

# 拓扑节线材料 $Fe_4C$ 中反常热电效应的理论预测

陈荣<sup>1,2</sup>, 于天野<sup>2</sup>, 陈星秋<sup>2</sup>, 孙岩<sup>2</sup>

(1. 东北大学材料科学与工程学院, 辽宁沈阳 110819;

2. 中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心, 辽宁沈阳 110016)

**摘要:** 寻找具有室温应用潜力的反常能斯特电导率大的材料对于热电器件的发展至关重要. 拓扑磁性材料由于具有特殊的电子结构, 可以表现出比传统磁性材料更强的反常霍尔电导率和反常能斯特电导率. 通过第一性原理计算对 $Fe_4C$ 化合物的热电效应进行了详细研究. 结果表明, 外磁场的引入破坏了不同镜面上由对称性保护的节线环以及在某些高对称路径上的节线, 由此产生较大的本征贝里曲率是 $Fe_4C$ 化合物具有显著反常霍尔电导率和反常能斯特电导率的主要原因. 这一发现揭示了晶体对称性与材料本征贝里曲率之间的强关联性. 此外, 温度依赖的反常能斯特电导率曲线表明了 $Fe_4C$ 化合物具有室温应用潜力. 以上结果有助于全面理解 $Fe_4C$ 化合物的热电效应及其应用.

**关键词:** 热电效应; 第一性原理计算; 贝里曲率; 反常霍尔效应; 反常能斯特效应

中图分类号: O 469

文献标志码: A

文章编号: 1005-3026(2025)08-0156-07

## Theoretical Prediction of Anomalous Thermoelectric Effects in Topological Nodal Line Material $Fe_4C$

CHEN Rong<sup>1,2</sup>, YU Tian-ye<sup>2</sup>, CHEN Xing-qiu<sup>2</sup>, SUN Yan<sup>2</sup>

(1. School of Material Science & Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China; 2. Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China. Corresponding author: YU Tian-ye, E-mail: tyu@imr.ac.cn)

**Abstract:** The search for materials with large anomalous Nernst conductivity at room temperature is crucial for the development of thermoelectric devices. Topological magnetic materials, due to their unique electronic structures, can exhibit bigger anomalous Hall conductivity and anomalous Nernst conductivity compared to conventional magnetic materials. The thermoelectric effects of the  $Fe_4C$  compound have been studied through first-principles calculations. The results show that the introduction of an external magnetic field breaks symmetry-protected nodal line rings on various mirrors, as well as nodal lines on certain high-symmetry paths, leading to a significant intrinsic Berry curvature. This large intrinsic Berry curvature is the main reason for the substantial anomalous Hall conductivity and anomalous Nernst conductivity of the  $Fe_4C$  compound. This finding highlights the strong correlation between crystal symmetry and the intrinsic Berry curvature of the material. Additionally, the temperature-dependent anomalous Nernst conductivity curve shows the potential of the  $Fe_4C$  compound for applications at room temperature. These results contribute to a comprehensive understanding of the thermoelectric effects in  $Fe_4C$  compounds and their further applications.

**Key words:** thermoelectric effect; first-principles calculation; Berry curvature; anomalous Hall effect; anomalous Nernst effect

通过热电技术可以实现热能与电能的相互转换, 为发电和固态制冷提供了解决方案. 根据

产生的电势差相对于温度梯度的方向, 热电效应可分为纵向热电效应和横向热电效应. 纵向热电

效应包括泽贝克效应和佩尔捷效应;横向热电效应包括能斯特效应和爱廷豪森效应<sup>[1-3]</sup>.与佩尔捷效应和爱廷豪森效应相比,泽贝克效应和能斯特效应因其更简单的测量技术而得到了广泛的研究.泽贝克效应描述了电势在施加温度梯度方向上的积累现象.在过去的几十年里,研究者们对基于泽贝克效应的热电材料和器件进行了广泛研究,为这种环境友好的能源转换技术带来了广阔的应用前景<sup>[4-12]</sup>.基于泽贝克效应的热电设备通常采用热并联和电串联结构,由几个基本单元组成,包括n型和p型热电腿、金属电极和陶瓷基板.但是在实际应用中,由于热电腿与金属电极之间的兼容性、反应和元素扩散,对热电器件的长期使用带来了挑战<sup>[13]</sup>.

近年来,随着奇异拓扑磁性材料的发现,磁性与热电性能之间的相互作用引发了人们对热电转换研究的浓厚兴趣,如磁泽贝克效应、能斯特效应和反常能斯特效应<sup>[14-20]</sup>.当存在温度梯度的磁性材料置于垂直于温度梯度方向的磁场中时,会在温度梯度和磁场所构成平面的法线方向产生电势差,这就是能斯特效应.而反常能斯特效应描述了在弱磁场(甚至零磁场)下,电子或空穴载流子在垂直于温度梯度和磁场方向的积累现象,是反常霍尔效应的热对应物.与基于泽贝克效应的热电装置相比,基于能斯特效应的热电装置可以在空间上实现热源与电路分离<sup>[21]</sup>.在能斯特器件中,仅需一种材料,即n型或p型材料,因为电压的极性可以通过反转磁场的方向来实现.因此,能斯特器件克服了泽贝克器件在应用上的一些问题,比如由于n型和p型材料具有不同的热膨胀系数从而出现的兼容性问题<sup>[6]</sup>.

