**Résumé**

Les nitrures de groupe III sont largement utilisés dans les applications optoélectroniques. Cependant, l'efficacité externe des diodes électroluminescentes à base de nitrure III dans la région des UV profonds est extrêmement faible par rapport à celles émettant dans la région visible. L’addition de certain pourcentage de scandium dans la structure hexagonale de nitrure d’aluminium permet de résoudre ce type de problème. Des calculs théoriques prédisent que l'alliage de ScN peut produire des films semi-conducteurs Scx Al 1-x N à structure wurtzite avec des bandes interdites directes, et des bonnes propriétés optiques dans la région UV.

Un grand intérêt pour calculer les propriétés optiques de matériau composite Sc-AlN. Pour cela, on trouve plusieurs théories utilisées pour modéliser ces propriétés, nous avons présenté la méthode des éléments finis, la théorie de Rayleigh-Rice, et la théorie des milieux effectifs (EMA).

Ce travail consiste à simuler les paramètres Sc-AlN afin d’améliorer les propriétés d’une diode électroluminescente. Pour cela, nous avons mis en œuvre le logiciel GPVDM. Nous avons fourni des efforts considérables pour adapter nos exigences au logiciel et aboutir à un résultat optimal possible pour le matériau utilisé. Les résultats obtenus étaient satisfaisants et en accord avec la littérature.

**Abstract**

Group III nitrides are widely used in optoelectronic applications. However, the external efficiency of III-nitride-based light emitting diodes in the deep-UV region is extremely low compared to those emitting in the visible region. The addition of a certain percentage of scandium in the hexagonal structure of aluminum nitride makes it possible to solve this type of problem. Theoretical calculations predict that the ScN alloy can produce Scx Al 1-x N semiconductor films of wurtzite structure with direct bandgaps, and good optical properties in the UV region.

Great interest in the calculation of the optical properties of the Sc-AlN composite material. For this, we find several theories used to model these properties, we have presented the finite element method, the Rayleigh-Rice theory, and the theory of effective media (EMA). This work consists of simulating Sc-AlN parameters in order to improve the properties of a light emitting diode. For this, we have implemented the GPVDM software. We have made considerable efforts to adapt our requirements to the software and achieve the best possible result for the material used. The results obtained were satisfactory and in agreement with the literature.

**ملخص**

تستخدم نيتريدات المجموعة الثالثة على نطاق واسع في التطبيقات الإلكترونية الضوئية. مع ذلك، فإن الكفاءة الخارجية لثنائيات النيتريد الباعثة للضوء في منطقة الأشعة فوق البنفسجية العميقة منخفضة للغاية مقارنة بتلك التي تنبعث في المنطقة المرئية. إن إضافة نسبة معينة من سكانديوم في الهيكل السداسي لنتريد الألومنيوم يسمح من حل هذا النوع من المشاكل. هناك حسابات نظرية تتنبأ بان سبيكة نتريد السكانديوم يمكن ان تنتج اغشية شبه ناقلة لنتريد الالمنيوم -سكانديوم لهيكل wurtziteبفجوات نطاق مباشرة وبخصائص بصرية جيدة في منطقة الاشعة فوق بنفسجي . هناك اهتمام كبير في حساب الخصائص البصرية للمواد المركبة لنتريد الالمنيوم-سكانديوم، لذلك نجد العديد من النظريات المستخدمة لنمذجة هذه الخصائص، لهذا قدمنا طريقة العناصر المحدودة، نظرية رايلي رايس ونظرية الوسائط الفعالة. تم تنفيذ هذا العمل عن طريق المحاكاة، فهو يتألف من محاكاة اعدادات نتريد الالمنيوم –سكانديوم وذلك من اجل تحسين خصائص الصمام الثنائي الباعث للضوء ، لهذا قمنا بتنفيذ برنامج . GPvdmلقد بذلنا جهد كبير لتنفيذ هذا البرنامج وتحقيق أفضل نتيجة ممكنة للمواد المستخدمة، فلقد كانت النتائج المتحصل عليها مرضية كما هي متوافقة مع المراجع الأخرى.

**Mots clés :** Semi-conducteur du groupe III-V, Sc-AlN, Dispositifs Optoélectroniques, LED, Domain UV, Modélisation des propriétés optiques, Gpvdm