中国科学: 物理学 力学 天文学 2023 年 第 53 卷 第 8 期: 287031
SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica physcn.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

观 点

# 热电材料之电子结构

付晨光*, 陈梦朝, 李艾燃, 朱铁军

浙江大学材料科学与工程学院, 硅及先进半导体材料全国重点实验室, 杭州 310058
*联系人, E-mail: chenguang_fu@zju.edu.cn

收稿日期: 2023-02-02; 接受日期: 2023-04-07; 网络出版日期: 2023-06-30
国家重点研发计划(编号: 2019YFA0704900)和国家自然科学基金(编号: 52101275)资助项目

**摘要** 基于赛贝克效应和能斯特效应的固体热电材料可以实现热能与电能的直接相互转换, 具有重要的应用价值, 例如在深空探测、固态制冷和精准控温等领域. 本征电子结构是决定固体材料热电转换效率的关键. 近年来, 能带结构调控策略的不断发展与新颖电子结构的不断发现为实现热电能量转换技术的进一步突破带来了新的契机.

**关键词** 热电材料, 拓扑材料, 电子结构, 赛贝克效应, 能斯特效应

**PACS:** 72.15.Jf, 72.15.Gd, 84.60.Rb, 75.47.-m

1820年, 丹麦物理学家奥斯特(Hans Christian Ørsted)发现了电流的磁效应, 即给一根平行放置于磁针上方的导线通电时磁针会发生偏转, 这一发现首次建立了电与磁之间的联系并迅速引起了科学界的研究兴趣, 这其中包括德国物理学家赛贝克(Thomas Johann Seebeck). 1821年, 赛贝克在研究两个不同导体组成的闭合回路时发现了一个有趣的现象: 即在回路的两个连接处施加不同温度时, 回路周边放置的磁针发生了偏转. 赛贝克最初认为这是温差引起的磁效应, 即"热磁效应"[1]. 1823年, 奥斯特基于对电和磁的深入认识将该效应解释为"热电效应", 并认为该效应表明电、磁和热之间存在着内在联系[2]. 这一系列发现开启了过去两百年有关固体材料热电效应的基础研究与应用实践, 而对于固体电子结构的认识、调控和发现是高效热电材料和器件不断被开发出来的源动力之一.

赛贝克效应描述了在纵向温度梯度驱动下材料在平行于温度梯度方向上可以产生电势的现象(图1(a))[3]. 与之相对, 在纵向温度梯度和垂直磁场共同作用下, 导体在横向方向上也可以产生电势, 这一现象被称为能斯特效应(图1(b))[4]. 基于赛贝克效应和能斯特效应的热电能量转换材料和器件可实现热能和电能之间的直接相互转换, 近年来受到了学术界和工业界的广泛关注. 由于所产生的热电势分别存在于与温度梯度相同和垂直的方向上, 基于这两种效应的热电器件在构型方面也存在显著差异. 基于赛贝克效应的热电器件通常由N型和P型半导体材料(热电臂)共同构成, 呈现出"热并联、电串联"的结构特征, 温度梯度与其所产生的电势位于同一方向(图1(c)). 在这种结构中, 电子和声子均

引用格式: 付晨光, 陈梦朝, 李艾燃, 等. 热电材料之电子结构. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2023, 53: 287031
Fu C G, Chen M Z, Li A R, et al. Electronic structure of thermoelectric materials (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2023, 53: 287031, doi: 10.1360/SSPMA-2023-0040

© 2023 《中国科学》杂志社 

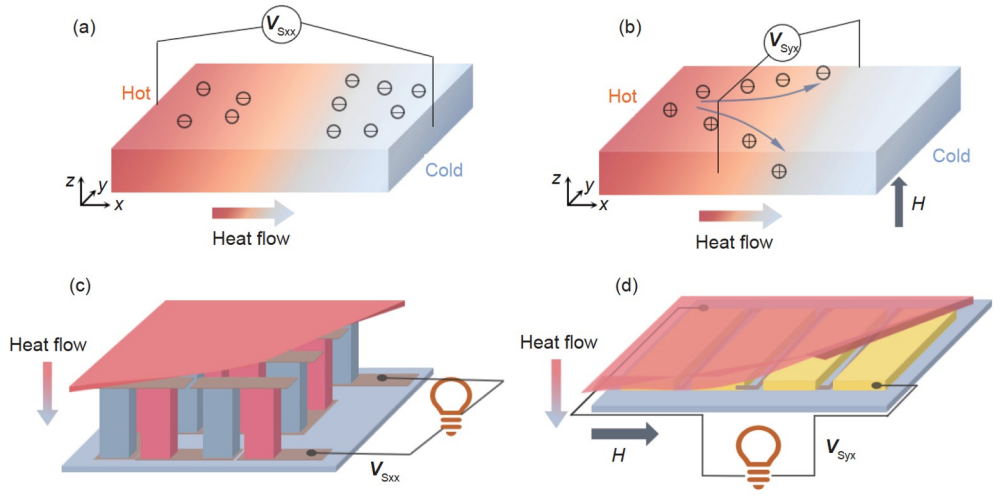



**图 1** (网络版彩图) (a) 赛贝克效应; (b) 能斯特效应; 基于赛贝克效应(c)和能斯特效应(d)的热电器件构型示意图

**Figure 1** (Color online) (a) Seebeck effect; (b) Nernst effect; (c), (d) schematic illustration of thermoelectric devices based on Seebeck effect and Nernst effect, respectively.

