

Релаксация с излучением фононов возбужденных состояний донора висмута в одноосно-деформированном кремнии

© В.В. Цыпленков[†], Р.Х. Жукавин, В.Н. Шагин

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 12 августа 2013 г. Принята к печати 22 января 2014 г.)

Рассчитаны низкотемпературные темпы релаксации возбужденных состояний доноров висмута при излучении фононов в одноосно-деформированном в кристаллографическом направлении [100] кристалле кремния. Рассмотрены состояния, принадлежащие как нижним (2Δ), так и верхним (4Δ) долинам зоны проводимости кремния. Показана возможность инверсии населенностей состояний донора висмута в верхних (4Δ) долинах зоны проводимости кремния при оптической накачке.

1. Введение

Данная работа имеет прямое отношение к исследованию источников терагерцового стимулированного излучения на внутрицентровых переходах оптически возбуждаемых мелких доноров (сурьма Sb, фосфор P, мышьяк As, висмут Bi) в кремнии [1]. Для интерпретации полученных к настоящему времени экспериментальных данных, понимания механизма формирования требуемой населенности возбужденных состояний и оценки возможных значений сечения усиления требуется количественный анализ процессов электрон-фононного взаимодействия в такой системе. Известно, что релаксация возбужденных состояний мелких доноров в кремнии определяется как внутривалинными, так и междолинными процессами электрон-фононного взаимодействия. Причем междолинные процессы, как показывает опыт, играют определяющую роль в формировании инвертированного распределения носителей по состояниям кулоновского центра, а следовательно, в большой степени определяют зависимость параметров стимулированного излучения от деформации кремниевого кристалла.

Впервые количественная оценка темпов междолинных переходов между состояниями мелких доноров в кремнии с излучением фононов проведена в работе [2]. Эта работа посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию двух фононной спин-решеточной релаксации для мелких доноров в кремнии, и в ней большое внимание уделено процессу релаксации состояний донора при безызлучательных переходах между долинами (междолинное рассеяние) с участием фононов. Правда, рассматривались лишь так называемые g -переходы, т.е. переходы между долинами, лежащими на одной оси в одном из $\{100\}$ направлений зоны проводимости кремния. Влиянием f -переходов между долинами, лежащими на разных $\{100\}$ осях кристалла, в работе [2] пренебрегалось. Позже аналогичный расчет темпов g -переходов с излучением фононов проводился в работе [3], но он затрагивал лишь донор фосфора в недеформированном кремнии. Попытка более строгого подхода, связанного с *ab initio* расчетом деформационного

потенциала электрон-фононного взаимодействия, была предпринята в работе [4]. На основе метода функционала плотности в базисе плоских волн возмущения, создаваемого фононом с произвольным значением волнового вектора (DFPT), было показано, что для волновых векторов фононов ориентированных по осям симметрии кристалла, электрон-фононное взаимодействие должно быть подавлено, а время жизни состояния $2\tau_0$ близко 10^{-9} с. Однако такой вывод противоречит данным измерений [5], которые дают время жизни $\sim 10^{-10}$ с. Не исключено, что искажение кристаллической решетки кремния в окрестности центра легирования снимает симметричные запреты и увеличивает темп релаксации.

В наших расчетах мы используем обычный (ср. [2,3]) подход и опираемся на известные по публикации [6] константы междолинных деформационных потенциалов, которые получены на основе сопоставления расчетов методом Монте–Карло и экспериментальных данных по подвижности электронов зоны проводимости в кремнии. Предполагается, что такой подход позволит достаточно хорошо описать зависимость темпов релаксации состояний донора от деформации кристалла, что и нужно в контексте статьи, а константу деформационного потенциала можно при необходимости уточнить, опираясь на данные измерений. Особый интерес к донору висмута объясняется данными измерений спектра стимулированного излучения. Они показали, что в отличие от других доноров пятой группы в излучении этого центра при [100] деформации сжатия кристалла доминируют состояния верхних 4Δ -долин [1].

