan kopling elektron-fonon guna memprediksi T_c pada VC dan NbC berstruktur heksagonal, menghitung dispersi fonon untuk memverifikasi kestabilan dinamik, serta mengeksplorasi efek rekayasa regangan, tekanan, dan substitusi unsur terhadap sifat elektronik dan superkonduktivitas. Selain itu, verifikasi eksperimental melalui *Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy* (ARPES) dan pengukuran transport listrik pada temperatur rendah diperlukan untuk memvalidasi sifat logam dan topologi pita yang diprediksi. Rangkaian langkah ini diharapkan dapat menjembatani hasil prediksi teoretis dengan realisasi praktis VC dan NbC struktur heksagonal sebagai kandidat superkonduktor topologi.

5. Kesimpulan

Dalam penelitian ini, telah dilakukan studi komputasi berbasis DFT terhadap sifat elektronik material VC dan NbC dalam fase heksagonal, yang diprediksi stabil secara struktural. Analisis struktur pita energi menunjukkan bahwa kedua material memiliki sifat logam, dengan energi Fermi yang memotong pita energi, serta menampilkan fitur-fitur topologi penting. VC menunjukkan keberadaan dua titik Dirac dan satu titik Weyl, sementara NbC memperlihatkan dua titik Dirac dan satu titik *triply degenerate*. Setelah memperhitungkan efek *spin-orbit coupling* (SOC), fitur-fitur topologis tersebut tetap muncul dan bahkan menjadi lebih terdefinisi, khususnya pada titik-titik kritis seperti K dan sepanjang lintasan Γ -A. Hal ini menegaskan bahwa VC dan NbC memiliki karakteristik pita topologis *nontrivial* yang tetap stabil terhadap interaksi spin-orbit. TDOS mengonfirmasi sifat logam dari kedua material, sementara hasil PDOS menunjukkan bahwa fitur topologi yang teridentifikasi berasal dari hibridisasi kuat antara orbital logam transisi (V 3d dan Nb 4d) dengan orbital C 2p. Temuan ini memberikan pemahaman mikroskopik bahwa topologi pita energi dalam sistem ini tidak hanya bergantung pada simetri kristal, tetapi juga pada interaksi orbital spesifik. Dengan demikian, VC dan NbC fase heksagonal dapat dikategorikan sebagai kandidat kuat untuk material superkonduktor topologi, yang menjanjikan untuk aplikasi teknologi kuantum masa depan, terutama dalam konteks komputer kuantum berbasis topologi.

Pustaka

- [1] J. Fullerton and C. Phatak, "Design and Control of Three-Dimensional Topological Magnetic Fields Using Interwoven Helical Nanostructures," *Nano Lett.*, vol. 25, no. 13, pp. 5148–5155, Apr. 2025, doi: 10.1021/acs.nanolett.4c06152.
- [2] K. Ishibashi *et al.*, "Research on Quantum Materials and Quantum Technology at RIKEN," *ACS Nano*, vol. 19, no. 13, pp. 12427–12457, Apr. 2025, doi: 10.1021/acsnano.4c15409.
- [3] S. Aravindhan, "Quantum Computing in Electronics: A New Era of Ultra-Fast Processing," *Communications on Applied Nonlinear Analysis*, vol. 32, no. 3, pp. 372–382, 2025, doi: 10.52783/cana.v32.1994.
- [4] F. Arute *et al.*, "Quantum supremacy using a programmable superconducting processor," *Nature*, vol. 574, no. 7779, pp. 505–510, Oct. 2019, doi: 10.1038/s41586-019-1666-5.
- [5] S. C. Kenfack *et al.*, "Quantum transition and decoherence of levitating polaron on helium film thickness under an electromagnetic field," *Indian J Phys*, vol. 91, no. 12, pp. 1525–1531, Dec. 2017, doi: 10.1007/s12648-017-1058-3.