热电转换效率与热电性能系数 $ZT$ 值密切相关,其定义为 $ZT=S^2\sigma T/\kappa$ ,其中 $S$ 为泽贝克系数(热电势), $\sigma$ 为电导率, $T$ 为绝对温度, $\kappa$ 为热导率.理论上,可以通过电子能带结构预测和调节材料的热电性能.对于泽贝克效应,其功率因子 $S^2\sigma$ 与材料载流子迁移率和有效质量密切相关,满足 $S^2\sigma\propto\mu m_{\text{DOS}}^{*3/2}$ <sup>[22]</sup>,其中 $\mu$ 表示载流子迁移率, $m^*$ 为有效质量,而DOS为态密度.因此,性能优良的热电材料其载流子应具有大的有效质量和高的迁移率.有效质量与费米能级处的态密度密切相关,费米能级处大的态密度往往反映了大的有效质量.因此,可以通过增加费米能级处的能带简并或者通过掺杂的方式引入外来能级来增加费米

能级处的态密度,从而提升材料的热电性能.而迁移率可以通过引入各种散射机制来实现.

在拓扑磁性材料发现之前,反常霍尔效应和反常能斯特效应的研究主要集中在传统铁磁材料中<sup>[23]</sup>.在铁磁材料中,自旋向上和自旋向下的载流子不平衡导致了自旋极化的横向电荷电流.因此,反常霍尔效应和反常能斯特效应的大小历来被认为与体系中磁矩大小成正比<sup>[24]</sup>.这限制了该横向热电技术的实际应用.近年来,随着拓扑磁性材料的蓬勃发展,带来了许多奇异的输运现象,这些现象与其独特的拓扑非平庸的电子能带结构密切相关.先前的理论工作表明,拓扑磁性材料如果在非相对论情况下的电子能带结构在费米能级附近存在受对称性保护的能带简并(例如,镜面对称保护的节线).在相对论情况下,这些简并能带会在自旋轨道耦合作用下打开较小的能隙,从而在布里渊区的相应位置产生较大的贝里曲率,这是拓扑磁性材料具有较大本征反常霍尔电导率和反常能斯特电导率的主要原因<sup>[25]</sup>.本征反常霍尔电导率是由费米能级以下所有占据态能带的贝里曲率引起的,而反常能斯特电导率则来自费米能级附近占据态能带和未占据态能带的贡献<sup>[26]</sup>.时间反演对称性破缺是实现反常霍尔效应和反常能斯特效应的前提.因此,拓扑磁性材料需在与潜在应用场景相匹配的温度范围内表现出自发磁化,这通常要求材料具有高于室温的居里温度或奈尔温度.因此,反常热电器件对具有高于室温的居里温度或奈尔温度的拓扑磁性材料需求量很大.

具有大的室温反常霍尔电导率和反常能斯特电导率的拓扑磁性材料在热电器件中有重要应用价值,通过电子能带理论研究,能够在设计阶段预测材料的热电性能,从而缩短开发周期,推动高效热电材料的实际应用.本文对具有 $P43m$ 空间群、立方结构的拓扑 $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物的电子结构和输运性质进行了详细研究.

## 1 计算方法

为了获得高对称约束的Wannier函数,使用了基于局域基组的密度泛函理论软件包FPLO(full-potential local-orbital code, FPLO)<sup>[27]</sup>.本文是在Železný等<sup>[25]</sup>关于高通量计算反常霍尔电导率研究的基础上进行了进一步探讨.FPLO的第一性原理计算采用了PBE-GGA(Perdew-Burke-

Ernzerhof-generalized gradient approximations, PBE-GGA)交换关联势<sup>[28]</sup>.计算中使用了 $20 \times 20 \times 20$ 的K点网格,能量收敛标准设置为 $2.72 \times 10^{-7}$  eV,每个原子的力收敛设置为0.01 eV/nm.由于FPLO不包含磁对称性,使用了非磁性空间群作为输入,这通过将具有不同磁矩的磁性原子视为在化学上不同的原子来实现.在计算中,考虑了自旋极化,允许在上自旋和下自旋通道中独立处理电子的自旋态.通过为不同原子的自旋态设定初始条件,引入初始自旋分裂,以优化材料的磁性,计算中将自旋量化轴固定在[001]方向.