Авторы выражают надежду, что представленные далее результаты расчетов зависимости от деформации сжатия по оси [100] темпов релаксации различных состояний донора висмута помогут объяснить необычные характеристики стимулированного излучения такого центра при его оптическом возбуждении.

2. Внутрицентровая релаксация

Релаксация возбужденных состояний мелких доноров в кремнии определяется, как было сказано, внутривалинными и междолинными процессами электрон-фононного

[†] E-mail: Tsyplenkov1@yandex.ru

Таблица 1. Темпы внутривалидных внутрицентровых переходов при взаимодействии с продольными W_L и поперечными W_T акустическими фононами [15]

Переход	$W_L, 10^{10} \text{ c}^{-1}$	$W_T, 10^{10} \text{ c}^{-1}$	Переход	$W_L, 10^{10} \text{ c}^{-1}$	$W_T, 10^{10} \text{ c}^{-1}$
$2p_0 \rightarrow 1s$	0.19	0.002	$3p_0 \rightarrow 2p_{\pm 1}$	0.08	0.052
$2s \rightarrow 2p_0$	2.2	0.12	$3p_0 \rightarrow 2s$	0.38	0.08
$2s \rightarrow 1s$	0.56	0.015	$3p_0 \rightarrow 2p_0$	2.4	0.048
$2p_{\pm} \rightarrow 2s$	0.38	0.08	$3p_0 \rightarrow 1s$	0.014	0
$2p_{\pm} \rightarrow 2p_0$	1.4	0.04	$3p_{\pm} \rightarrow 3p_0$	0.01	0.052
$2p_{\pm} \rightarrow 1s$	0.001	0	$3p_{\pm} \rightarrow 2p_{\pm}$	0.38	0.03

взаимодействия. Вычисления темпов внутривалидной релаксации наиболее важных состояний, описываемых в приближении кулоновского потенциала примеси, при излучении длинноволновых акустических фононов проведены в работе [7]. Далее в табл. 1 приведены их значения.

В данной работе не будем останавливаться на методике расчета темпов междолинных переходов с излучением фононов, она подробно описана в работах [8,9]. На рис. 1 представлена схема уровней донора висмута в зависимости от междолинного расщепления Δ (междолинное расщепление зависит линейно от прикладываемого давления; давление в 1 кбар приблизительно соответствует междолинному расщеплению 8.5 мэВ) с обозначением состояний, используемых в данной работе.

Для описания состояний донорного центра использовался метод эффективных масс, а в качестве огибающих

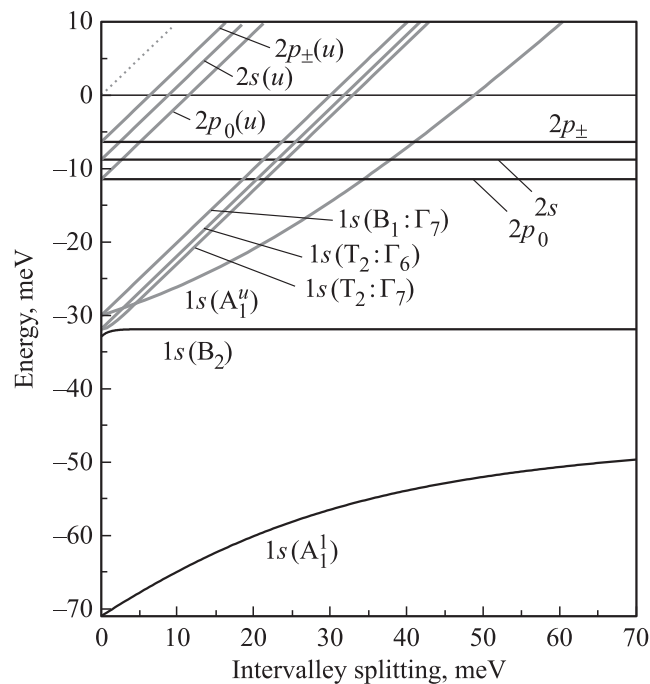


Рис. 1. Зависимости энергии уровней донора висмута в кремнии от междолинного расщепления, образующегося в результате одноосного сжатия в направлении $\{100\}$. Значком u отмечены состояния, принадлежащие верхним долинам зоны проводимости кремния.