沿同一方向传输, 电热输运相互耦合、相互制约, 这是限制热电材料实现高性能的瓶颈所在[5]. 尽管转换效率仍待进一步提升, 基于赛贝克效应及其逆效应(帕尔贴效应)的热电器件已经在深空探测、精准控温、固态制冷等领域实现了广泛应用, 并在物联网、柔性可穿戴电子等新领域展现出应用潜力[6].

与之相对, 基于能斯特效应的热电器件由于转换效率较低且通常需要施加外磁场等因素, 基础研究和实际应用均较少. 在能斯特效应中, 纵向温度梯度诱导产生的热电势出现在横向方向上, 能斯特电压可随着内部材料横向长度的增加而增大. 基于能斯特效应的热电器件只需要一种导电类型的材料, 这更有利于器件的集成设计(图1(d)). 此外, 能斯特器件无需三维堆积的柱状结构, 因此具有较好的结构灵活性, 可以更好地覆盖不规整的曲面热源[7].

近年来, 热电与磁性的交叉研究逐渐引起了人们的兴趣, 一些与磁性相关的热电现象受到了较多关注, 例如, 磁场增强的赛贝克效应[8]、超顺磁增强的赛贝克效应[9]、自旋熵贡献的赛贝克效应[10]、磁性拓扑材料的能斯特效应[11]. 磁性的引入为热电材料的研究提供了新的自由度和可能性. 相对于赛贝克效应, 在非磁拓扑材料中实现大的能斯特效应往往需要施加大的磁场, 这增加了实际使用的难度. 近年来, 磁性拓扑材料的发现为摆脱高磁场的限制提供了可能, 得益于其独特的电子结构, 拓扑材料会产生奇异的输运现象. 如在一些有较低饱和磁化强度的铁磁材料和较大剩磁的材料体系中, 仅需低磁场(~1 T)或零磁场即可使材料产生较大的能斯特效应[12,13].

总而言之, 无论是赛贝克效应还是能斯特效应, 固体材料的电子结构是决定其热能与电能转换效率大小的关键. 本文将以固体材料的电子结构为主线, 简要回顾和展望基于赛贝克效应的热电材料发展历程, 并探讨新型拓扑材料的反常能斯特效应(ANE)及其热电潜力.

无量纲的热电优值$zT=S^2\sigma T/(\kappa_L+\kappa_e)$是衡量基于赛贝克效应的热电材料性能优劣的量度, 其中, $S$是赛贝克系数(温差电动势), $\sigma$是电导率, $T$是绝对温度, $\kappa_L$是晶格热导率和$\kappa_e$是电子热导率. 最早期的热电研究主要围绕矿物和金属材料等[1,14]. 金属材料具有极高的载流子浓度($10^{22}$–$10^{23}$ cm$^{-3}$), 其费米能级深入能带中, 因此具有优异的电导率; 但由于$\sigma$和$\kappa_e$之间通常服从Wiedemann-Franz定律, 因此不可避免地也会具有较大的电子热导率, 这是金属材料难以实现高$zT$的原因之一.

基于各向同性的单抛物带模型, 通过求解玻尔兹曼输运方程, 可得出电导率$\sigma$和赛贝克系数$S$的表达式:

$$\sigma=-\frac{16\pi e^2}{3h^3}\left(2m_b^*\right)^{1/2}\int_0^\infty \tau E^{3/2}\frac{\partial f_0}{\partial E}\mathrm{d}E, \tag{1}$$

$$S=\frac{1}{eT}\left(E_F-\frac{\int_0^\infty \tau E^{5/2}\frac{\partial f_0}{\partial E}\mathrm{d}E}{\int_0^\infty \tau E^{3/2}\frac{\partial f_0}{\partial E}\mathrm{d}E}\right), \tag{2}$$

其中$e$为元电荷, $h$为普朗克常数, $T$为绝对温度, $\tau$为弛豫时间, $m_b$*为单带有效质量, $f_0$为平衡状态时的费米狄拉克分布函数. 进一步, 将简约能量$\varepsilon=E/k_BT$和简约费米能级$\eta=E_F/k_BT$代入上式, 可得到$\sigma$和$S$关于$\varepsilon$的表达式:

$$\sigma_\varepsilon=-\frac{16\pi e^2(2m_b^*)^{1/2}(k_BT)^{3/2}}{3h^3}\tau\varepsilon^{3/2}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}, \tag{3}$$

$$S_\varepsilon=-\frac{k_B}{e}\frac{\varepsilon^{3/2}(\varepsilon-\eta)\tau\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}}{\int_0^\infty\varepsilon^{3/2}\tau\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon}, \tag{4}$$