## 2 结果与讨论

### 2.1 热电原理

纵向热电,即泽贝克效应和佩尔捷效应,描述了电势在温度梯度方向上的积累现象,其器件组成和工作原理分别如图1a和图1b所示.可以将其分为2个部分进行讨论:一是热电发电,这是由材料两端温差直接产生电压的过程.材料中的电子或者空穴载流子因温度梯度从高温区向低温区扩散时,在低温区积累,由于冷热两端的载流子浓度不平衡而导致了电势差,即为泽贝克效应;反之,当直流电通入热电材料时,这些材料会展现出电热能量转换的特性,从而实现制冷功能,这被称为热电制冷,即佩尔捷效应.另一方面,能斯特效应是一种横向热电效应(见图1c),描述了在磁场作用下,电子或空穴载流子在垂直于温度梯度和磁场方向上的积累现象,类似于霍尔效应.与霍尔效应不同的是,在能斯特效应中,导致横向电势差的因素是温度梯度,而非霍尔效应中的电流.

### 2.2 $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物的晶体结构和电子结构

材料的热电性能与其电子结构密切相关.在理论研究上,可以通过调节材料的电子能带结构来改善其热电性能.图2a为具有大泽贝克效应和反常能斯特效应的电子结构.由于泽贝克效应的功率因子 $S^2\sigma$ 与材料载流子的有效质量密切相关.大的有效质量往往对应于材料费米能级附近大的态密度.因此,在费米能级附近具有较大能带简并度的材料往往具有较好的热电性能.可以看出,随着温度的升高,青色能带和蓝色能带在费米能级下方发生交叠,导致该处较大的态密度.除了促使能带在费米能级附近发生简并外,还可以通过引入杂质能级提高费米能级处的态

密度.对于反常能斯特效应,其本征反常能斯特电导率与费米能级附近非零的贝里曲率 $\Omega$ 有关.较大的贝里曲率与磁性材料的拓扑能带结构密切相关.在非相对论情况下,如果拓扑磁性材料在费米能级附近存在能带简并,其在自旋轨道耦合作用下打开较小能隙,引起能带反转,这往往会导致费米能级附近具有较大贝里曲率,从而得到可观的本征反常霍尔电导率和反常能斯特电导率,如图2b所示.

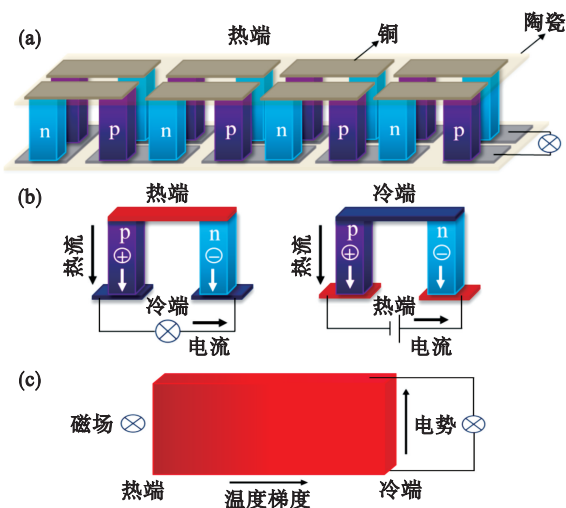


图1 热电效应

Fig. 1 Thermoelectric effect

(a)一基于泽贝克效应的热电装置;(b)一泽贝克效应和佩尔捷效应工作原理;(c)一能斯特效应和反常能斯特效应工作原理.

从理论上研究材料的热电性能,首先需要关注其电子结构. $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物的晶体结构如图3a所示,其具有 $P43m$ 空间群,其中C原子位于立方体的8个顶点,每个C原子被4个Fe原子包围.计算得到的晶格常数为0.384 nm,Fe的原子磁矩为 $2.14 \mu_B$ ,与之前的理论研究(晶格常数为0.389 nm,原子磁矩为 $2.11 \mu_B$ )<sup>[29]</sup>具有良好的一致性.图3b展示了 $P43m$ 空间群对应的布里渊区.在晶体结构和布里渊区中分别绘制了 $\{110\}$ 镜面族中的(110)镜面,余下的5个镜面与之等效.根据图3b所示布里渊区的高对称路径,研究了 $\text{Fe}_4\text{C}$ 的电子能带结构,如图3c~图3f所示.可以看出,电子能带结构和态密度均表明 $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物为导体,且通过图3c可以看出,在高对称点M附近存在两个能带交叉点,表明其可能存在节线.此外, $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物铁磁态电子能带结构中某些高对称路径上( $\Gamma$ -R)两条简并的能带在自旋轨道耦合作用下被打开能隙,如图3c和图3e中紫色箭头所指向的绿色能带.