волновых функций примесных состояний были выбраны пробные волновые функции, в которых параметры, определяющие их локализацию в пространстве являются подгоночными [10,11]. Опуская далее все выкладки [3,8], приведем выражение для матричного элемента и вероятности перехода с излучением междолинных фононов между состояниями n и m :

$$M_{nm}^{lj} = \sqrt{\frac{\hbar(D_l k)^2}{2\rho V \omega_q}} \int F_n^{l*}(r) F_m^j(r) e^{i(k-k'-g-q)r} dr, \quad (1)$$

$$P_{nm} = K_{f,g} \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |M_{nm}^{lj}|^2 \delta(W_{nm} - \hbar\omega_q). \quad (2)$$

Здесь l и j — номера долин, между которыми происходит переход, ω_q — частота излучаемого (поглощаемого) фонона, ρ — плотность материала, V — его объем, k и k' — начальный и конечный импульс, $D_l k$ — междолинная константа деформационного потенциала, $F_m^j(r)$ — огибающая волновой функции m -го состояния в j -ой долины, W_{nm} — энергия перехода, $K_{f,g}$ — коэффициент, учитывающий распределение начального и конечного состояний перехода по долинам кремния для f - и g -переходов. Значения этих констант для перехода между состояниями с различными симметриями рассчитываются по формуле

$$K_f = (\alpha_3\beta_5 + \alpha_6\beta_4)^2 + (\alpha_5\beta_3 + \alpha_4\beta_6)^2 + (\alpha_3\beta_6 + \alpha_5\beta_4)^2 + (\alpha_6\beta_3 + \alpha_4\beta_5)^2 + (\alpha_1\beta_3 + \alpha_4\beta_2)^2 + (\alpha_3\beta_1 + \alpha_2\beta_4)^2 + (\alpha_1\beta_4 + \alpha_3\beta_2)^2 + (\alpha_4\beta_1 + \alpha_2\beta_3)^2 + (\alpha_1\beta_5 + \alpha_6\beta_2)^2 + (\alpha_5\beta_1 + \alpha_2\beta_6)^2 + (\alpha_1\beta_6 + \alpha_5\beta_2)^2 + (\alpha_6\beta_1 + \alpha_2\beta_5)^2, \\ K_g = (\alpha_1\beta_2)^2 + (\alpha_2\beta_1)^2 + (\alpha_3\beta_4)^2 + (\alpha_4\beta_3)^2 + (\alpha_5\beta_6)^2 + (\alpha_6\beta_5)^2. \quad (3)$$

(Здесь β то же, что и α , но для другого состояния междолинного перехода). Константы $D_l k$ взаимодействия с различными типами фононов брались из [6], их значения приведены в табл. 2. В табл. 3 собраны формулы для коэффициентов $(\alpha_1, \dots, \alpha_6)$, задающих распределение состояний доноров по долинам в деформированном

Таблица 2. Значения междолинных деформационных потенциалов взаимодействия электронов с различными типами фононов в кремнии [18]

Тип фононов	эВ/см
TA-g	$0.5 \cdot 10^8$
LA-g	$0.8 \cdot 10^8$
LO-g	$11 \cdot 10^8$
TA-f	$0.3 \cdot 10^8$
LA-f	$2 \cdot 10^8$
TO-f	$2 \cdot 10^8$