其中$\tau=\tau_0\varepsilon^s$, $s$与热电材料的散射机制相关, $k_B$为玻尔兹曼常数, 室温以上, 高性能的热电半导体的电输运机制通常由声学波散射主导($s=-1/2$)[15]. 根据上述公式可给出归一化能谱电导率$\sigma_\varepsilon$和能谱赛贝克系数$S_\varepsilon$随简约费米能级$\eta$的变化关系(考虑$E_F$位于导带边的情况), 如图2所示. 可以看出, 随着费米能级深入能带($\eta$增大), $\sigma_\varepsilon$关于$\eta$的对称性增强(图2(a)), 因此$S_\varepsilon$关于$\eta$的中心对称性也增强. $\eta$以下的低能载流子对$S$的负贡献增大, $\eta$以上的高能载流子对$S$的正贡献减小(图2(b)), 最终$S$随$\eta$深入能带而单调减小. 这是半导体材料的$S$随掺杂浓度增大而降低的物理原因所在, 也同时可以解释为什么金属材料(可以理解为费米能级深入能带)通常具有低的$S$ (室温时通常在10 μV K$^{-1}$左右). 由于同时具有低的$S$和高的$\kappa_e$, 金属材料的$zT$往往较低. 相对于金属材料而言, 半导体材料的$E_F$通常位于导带或价带边缘, 其$S$可达几百μV K$^{-1}$且可通过掺杂实现进一步优化, 电导率适中且晶格热导率可通过合金化等手段得以有效抑制, 这是当前已开发的高性能热电材料均归属于半导体材料范畴的原因所在.

从$zT$表达式可以看出,要想提高材料的热电性能, 需要同时提高$S$和$\sigma$且降低$\kappa_e$和$\kappa_L$. 理论上, 材料的最小声子平均自由程不会低于其原子间距, 因此$\kappa_L$存在理论上的最小值. 实验上, 近年来提出的多尺度声子散射策略可以有效抑制热电材料的$\kappa_L$, 甚至可以接近于其理论最小值. 因此, 进一步提升热电材料的$zT$值主要取决于电功率因子PF (PF=$S^2\sigma$)能否得以有效改善. 对于半导体热电材料而言, 其PF和$zT$通常会随载流子浓度而呈现出倒U型曲线关系, 因此优化载流子浓度是实现其最大PF和峰值$zT$的第一步. 由于电子结构是决定材料PF峰值的关键所在, 当载流子浓度实现优化之后, 进一步提升其PF通常需要围绕电子结构调控而展开, 即能带工程[5,16].

20世纪90年代, 低维化电子结构思路的提出为热电研究带来了契机并在一定程度上促成了热电材料过往三十年的快速发展. 1993年, Hicks和Dresselhaus通过建模预测在$Bi_2Te_3$中实现低维化电子结构将会显著改善其热电性能, 如: 一维量子线[17]和二维量子阱(图3(a))[18]. 其基本思想是在低维化电子结构中电子态密度可在某些能量值处发生突变从而有望获得大的$S$[19–21]. 同样基于该思想, 研究人员通过在三维块体PbTe中掺入少量Tl, 在其电子结构中引入了共振态能级(图3(b))[22], 有效改变了PbTe的态密度分布并增大了$S$, 实现了$zT$值的提升. 除了畸变电子态密度以外,

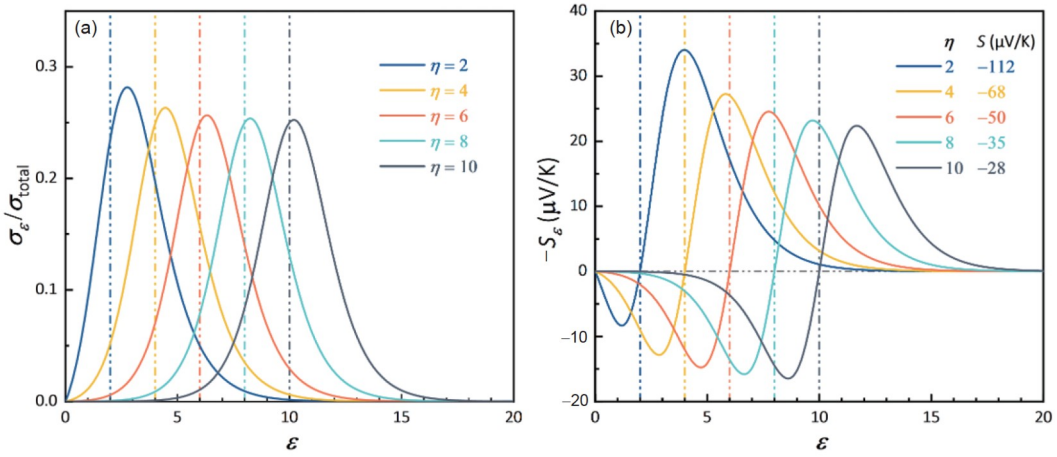



**图 2** (网络版彩图)归一化能谱电导率$\sigma_\varepsilon$ (a)和能谱赛贝克系数$S_\varepsilon$ (b)随简约费米能级$\eta$的变化

**Figure 2** (Color online) Normalized spectral conductivity $\sigma_\varepsilon$ (a) and spectral Seebeck coefficient $S_\varepsilon$ (b) changing with varied $\eta$.