- [6] R. Saatjian, S. Dovrén, K. Yamakawa, R. S. Russell, J. G. Analytis, and J. W. Harter, “Quantum decoherence by magnetic fluctuations in a magnetic topological insulator,” *npj Quantum Mater.*, vol. 10, no. 1, p. 81, Jul. 2025, doi: 10.1038/s41535-025-00795-y.
- [7] S. M. Frolov, M. J. Manfra, and J. D. Sau, “Topological superconductivity in hybrid devices,” *Nat. Phys.*, vol. 16, no. 7, pp. 718–724, Jul. 2020, doi: 10.1038/s41567-020-0925-6.
- [8] X. Luo, Y.-G. Chen, Z. Wang, and Y. Yu, “Intrinsic chiral topological superconductor thin films,” *Phys. Rev. B*, vol. 108, no. 23, p. 235147, Dec. 2023, doi: 10.1103/PhysRevB.108.235147.
- [9] J. Yang *et al.*, “Observation of flat band, Dirac nodal lines and topological surface states in Kagome superconductor CsTi3Bi5,” *Nat Commun*, vol. 14, no. 1, p. 4089, Jul. 2023, doi: 10.1038/s41467-023-39620-0.
- [10] M. Mohseni *et al.*, “Designing Majorana Quasiparticles in InAsP Quantum Dots in InP Nanowires with Variational Quantum Eigenvalue Solver,” *physica status solidi (b)*, vol. 262, no. 7, p. 2400552, 2025, doi: 10.1002/pssb.202400552.
- [11] Y. Bao, Y. Li, K. Xia, and L. Meng, “Magnetic-Field Regulation of Nodal Topological Superconducting States in Monolayer Ising Superconductor NbSe2,” *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, vol. 17, no. 12, p. 2300135, 2023, doi: 10.1002/pssr.202300135.
- [12] Z. Huang *et al.*, “Dual topological states in the layered titanium-based oxypnictide superconductor BaTi2Sb2O,” *npj Quantum Mater.*, vol. 7, no. 1, p. 70, Jun. 2022, doi: 10.1038/s41535-022-00477-z.
- [13] M. Sato and Y. Ando, “Topological superconductors: a review,” *Rep. Prog. Phys.*, vol. 80, no. 7, p. 076501, May 2017, doi: 10.1088/1361-6633/aa6ac7.
- [14] A. Elbahri, M. Ragragui, L. B. Drissi, and E. H. Saidi, “Exploring topological phases in superconducting transition metal (Sc, Ti, V)-carbides,” *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. 186, p. 108993, Feb. 2025, doi: 10.1016/j.mssp.2024.108993.
- [15] Y.-T. Hsu, A. Vaezi, M. H. Fischer, and E.-A. Kim, “Topological superconductivity in monolayer transition metal dichalcogenides,” *Nat Commun*, vol. 8, no. 1, p. 14985, Apr. 2017, doi: 10.1038/ncomms14985.
- [16] A. Huang *et al.*, “Multiple topological electronic phases in superconductor MoC,” *Phys. Rev. Mater.*, vol. 2, no. 5, p. 054205, May 2018, doi: 10.1103/PhysRevMaterials.2.054205.
- [17] A. Huang *et al.*, “Multiple topological electronic phases in superconductor MoC,” *Phys. Rev. Mater.*, vol. 2, no. 5, p. 054205, May 2018, doi: 10.1103/PhysRevMaterials.2.054205.
- [18] W. Zhu *et al.*, “Interfacial Superconductivity on the Topological Semimetal Tungsten Carbide Induced by Metal Deposition,” *Advanced Materials*, vol. 32, no. 16, p. 1907970, 2020, doi: 10.1002/adma.201907970.
- [19] M. Kavitha, G. Sudha Priyanga, R. Rajeswarapalanichamy, and K. Iyakutti, “Structural stability, electronic, mechanical and superconducting properties of CrC and MoC,” *Materials Chemistry and Physics*, vol. 169, pp. 71–81, Feb. 2016, doi: 10.1016/j.matchemphys.2015.11.031.
- [20] N. Haberkorn, Y. Y. Zhang, Z. X. Bi, B. H. Park, L. Civale, and Q. X. Jia, “Effect of Co2N impurity on the superconducting properties of δ -MoN thin films grown by polymer assisted deposition,” *Materials Chemistry and Physics*, vol. 259, p. 124184, Feb. 2021, doi: 10.1016/j.matchemphys.2020.124184.
- [21] M. Kuzmiak *et al.*, “Suppressed Superconductivity in Ultrathin Mo2N Films due to Pair-Breaking at the Interface,” *J Supercond Nov Magn*, vol. 35, no. 7, pp. 1775–1780, Jul. 2022, doi: 10.1007/s10948-022-06197-6.
- [22] X.-G. Li, J.-G. Si, L.-T. Shi, P.-F. Liu, P. Zhang, and B.-T. Wang, “Superconductivity and topological states in hexagonal TaC and NbC,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 24, no. 30, pp. 18419–18426, Aug. 2022, doi: 10.1039/D2CP02403A.
- [23] E. B. Yutomo, F. A. Noor, T. Winata, B. Yulianto, and H. Abdullah, “Theoretical insights on the effect of alloying with Co in the mechanism of graphene growth on a CuCo (1 1 1) catalyst,” *Applied Surface Science*, vol. 631, p. 157500, Sep. 2023, doi: 10.1016/j.apsusc.2023.157500.
- [24] E. B. Yutomo, F. A. Noor, and T. Winata, “Uniaxial strain effects on the electronic and thermoelectric properties of SnSe monolayer: A density functional theory study,” *Computational and Theoretical Chemistry*, vol. 1248, p. 115184, Jun. 2025, doi: 10.1016/j.comptc.2025.115184.