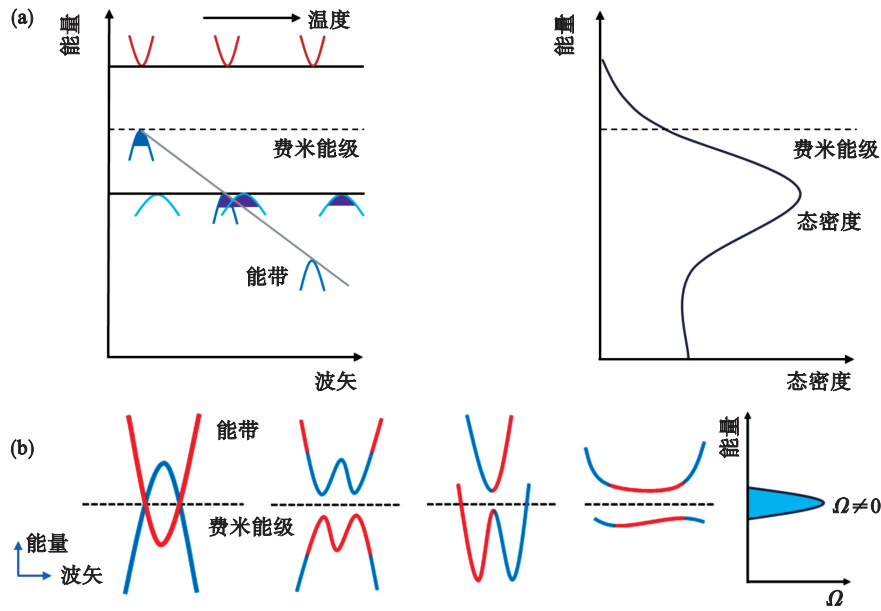
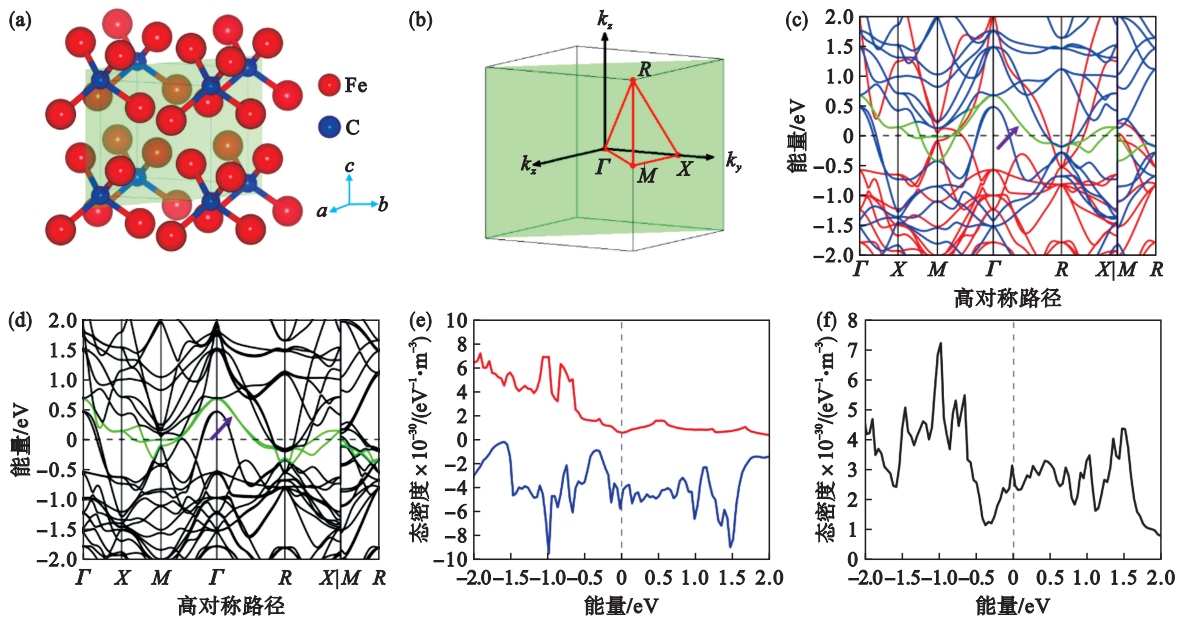


图 2 具有大泽贝克效应和反常能斯特效应的电子结构

Fig. 2 Electronic structure with large Seebeck effect and anomalous Nernst effect

(a)—费米能级附近的能带简并导致大的态密度；(b)—自旋轨道耦合引起能带反转造成非零贝里曲率。



注:图c~图f中虚线表示费米能级;图c和图e中——自旋向上——自旋向下。

图 3 Fe<sub>4</sub>C化合物的晶体结构、布里渊区与电子结构

Fig. 3 Crystal structure, Brillouin zone, and electronic structure of Fe<sub>4</sub>C compound

(a)—晶体结构；(b)—布里渊区；(c)—铁磁态电子能带结构；(d)—铁磁态加自旋轨道耦合电子能带结构；  
(e)—铁磁态电子态密度；(f)—铁磁态加自旋轨道耦合电子态密度。

### 2.3 热电效应

作为反常霍尔效应的热对应物,反常能斯特效应是被广泛研究的现象.理论上,反常霍尔电导率和反常能斯特电导率来源于本征贡献和非本征贡献.本征贡献完全由完美晶体的电子结构决定,而非本征贡献则源自电子在杂质上的散射<sup>[24]</sup>.本文主要关注本征贡献,因为计算简单,并且对每种材料具有普遍的适用性.相比之下,非

本征贡献依赖于杂质的存在,计算过程较为复杂.本征贡献的显著特点是描述了非耗散输运.此外,本征贡献由每个占据态能带的 $\Omega$ 的积分给出.为了获得体系的 $\Omega$ ,使用基于Wannier函数的紧束缚哈密顿量 $H$ 的Kubo公式<sup>[24,30]</sup>.