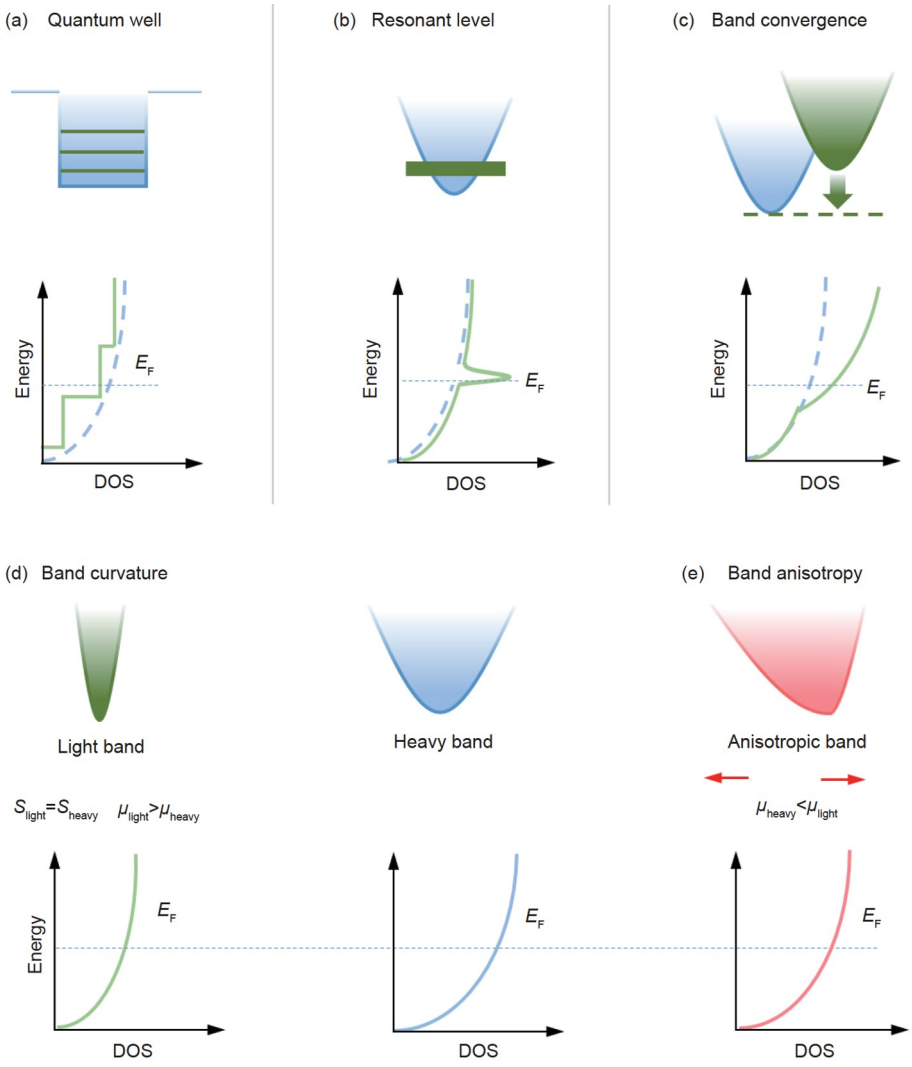



**图 3** (网络版彩图)热电半导体材料中的典型能带工程策略[16]. (a) 量子阱; (b) 共振态能级; (c) 能带收敛; (d) 调节能带曲率; (e) 能带各向异性

**Figure 3** (Color online) Typical energy band engineering strategies in thermoelectric semiconductors [16]. (a) Quantum well; (b) resonant level; (c) band convergence; (d) band curvature; (e) band anisotropy.