- [25] E. B. Yutomo, F. A. Noor, and T. Winata, “Effect of Ni atomic fraction on active species of graphene growth on Cu–Ni alloy catalysts: a density functional theory study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 25, no. 1, pp. 708–723, Dec. 2022, doi: 10.1039/D2CP04621K.
- [26] P. Giannozzi *et al.*, “Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 29, no. 46, p. 465901, Oct. 2017, doi: 10.1088/1361-648X/aa8f79.
- [27] P. Giannozzi *et al.*, “QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 21, no. 39, p. 395502, Sep. 2009, doi: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.
- [28] P. E. Blöchl, “Projector augmented-wave method,” *Phys. Rev. B*, vol. 50, no. 24, pp. 17953–17979, Dec. 1994, doi: 10.1103/PhysRevB.50.17953.
- [29] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, “Generalized Gradient Approximation Made Simple,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868, Oct. 1996, doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
- [30] C. G. BROYDEN, “The Convergence of a Class of Double-rank Minimization Algorithms 1. General Considerations,” *IMA Journal of Applied Mathematics*, vol. 6, no. 1, pp. 76–90, Mar. 1970, doi: 10.1093/imamat/6.1.76.
- [31] R. Fletcher, “A new approach to variable metric algorithms,” *The Computer Journal*, vol. 13, no. 3, pp. 317–322, Jan. 1970, doi: 10.1093/comjnl/13.3.317.
- [32] D. Goldfarb, “A family of variable-metric methods derived by variational means,” *Math. Comp.*, vol. 24, no. 109, pp. 23–26, 1970, doi: 10.1090/S0025-5718-1970-0258249-6.
- [33] D. F. Shanno, “Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization,” *Math. Comp.*, vol. 24, no. 111, pp. 647–656, 1970, doi: 10.1090/S0025-5718-1970-0274029-X.
- [34] M. S. Hossain *et al.*, “Tunable superconductivity coexisting with the anomalous Hall effect in a transition metal dichalcogenide,” *Nat Commun*, vol. 16, no. 1, p. 2399, Mar. 2025, doi: 10.1038/s41467-025-56919-2.
- [35] Y. Ando and L. Fu, “Topological Crystalline Insulators and Topological Superconductors: From Concepts to Materials,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 6, no. Volume 6, 2015, pp. 361–381, Mar. 2015, doi: 10.1146/annurev-conmatphys-031214-014501.
- [36] K. Shiozaki, “The classification of surface states of topological insulators and superconductors with magnetic point group symmetry,” *Prog Theor Exp Phys*, vol. 2022, no. 4, p. 04A104, Apr. 2022, doi: 10.1093/ptep/ptep026.
- [37] X. Yue, G.-J. Qiao, and C. P. Sun, “Refined Majorana phase diagram in a topological insulator--superconductor hybrid system,” *Phys. Rev. B*, vol. 108, no. 19, p. 195405, Nov. 2023, doi: 10.1103/PhysRevB.108.195405.
- [38] A. Huang *et al.*, “Multiple topological electronic phases in superconductor MoC,” *Phys. Rev. Mater.*, vol. 2, no. 5, p. 054205, May 2018, doi: 10.1103/PhysRevMaterials.2.054205.