$$\Omega_{xy,n} = \text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\left\langle n \left| \frac{\partial H}{\partial k_x} \right| m \right\rangle \left\langle m \left| \frac{\partial H}{\partial k_y} \right| n \right\rangle - (x \leftrightarrow y)}{(E_{(n)} - E_{(m)})^2}. \quad (1)$$

式中:  $\Omega_{xy,n}$  为第  $n$  条能带贝里曲率的  $xy$  分量,  $x, y$  分别表示电流方向和磁场方向;  $\text{Im}$  表示取复数的虚部;  $\sum_{m \neq n}$  表示对其他所有能带求和;  $\langle n \rangle$  和  $\langle m \rangle$  为布洛赫函数的本征态;  $E_{(n)}$  和  $E_{(m)}$  是其对应的本征值;  $\frac{\partial H}{\partial k_x}$  表示哈密顿量对波矢  $k_x$  的偏导数;  $x \leftrightarrow y$  表示交换  $\left\langle n \left| \frac{\partial H}{\partial k_x} \right| m \right\rangle \left\langle m \left| \frac{\partial H}{\partial k_y} \right| n \right\rangle$  中  $x$  和  $y$  的位置.

由于 FPLO 的局域基组为实现高对称 Wannier 函数提供了一个理想的平台. 因此, 从最大局域 Wannier 函数算法出发, 将布洛赫波函数的子集投影到一组合适的、具有规定对称性的试探性局域函数上, 并随后进行正交归一化处理, 从而获得对称约束的 Wannier 函数. 基于贝里曲率, 反常霍尔电导率  $\sigma$  的  $xy$  分量可以通过以下公式计算:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_n^{\text{occ}} \int \frac{\Omega_{xy,n}}{(2\pi)^3} d^3 k. \quad (2)$$

式中:  $e$  为电子的电荷;  $\hbar$  为约化普朗克常数;  $\sum_n^{\text{occ}}$  为对所有占据态能带求和;  $\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}$  为在整个布里渊区积分.

在获得反常霍尔电导率后, 可基于贝里曲率进一步计算体系对应的反常能斯特电导率  $\alpha$  的  $xy$  分量<sup>[31]</sup>,

$$\alpha_{xy} = \frac{1}{T} \frac{e}{\hbar} \sum_n \int \frac{1}{(2\pi)^3} \Omega_{xy,n} \left[ \left( E_{(n)} - E_F \right) f_n + k_B T \ln \left( 1 + \exp \frac{E_{(n)} - E_F}{-k_B T} \right) \right] d^3 k. \quad (3)$$

式中:  $T$  是实际温度;  $f_n$  是费米狄拉克分布函数;  $E_F$  是费米能级;  $k_B$  为玻尔兹曼常数.

从应用角度来看, 研究材料在室温下是否具有显著的反常能斯特电导率对于评估材料在室温下的应用潜力具有重要意义. 首先, 对  $\text{Fe}_4\text{C}$  化合物反常霍尔电导率的计算进行了  $K$  点测试, 如图 4a 所示. 可以看出,  $240 \times 240 \times 240$  的  $K$  点数量已经能获得足够稳定的结果. 因此, 在之后对反常霍尔电导率和反常能斯特电导率的计算均采用了  $240 \times 240 \times 240$  的  $K$  点数量. 图 4b 给出了反常霍尔电导率随能量的变化曲线, 在费米能级处,  $\text{Fe}_4\text{C}$  的反常霍尔电导率为  $272.12 \text{ S/cm}$ , 与之前的理论研究结果 ( $287.45 \text{ S/cm}$ )<sup>[25]</sup> 吻合较好. 在费米能级附近的  $-0.1 \text{ eV}$  和  $0.1 \text{ eV}$  附近各出现一个较大的反常霍尔电导率特征峰. 因此, 可以通过能带工程调节费米能级的位置获得较大的反常霍尔电导率. 反常能斯特电导率曲线在费米能级处接近

最大峰值, 为  $4.09 \text{ A}/(\text{m} \cdot \text{K})$ , 其结果如图 4c 所示. 为了评估  $\text{Fe}_4\text{C}$  在室温应用中的潜力, 研究了反常能斯特电导率随温度变化的情况, 温度范围为  $10 \text{ K}$  至接近室温的  $300 \text{ K}$ , 如图 4d 所示. 可以看出, 随着温度的增加, 反常能斯特电导率初期呈线性上升. 在温度超过约  $120 \text{ K}$  后, 反常能斯特电导率开始以抛物线形式缓慢上升, 直到  $300 \text{ K}$  室温附近并未出现下降趋势, 表明该材料具有良好的室温应用前景. 此外, 还利用 Mott 公式<sup>[26]</sup> 预测了反常能斯特电导率随温度的变化, 并与基于贝里曲率计算的结果进行了对比.

$$\alpha_{xy} = \frac{\pi}{3} \frac{k_B^2 T}{e} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial E} (E_F). \quad (4)$$

式中,  $E$  为能量.