能带收敛(如图3(c)所示), 也是一种有效的能带工程策略, 被用于改善热电材料的电学性能和$zT$值, 例如, $PbTe_{1-x}Se_x$[23]和$MgSi_{1-x}Sn_x$[24]. 在声学声子主导载流子散射机制的情况下, 由式(4)可知, $S$的大小仅取决于费米能级的位置, 即$\eta$的大小. 这表明当$\eta$不变时单带有效质量$m_b$*的增大或减少不会显著影响$S$的大小. 因此, 当更多的能带收敛至$E_F$时, 在不造成显著电子谷间散射情况下, 能谷简并度$N_v$的增多会带来态密度有效质量$m_d$* ($m_d$*=$N_v^{2/3}m_b$*)和载流子浓度$n$的增加, 在保证$S$不变的同时使得$\sigma$和PF增大. 此外, 在$N_v$不变时, 通过成分调控降低材料的$m_b$*从而提升载流子迁移率$\mu$也被证明是一种有效实现PF提升的能带工程策略[25]. 如图3(d)所示, 当$E_F$位置不发生变化时, 提高能带的曲率可以在保证$S$不变的同时提升$\mu$, 从而有利于改善PF.

最近, 能带各向异性也被证实可以用于改善非立方晶格热电材料的PF (图3(e))[16]. 通过选择具有单一各向异性能谷的P型$Mg_3Sb_2$作为研究对象, 实验证实了当载流子沿轻带方向输运时其$\mu$约为沿重带方向时的3倍, 而且由于$S$相当, 这使得轻带方向的PF远大于重带方向. 这一结果表明对于具有能带各向异性的半导体材料, 促使载流子尽可能沿轻带方向输运有利于实现更高的PF.

近年来, 拓扑半金属由于具有非零贝利曲率和较大的ANE而开始受到了热电研究学者的关注. 基于是否具有净的自发磁化, 可以把拓扑半金属简单分为非磁性拓扑半金属和磁性拓扑半金属. 具有线性色散电子结构的非磁性拓扑半金属往往存在高迁移率载流子, 在外磁场作用下会表现出巨磁阻等现象. 当同时施加正交的温度梯度和外磁场时, 由于电子和空穴会偏转至相反的方向, 非磁性(拓扑)半金属也会表现出大的能斯特效应[26–33]. 例如, 狄拉克半金属$Cd_3As_2$的能斯特$z_NT$在2 T时可高达0.5[27]. 多晶外尔半金属NbP的能斯特功率因子在9 T下达30–80 μW cm$^{-1}$ K$^{-2}$[31,33]. 整体而言, 在非磁性拓扑半金属实现大的能斯特效应通常需要施加较大的外磁场, 这在一定程度上限制了其实际应用, 因此寻找在低磁场下即有较大能斯特响应的材料是非常重要的.

类似于霍尔效应与反常霍尔效应的关系, ANE通常被视为铁磁性材料中存在的能斯特效应[12,34]. 近年来, 随着磁性拓扑材料的发现[35–39], 其ANE也逐渐得到研究人员的诸多关注[12,40]. 不同于传统铁磁性材料, 磁性拓扑外尔半金属中的ANE并不依赖于材料的本征磁性, 而主要由本征贝利曲率贡献[41,42]. 外尔半金属中不同手性的外尔点可视为动量空间的磁单极子, 贝利曲率在此处发散, 当同时存在时间反演对称性和空间反演对称性时, 贝利曲率在整个布里渊区的积分为零. 而铁磁材料中原子磁矩的自发磁化会使得时间反演对称性破缺, 从而带来非零的贝利曲率和大的拓扑响应[43,44]. 反常能斯特热电导率$\alpha_{xy}^{\mathrm{A}}$和贝利曲率$\Omega_{\mathrm{B}}(k)$的关系如下[42]:

$$\alpha_{xy}^{\mathrm{A}}=\frac{ek_{\mathrm{B}}}{\hbar}\int_{\mathrm{BZ}}\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}s(k)\Omega_{\mathrm{B}}(k), \tag{5}$$

其中$\hbar$是约化普朗克常数, $s(k)=-f(k)\ln f(k)-[1-f(k)]\ln[1-f(k)]$, $f(k)$是费米狄拉克函数.

近年来, 研究人员已经发现了许多具有较大ANE的磁性拓扑材料: 包括反铁磁体系$Mn_3X$ ($X$=Sn, Ge)[45], $YbMnBi_2$[46], $YMn_6Sn_6$[47], 铁磁体系$Co_2MnGa$[13,40], $Co_3Sn_2S_2$[12,36,37], $Fe_3X$ ($X$=Ga, Al)[48], $UCo_{0.8}Ru_{0.2}Al$[49], $Fe_2YZ$ ($Y$=Co, Ni; $Z$=Al, Ga)[50], $Fe_3Sn$[51]等(图4)[12,26,31,40,45–53]. 整体而言, 非磁拓扑体系中的能斯特效应更大, 但往往需要较大的外加磁场以实现大的拓扑响应. 磁性拓扑材料的ANE尽管较小, 但是由于自发磁化的存在, 通常只需要较低的磁场(~1 T)甚至零磁场即可实现, 具有研究和实际应用的双重优势. 未来, 寻找具有更大贝利曲率的磁性拓扑材料是研究的主要方向. 由于本征贝利曲率可以通过第一性原理计算严格求解, 这使得通过高通量计算筛选从而指导实验发现高ANE的材料成为可能. 研究人

