**Résumé**

Les dispositifs thermoélectriques à l'état solide offrent la possibilité d'exploiter la chaleur résiduelle des moteurs et des centrales électriques et de la convertir en énergie électrique. L'un des plus grands défis dans le développement des systèmes de matériaux thermoélectriques est de trouver de nouveaux matériaux thermoélectriques avec des figures de mérite *ZT* élevées. Dans cette étude, Dabord nous avons présenté une analyse approfondie des propriétés structurelles, élastiques, électroniques, magnétiques et thermoélectriques du composé *IrFeSi* en utilisant des calculs de premiers principes en combinaison avec le code BoltzTraP (seconds principes). Les résultats montrent que *IrFeSi* est mécaniquement, dynamiquement et thermodynamiquement stable dans la structure cubique *F-43m*. Les résultats indiquent également que *IrFeSi* est un matériau ferromagnétique demi-métallique avec de bonnes propriétés thermoélectriques. Ensuite, nous avons calculé les propriétés structurelles, électroniques et thermoélectriques des semi-conducteurs $PbSe_{1-x}S_x$ *(x=0, 0.25, 0.50, 0.75 et 1)* en appliquant la théorie de la fonction de densité dans une méthode d'onde plane augmentée linéarisée à potentiel complet (*FP-LAPW*). Les résultats des paramètres structurels sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et théoriques. Les résultats électroniques obtenus montrent que le matériau $PbSe_{1-x}S_x$ est un semi-conducteur à bande interdite étroite. De plus, les propriétés thermoélectriques sont étudiées sur la base de la solution entièrement itérative de l'équation de transport de Boltzmann. Les $PbSe_{1-x}S_x$ présentent un facteur de mérite élevé, ce qui indique que nos matériaux sont des candidats prometteurs pour les applications thermoélectriques.

**Mots clés** : DFT ; semi-Heusler; chalcogénure de plomb; propriétés structurales; propriétés électroniques; propriétés thermoélectriques..

**Abstract**

Solid-state thermoelectric devices offer the possibility of harnessing waste heat from motors and power plants and converting it into electrical energy. One of the biggest challenges in the development of thermoelectric material systems is to find new thermoelectric materials with high figures of merit *ZT*. In this study, we first presented a profound analysis of the structural, elastic, electronic, magnetic and thermoelectric properties of the *IrFeSi* compound using first-principles calculations in combination with the BoltzTraP code (second-principles). The results show that *IrFeSi* is mechanically, dynamically and thermodynamically stable in the *F-43m* cubic structure. The results also indicate that *IrFeSi* is a ferromagnetic half-metallic material with good thermoelectric properties. Next, we calculated the structural, electronic and thermoelectric properties of $PbSe_{1-x}S_x$ *(x=0, 0.25, 0.50, 0.75 and 1)* semiconductors by applying density function theory in a full potential linearized augmented plane wave method (*FP-LAPW*). The results of the structural parameters are in good agreement with the experimental and theoretical values. The obtained electronic results show that the $PbSe_{1-x}S_x$ material is a narrow band gap semiconductor. Moreover, the thermoelectric properties are studied on the basis of the fully iterative solution of the Boltzmann transport equation. $PbSe_{1-x}S_x$ exhibits a high figure of merit, indicating that our materials are promising candidates for thermoelectric applications.

**Keywords**: DFT; half-Heusler; Lead chalcogenide; structural properties; electronic properties; thermoelectric properties.

**الملخص**

توفر الأجهزة الكهروحرارية ذات الحالة الصلبة القدرة على تسخير الحرارة المهدرة من المحركات ومحطات الطاقة وتحويلها إلى طاقة كهربائية. يتمثل أحد أكبر التحديات في تطوير أنظمة المواد الكهروحرارية في العثور على مواد كهروحرارية جديدة ذات جودة عالية *ZT*. في هذه الدراسة ، قدمنا أولاً تحليلًا متعمقًا للخصائص الهيكلية والمرنة والإلكترونية والمغناطيسية والكهروحرارية لمركب *IrFeSi* باستخدام حسابات المبادئ الأولى بالاشتراك مع كود BoltzTraP (المبادئ الثانية). أظهرت النتائج أن *IrFeSi* مستقر ميكانيكيًا وديناميكيًا وديناميكيًا حراريًا في هيكل F-43m المكعب. كما أشارت النتائج إلى أن IrFeSi عبارة عن مادة حديدية مغناطيسية شبه معدنية ذات خواص كهروحرارية جيدة. بعد ذلك ، قمنا بحساب الخصائص الهيكلية والإلكترونية والكهروحرارية لأشباه الموصلات $PbSe_{1-x}S_x$ حيث $x= 0, 025, 0.50,0.75, 1$ من خلال تطبيق نظرية دالة الكثافة في طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية عند الإمكانات الكاملة (*FP-LAPW*). تتوافق نتائج المعلمات الهيكلية مع القيم التجريبية والنظرية بشكل جيد. تظهر النتائج الإلكترونية التي تم الحصول عليها أن مادة $PbSe_{1-x}S_x$ عبارة عن أشباه موصلات ذات فجوة نطاق ضيقة. بالإضافة إلى ذلك ، يتم فحص الخصائص الكهروحرارية بناءً على الحل التكراري الكامل لمعادلة النقل Boltzmann. يُظهران ل $PbSe_{1-x}S_x$ رقمًا عاليًا من الجدارة ، مما يشير إلى أن موادنا مرشحة واعدة للتطبيقات الكهروحرارية.

**الكلمات الرئيسية**

DFT. نصف Heusler، كالكوجينيد الرصاص، الخصائص الهيكلية، الخصائص الإلكترونية، الخصائص الكهروحرارية.