可以看出两条曲线在  $10 \sim 60 \text{ K}$  的温度下吻合较好, 当温度逐渐升高时, 两者的偏差越来越大, 表明 Mott 公式只适合在较低温度下预测反常能斯特电导率和温度的关系.

## 2.4 三维能带和贝里曲率

通过二维电子能带结构分析 (见图 3c), 发现  $\text{Fe}_4\text{C}$  化合物自旋向下的第 14 条能带与第 15 条能带 (绿色能带) 在费米能级处的高对称点  $M$  附近存在能带交叉, 形成了类似于节线环的拓扑能带结构. 对称性分析表明,  $P43m$  空间群具有  $\{110\}$  镜面对称操作, 因此允许在  $\{110\}$  晶面族上存在受对称保护的节线环. 为了验证这一猜想, 绘制了以高对称点  $M$  为中心、沿  $(110)$  晶面方向的三维电子能带结构, 如图 5a 所示. 图中绿色部分表示两条能带的交点, 这两条能带的交点形成了节线环. 在自旋轨道耦合的作用下, 原本简并的节线环遭到破坏, 使两条能带产生能隙, 如图 5b 所示. 此外, 图 5c 比较了在自旋极化和自旋轨道耦合下这两条能带沿高对称路径  $\Gamma$  到  $M$  上的二维能带差异. 在自旋轨道耦合的作用下, 原本在  $\Gamma$  到  $M$  上简并的能带被打开能隙, 与三维能带所得的结果一致. 为探究  $\text{Fe}_4\text{C}$  化合物中较大反常霍尔电导率和反常能斯特电导率的原因, 图 5d 展示了  $\text{Fe}_4\text{C}$  化合物电子能带结构中存在的节线、节线环以及贝里曲率在布里渊区中的分布. 可以看到, 在  $\{110\}$  的 12 个镜面上均存在以高对称点  $M$  为中心的节线环, 并且在从  $\Gamma$  到  $R$  的高对称路径上存在一条节线 (图中紫色箭头所示). 这与在三维电子能带结构中观察到的结果相对应. 通过贝里曲率的分析发现, 由于自旋轨道耦合不仅破坏了  $\{110\}$  镜面上的各个节线环, 也破坏了从  $\Gamma$  到  $R$  的节线, 从而导致了较大的贝里曲率.

这是 $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物中存在可观反常霍尔电导率和反常能斯特电导率的主要原因.

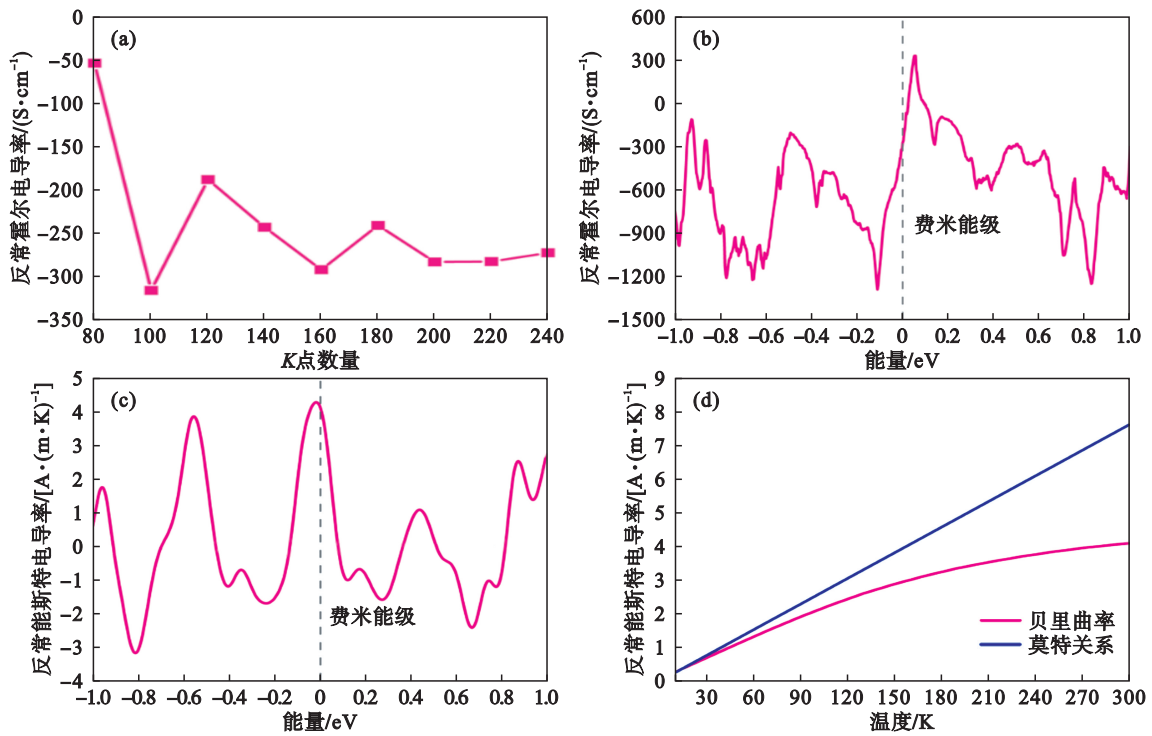


图 4  $K$ 点和能量依赖的反常霍尔电导率以及能量和温度依赖的反常能斯特电导率  
Fig. 4  $K$  points and energy dependent anomalous Hall conductivity, as well as energy and temperature dependent anomalous Nernst conductivity

(a)— $K$ 点依赖的反常霍尔电导率; (b)—能量依赖的反常霍尔电导率;  
(c)—能量依赖的反常能斯特电导率; (d)—温度依赖的反常能斯特电导率.