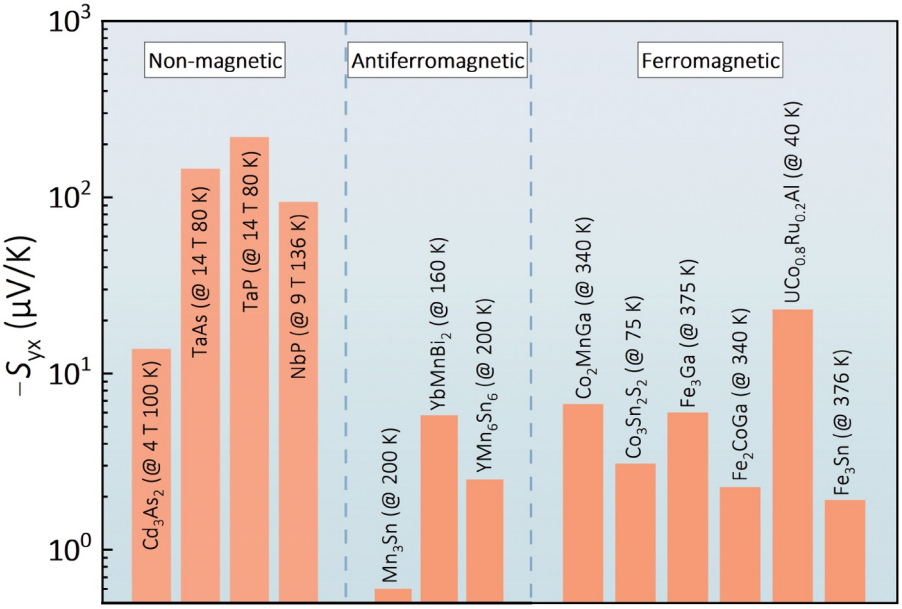



**图 4** (网络版彩图)一些非磁性和磁性(拓扑)材料展现出可观的能斯特热电势[12,26,31,40,45–53]

**Figure 4** (Color online) Decent Nernst thermopower reported in some non-magnetic and magnetic (topological) materials [12,26,31,40,45–53].

员预测了部分磁性Heusler化合物中由于多重镜面对称可以使其电子结构中产生大的贝利曲率, 从而可以实现大的拓扑响应, 带来大的ANE[54]. 实验上, 由于Heusler化合物中容易存在原子无序, 研究人员在制备的Fe基Heusler化合物$Fe_2YZ$中发现了$Y$与$Z$原子之间存在较强的无序占位, 这使得本征对称性较低的$Fe_2YZ$化合物在$Y$与$Z$原子的随机占位后, 结构有了更多的对称镜面, 从而引起$E_F$附近能带贝利曲率分布的改变, 提升了其能斯特热电势[50]. 这一结果表明可以通过合适的实验手段调节磁性拓扑半金属的电子结构进而改善其贝利曲率, 有利于开发具有大ANE的磁性拓扑材料.

基于赛贝克效应的热电材料研究已历经两个世纪, 而对于电子结构及其与热电输运关联的认识是推动高效半导体热电材料发现的关键, 通过能带结构调控改善其电功率因子则是实现半导体材料热电优值进一步突破的重要手段. 此外, 近些年发现的拓扑材料由于具有线性色散、大的贝利曲率等独特电子结构特征, 可实现大的能斯特响应, 这使得横向热电效应得到了研究人员越来越多的关注. 总而言之, 无论是基于赛贝克效应还是能斯特效应, 材料的本征电子结构及其调控对于实现高效热能与电能转换至关重要, 这些方面的研究目前仍在进行中, 能带调控策略的发展与新颖电子结构的发现将为热电能量转换技术的突破带来新的契机.

## 参考文献


1 Seebeck T J. Ueber die magnetische polarisation der metalle und erze durch temperatur-differenz. Ann Phys, 1826, 82: 133–160
2 Ørsted H C. Nouvelles expériences de M. Seebeck sur les actions électromagnetiques. Ann Chim Phys, 1823, 22: 199–201
3 Goldsmid H J. Introduction to Thermoelectricity. Heidelberg: Springer, 2010
4 Ettingshausen A V, Nernst W. Ueber das Auftreten electromotorischer Kräfte in Metallplatten, welche von einem Wärmestrome durchflossen werden und sich im magnetischen Felde befinden. Ann Phys Chem, 1886, 265: 343–347
5 Zhu T, Liu Y, Fu C, et al. Compromise and synergy in high-efficiency thermoelectric materials. Adv Mater, 2017, 29: 1605884
6 Hu H, Wang Y, Fu C, et al. Achieving metal-like malleability and ductility in $Ag_2Te_{1-x}S_x$ inorganic thermoelectric semiconductors with high mobility. Innovation, 2022, 3: 100341
7 Mizuguchi M, Nakatsuji S. Energy-harvesting materials based on the anomalous Nernst effect. Sci Tech Adv Mater, 2019, 20: 262–275
8 Fu C, Sun Y, Felser C. Topological thermoelectrics. APL Mater, 2020, 8: 040913
9 Zhao W, Liu Z, Sun Z, et al. Superparamagnetic enhancement of thermoelectric performance. Nature, 2017, 549: 247–251
10 Sun P, Kumar K R, Lyu M, et al. Generic Seebeck effect from spin entropy. Innovation, 2021, 2: 100101
11 Narang P, Garcia C A C, Felser C. The topology of electronic band structures. Nat Mater, 2021, 20: 293–300
12 Guin S N, Vir P, Zhang Y, et al. Zero-field Nernst effect in a ferromagnetic kagome-lattice weyl-semimetal $Co_3Sn_2S_2$. Adv Mater, 2019, 31: 1806622
13 Sakai A, Mizuta Y P, Nugroho A A, et al. Giant anomalous Nernst effect and quantum-critical scaling in a ferromagnetic semimetal. Nat Phys, 2018, 14: 1119–1124
14 Born H J, Legvold S, Spedding F H. Low-temperature thermoelectric power of the rare-earth metals. J Appl Phys, 1961, 32: 2543–2549
15 Böttger P H M, Pomrehn G S, Snyder G J, et al. Doping of p-type ZnSb: Single parabolic band model and impurity band conduction. Phys Status Solidi A, 2011, 208: 2753–2759
16 Li A, Hu C, He B, et al. Demonstration of valley anisotropy utilized to enhance the thermoelectric power factor. Nat Commun, 2021, 12: 5408
17 Hicks L D, Dresselhaus M S. Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional conductor. Phys Rev B, 1993, 47: 16631–16634
18 Hicks L D, Dresselhaus M S. Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit. Phys Rev B, 1993, 47: 12727–12731
19 Dresselhaus M S, Chen G, Tang M Y, et al. New directions for low-dimensional thermoelectric materials. Adv Mater, 2007, 19: 1043–1053
20 Hicks L D, Harman T C, Sun X, et al. Experimental study of the effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit. Phys Rev B, 1996, 53: R10493–R10496
21 Koga T, Cronin S B, Dresselhaus M S, et al. Experimental proof-of-principle investigation of enhanced $Z_{3D}T$ in (001) oriented Si/Ge superlattices. Appl Phys Lett, 2000, 77: 1490–1492
22 Heremans J P, Jovovic V, Toberer E S, et al. Enhancement of thermoelectric efficiency in PbTe by distortion of the electronic density of states.