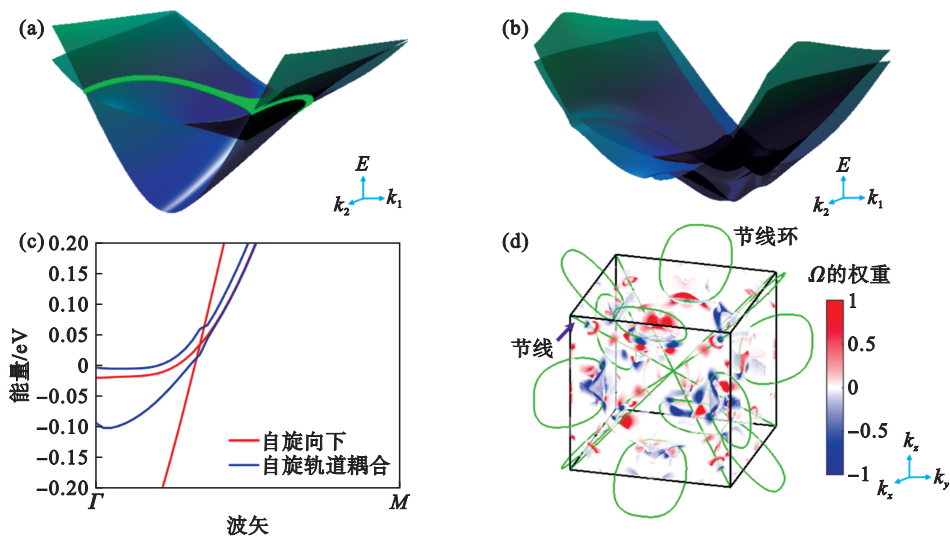


图 5 不同情况下节线的能带和贝里曲率  
Fig. 5 Energy bands of nodal line under different conditions and Berry curvature

(a)—自旋极化下节线的三维能带; (b)—自旋轨道耦合下节线的三维能带;  
(c)—自旋极化下和自旋轨道耦合下节线的二维能带变化; (d)—贝里曲率.

### 3 结 语

本文对 $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物的电子结构和热电性质进行了系统研究. 电子结构分析表明, $\text{Fe}_4\text{C}$ 为导

体. 由于其较高的晶体对称性, $\text{Fe}_4\text{C}$ 中存在受晶体对称保护的节线和节线环. $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物在费米能级处的反常霍尔电导率为 $272.12 \text{ S/cm}$ . 在接近室温的 $300 \text{ K}$ 温度下, 其反常能斯特电导率为 $4.09 \text{ A}/(\text{m}\cdot\text{K})$ , 它们都与外加磁场破坏了受晶体

对称保护的节线环和节线所引起的较大贝里曲率有关.此外,温度依赖的反常能斯特电导率曲线在接近室温时未出现下降趋势,表明 $\text{Fe}_4\text{C}$ 化合物在室温应用方面展现出良好的前景.以上结果表明,结构对称性在实现大反常霍尔电导率和反常能斯特电导率中起着重要作用,尤其是在具有高对称性和多个镜面的材料中.