Science, 2008, 321: 554–557
23 Pei Y, Shi X, LaLonde A, et al. Convergence of electronic bands for high performance bulk thermoelectrics. Nature, 2011, 473: 66–69
24 Liu W, Tan X, Yin K, et al. Convergence of conduction bands as a means of enhancing thermoelectric performance of n-type $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ solid solutions. Phys Rev Lett, 2012, 108: 166601
25 Fu C, Zhu T, Liu Y, et al. Band engineering of high performance p-type FeNbSb based half-Heusler thermoelectric materials for figure of merit $zT$> 1. Energy Environ Sci, 2015, 8: 216–220
26 Liu E K, Zhang S. Topologically enhanced zero-field transverse Nernst thermoelectric effect in magnetic topological semimetals (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2019, 49: 127001; [刘恩克, 张伸. 拓扑增强的反常能斯特横向热电效应. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 127001]
27 Xiang J S, Hu S L, Lyu M, et al. Large transverse thermoelectric figure of merit in a topological Dirac semimetal. Sci China-Phys Mech Astron, 2019, 63: 237011
28 Fu C, Guin S N, Scaffidi T, et al. Largely suppressed magneto-thermal conductivity and enhanced magneto-thermoelectric properties in $PtSn_4$. Research, 2020, 2020: 4643507
29 Li P, Qiu P, Xu Q, et al. Colossal Nernst power factor in topological semimetal $NbSb_2$. Nat Commun, 2022, 13: 7612
30 Chen Z, Zhang X, Ren J, et al. Leveraging bipolar effect to enhance transverse thermoelectricity in semimetal $Mg_2Pb$ for cryogenic heat pumping. Nat Commun, 2021, 12: 3837
31 Fu C, Guin S N, Watzman S J, et al. Large Nernst power factor over a broad temperature range in polycrystalline Weyl semimetal NbP. Energy Environ Sci, 2018, 11: 2813–2820
32 Feng T, Wang P, Han Z, et al. Large transverse and longitudinal magneto-thermoelectric effect in polycrystalline nodal-line semimetal $Mg_3Bi_2$. Adv Mater, 2022, 34: 2200931
33 Liu W, Wang Z, Wang J, et al. Weyl semimetal states generated extraordinary quasi-linear magnetoresistance and Nernst thermoelectric power factor in polycrystalline NbP. Adv Funct Mater, 2022, 32: 2202143
34 Pu Y, Chiba D, Matsukura F, et al. Mott relation for anomalous Hall and Nernst effects in $Ga_{1-x}Mn_xAs$ ferromagnetic semiconductors. Phys Rev Lett, 2008, 101: 117208
35 Liu E, Sun Y, Kumar N, et al. Giant anomalous Hall effect in a ferromagnetic kagome-lattice semimetal. Nat Phys, 2018, 14: 1125–1131
36 Zeng Q Q, Gu G X, Shi G, et al. On the anomalous low-resistance state and exceptional Hall component in hard-magnetic Weyl nanoflakes. Sci China-Phys Mech Astron, 2021, 64: 287512
37 Liu C, Shen J L, Gao J C, et al. Spin excitations and spin wave gap in the ferromagnetic Weyl semimetal $Co_3Sn_2S_2$. Sci China-Phys Mech Astron, 2021, 64: 217062
38 Wang P, Ge J, Li J, et al. Intrinsic magnetic topological insulators. Innovation, 2021, 2: 100098
39 Chen X Q, Liu J, Li J. Topological phononic materials: Computation and data. Innovation, 2021, 2: 100134
40 Guin S N, Manna K, Noky J, et al. Anomalous Nernst effect beyond the magnetization scaling relation in the ferromagnetic Heusler compound $Co_2MnGa$. NPG Asia Mater, 2019, 11: 16
41 Xiao D, Chang M C, Niu Q. Berry phase effects on electronic properties. Rev Mod Phys, 2010, 82: 1959–2007
42 Xiao D, Yao Y, Fang Z, et al. Berry-phase effect in anomalous thermoelectric transport. Phys Rev Lett, 2006, 97: 026603
43 Boona S R, Myers R C, Heremans J P. Spin caloritronics. Energy Environ Sci, 2014, 7: 885–910
44 Miyasato T, Abe N, Fujii T, et al. Crossover behavior of the anomalous Hall effect and anomalous Nernst effect in itinerant ferromagnets. Phys Rev Lett, 2007, 99: 086602
45 Ikhlas M, Tomita T, Koretsune T, et al. Large anomalous Nernst effect at room temperature in a chiral antiferromagnet. Nat Phys, 2017, 13: 1085–1090
46 Pan Y, Le C, He B, et al. Giant anomalous Nernst signal in the antiferromagnet $YbMnBi_2$. Nat Mater, 2022, 21: 203–209
47 Roychowdhury S, Ochs A M, Guin S N, et al. Large room temperature anomalous transverse thermoelectric effect in kagome antiferromagnet $YMn_6Sn_6$. Adv Mater, 2022, 34: 2201350
48 Sakai A, Minami S, Koretsune T, et al. Iron-based binary ferromagnets for transverse thermoelectric conversion. Nature, 2020, 581: 53–57
49 Asaba T, Ivanov V, Thomas S M, et al. Colossal anomalous Nernst effect in a correlated noncentrosymmetric kagome ferromagnet. Sci Adv, 2021, 7: eabf1467

50 Mende F, Noky J, Guin S N, et al. Large anomalous Hall and Nernst effects in high Curie-temperature iron-based Heusler compounds. Adv Sci, 2021, 8: 2100782

51 Chen T, Minami S, Sakai A, et al. Large anomalous Nernst effect and nodal plane in an iron-based kagome ferromagnet. Sci Adv, 2022, 8: eabk1480

52 Jia Z, Li C, Li X, et al. Thermoelectric signature of the chiral anomaly in $Cd_3As_2$. Nat Commun, 2016, 7: 13013

53 Caglieris F, Wuttke C, Sykora S, et al. Anomalous Nernst effect and field-induced Lifshitz transition in the Weyl semimetals TaP and TaAs. Phys Rev B, 2018, 98: 201107

54 Noky J, Zhang Y, Gooth J, et al. Giant anomalous Hall and Nernst effect in magnetic cubic Heusler compounds. npj Comput Mater, 2020, 6: 77

# Electronic structure of thermoelectric materials

FU ChenGuang*, CHEN MengZhao, LI AiRan & ZHU TieJun

*State Key Laboratory of Silicon and Advanced Semiconductor Materials, School of Materials Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China*

Solid-state thermoelectric materials based on the Seebeck effect and Nernst effect can realize the direct conversion between heat and electricity, thereby exhibiting important applications in various fields, including but not limited to deep space exploration, solid-state refrigeration, and precise temperature control. The intrinsic electronic structure is the key to determining the conversion efficiency of thermoelectric materials. The development of band structure engineering and the discovery of novel electronic structures will provide great opportunities for further breakthroughs in thermoelectric energy conversion technology.

**thermoelectric materials, topological materials, electronic band structures, Seebeck effect, Nernst effect**

**PACS:** 72.15.Jf, 72.15.Gd, 84.60.Rb, 75.47.-m

**doi:** 10.1360/SSPMA-2023-0040