#### 参考文献:

- [1] Von Seebeck T J, Von Octtingen A J. Magnetische polarisation der metalle und erze durch temperatur-differenz [M]. Leipzig: Engelmann W, 1895.
- [2] Peltier J C A. Nouvelles expériences sur la calorité des courans électriques [J]. *Annales de Chimie et de Physique*, 1834, 56(4): 371-386.
- [3] Von Ettingshausen A, Nernst W. Ueber das auftreten electromotorischer kräfte in metallplatten, welche von einem wärmestrome durchflossen werden und sich im magnetischen felde befinden [J]. *Annalen der Physik*, 1886, 265(10): 343-347.
- [4] Pei Y Z, Shi X Y, LaLonde A, et al. Convergence of electronic bands for high performance bulk thermoelectrics [J]. *Nature*, 2011, 473(7345): 66-69.
- [5] Roychowdhury S, Ghosh T, Arora R, et al. Enhanced atomic ordering leads to high thermoelectric performance in  $\text{AgSbTe}_2$  [J]. *Science*, 2021, 371(6530): 722-727.
- [6] Liu D R, Wang D Y, Hong T, et al. Lattice plainification advances highly effective  $\text{SnSe}$  crystalline thermoelectrics [J]. *Science*, 2023, 380(6647): 841-846.
- [7] Wang H H, Jiang L F, Zhou Z Z, et al. Magnetic frustration driven high thermoelectric performance in the kagome antiferromagnet  $\text{YMn}_6\text{Sn}_6$  [J]. *Physical Review B*, 2023, 108(15): 155135.
- [8] Zheng S K, Xiao S J, Peng K L, et al. Symmetry-guaranteed high carrier mobility in quasi-2D thermoelectric semiconductors [J]. *Advanced Materials*, 2023, 35(10): 2210380.
- [9] Wang H H, Zhou Z Z, Ying J J, et al. Large magneto-transverse and longitudinal thermoelectric effects in the magnetic Weyl semimetal  $\text{TbPtBi}$  [J]. *Advanced Materials*, 2023, 35(2): 2206941.
- [10] Serrano-Sanchez F, Yao M Y, He B, et al. Electronic structure and low-temperature thermoelectric transport of  $\text{TiCoSb}$  single crystals [J]. *Nanoscale*, 2022, 14(28): 10067-10074.
- [11] Pan Y, He B, Helm T, et al. Ultrahigh transverse thermoelectric power factor in flexible Weyl semimetal  $\text{WTe}_2$  [J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 3909.
- [12] 祝鑫强, 王剑, 朱璨, 等.  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  单晶的磁性和电-热输运性能 [J]. *物理学报*, 2023, 72(17): 177102. (Zhu Xin-qiang, Wang Jian, Zhu Can, et al. Magnetic and electrical-thermal transport properties of  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  single crystal [J]. *Acta Physica Sinica*, 2023, 72(17): 177102.)
- [13] Snyder G J, Toberer E S. Complex thermoelectric materials [J]. *Nature Materials*, 2008, 7(2): 105-114.
- [14] Zhao W Y, Liu Z Y, Sun Z G, et al. Superparamagnetic enhancement of thermoelectric performance [J]. *Nature*, 2017, 549(7671): 247-251.
- [15] Lyu M, Liu J Y, Zhang S, et al. Large anomalous Hall and Nernst effects dominated by an intrinsic mechanism in the noncollinear ferromagnet  $\text{PrMn}_2\text{Ge}_2$  [J]. *Physical Review B*, 2025, 111(1): 014424.
- [16] He B, Yu T Y, Pan Y, et al. Evolution of nodal line induced out-of-plane anomalous Hall effect in  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  [J]. *Physical Review B*, 2025, 111(4): 045157.
- [17] He B, Yao M Y, Pan Y, et al. Enhanced Weyl semimetal signature in  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  Kagome ferromagnet by chlorine doping [J]. *Communications Materials*, 2024, 5: 275.
- [18] Shao D X, Deng J Z, Sheng H H, et al. Large spin Hall conductivity and excellent hydrogen evolution reaction activity in unconventional  $\text{PtTe}_{1.75}$  monolayer [J]. *Research*, 2023, 6: 0042.
- [19] Pan Y, He B, Wang H H, et al. Topological materials for high performance transverse thermoelectrics [J]. *Next Energy*, 2024, 2: 100103.
- [20] 李荣汉. 拓扑半金属材料的第一性原理计算设计 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2019. (Li Rong-han. The calculational design of topological semimetal materials [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2019.)
- [21] Zhou W N, Yamamoto K, Miura A, et al. Seebeck-driven transverse thermoelectric generation [J]. *Nature Materials*, 2021, 20(4): 463-467.
- [22] Nolas G S, Sharp J, Goldsmid H J. Thermoelectrics: basic principles and new materials developments [M]. New York: Springer, 2001.
- [23] Watzman S J, Duine R A, Tserkovnyak Y, et al. Magnon-drag thermopower and Nernst coefficient in Fe, Co, and Ni [J]. *Physical Review B*, 2016, 94(14): 144407.
- [24] Nagaosa N, Sinova J, Onoda S, et al. Anomalous Hall effect [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2010, 82(2): 1539-1592.
- [25] Železný J, Yahagi Y, Gomez-Olivella C, et al. High-throughput study of the anomalous Hall effect [J]. *NPJ Computational Materials*, 2023, 9(1): 151.
- [26] Noky J, Gayles J, Felser C, et al. Strong anomalous Nernst effect in collinear magnetic Weyl semimetals without net magnetic moments [J]. *Physical Review B*, 2018, 97(22): 220405.
- [27] Koepnick K, Eschrig H. Full-potential nonorthogonal local-orbital minimum-basis band-structure scheme [J]. *Physical Review B*, 1999, 59(3): 1743-1757.
- [28] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18): 3865-3868.
- [29] Rahman G, Jan H U. Elastic and magnetic properties of cubic  $\text{Fe}_4\text{C}$  from first-principles [J]. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2018, 31(2): 405-411.
- [30] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential [J]. *Physical Review Letters*, 1982, 49(6): 405-408.
- [31] Xiao D, Chang M C, Niu Q. Berry phase effects on electronic properties [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2010, 82(3): 1959-2007.