кремнии в направлении (100) [10,12]. Коэффициенты c и d даются следующими выражениями:

$$c = \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 - \frac{2 - \delta}{\sqrt{\delta^2 - 4\delta + 36}} \right)},$$

$$d = \sqrt{\frac{1}{8} \left(1 + \frac{2 - \delta}{\sqrt{\delta^2 - 4\delta + 36}} \right)}. \quad (4)$$

($\delta = \Delta/\Delta_c$, где Δ — междолинное расщепление, $\Delta_{so} \approx 1$ мэВ — величина спинорбитального расщепления состояния $1s(T_2)$, а Δ_c для доноров Bi в кремнии равняется 6.82 мэВ). Стрелками в табл. 3 обозначено направление спина (состояния, для которых не указано направление спина, считается, имеют одинаковое распределение по долинам для различных направлений спина). Состояние $1s(T_2 : \Gamma_7)$ имеет энергию, нелинейно зависящую от деформации на масштабах ~ 1 мэВ при междолинном расщеплении ≤ 1 мэВ. В области таких маленьких давлений (в области нелинейности) распределение этого состояния по долинам, на самом деле, более сложное, чем представлено в табл. 3. Но с точки зрения расчета темпов внутрицентровых переходов этот эффект незначителен, поэтому он не учитывался. Симметричные коэффициенты для междолинных переходов K_f и K_g в деформированном кремнии рассчитываются по формулам (4).

Суммирование в выражении (2) производится по всем фоновым модам, но с учетом δ -функции суммирование происходит по фононам, которые имеют энергию равную энергии перехода между состояниями донора. Для вычисления вероятности g -переходов изоэнергетическая

поверхность фононов аппроксимируется сферой, так как закон дисперсии g -фононов с хорошей точностью можно считать изотропным. Закон же дисперсии f -фононов весьма сложен [13]. Но область участвующих в переходе фононов в импульсном пространстве, определяемая локализацией в обратном пространстве волновых функций состояний донора, мала, и на таком масштабе можно считать, что изоэнергетическая поверхность плоская. Это приближение неплохо работает в окрестности точного резонанса, т.е. когда энергия фонона, соответствующего междолинному f -переходу, равна энергии перехода между донорными состояниями, и хуже по мере удаления от резонанса.

3. Результаты расчетов внутрицентровых темпов релаксации

Далее приведены результаты расчетов темпов релаксации состояний доноров висмута в одноосно-деформированном кремнии при взаимодействии с междолинными фононами. Темпы релаксации указаны в единицах 10^{10} c^{-1} , по оси абсцисс отложено междолинное расщепление, возникающее при деформации сжатия кристалла, выраженное в мэВ. Точками отмечены расчетные значения, которые соединены аппроксимационной кривой. На каждом рисунке указаны переход и тип фононов, ответственных за этот переход.

На рис. 2 представлены зависимости от междолинного расщепления темпа релаксации состояния $2p_0$ и $2p_{\pm}$, принадлежащего нижним 2Δ -долинам. Существует также процесс релаксации состояния $2p_0$ на переходе в состояние $1s(B_2)$ с излучением внутримолиновых, а также междолинных LA-g фононов. Темпы этих процессов не зависят от прикладываемой деформации, и их суммарный темп не превышает $0.2 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$. Состояние $2p_{\pm}$ также релаксирует с излучением внутримолиновых фононов на переходе в состояния $2s$ и $2p_0$. Значения этих темпов релаксации представлены в табл. 1.

На зависимостях скорости релаксации состояния $2p_0$ наблюдается провал в окрестности резонанса, т.е. когда энергия фонона с волновым вектором, равным расстоянию между центрами долин, равняется энергии соответствующего внутрицентрового перехода. При точном резонансе матричный элемент равен нулю из-за различ-

Таблица 3. Коэффициенты ($\alpha_1, \dots, \alpha_6$) распределения состояний мелких доноров по долинам зоны проводимости в кремнии

$A_1^I:$	(c, c, d, d, d, d)	$B_1:$	$\left(0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$
$A_1^II:$	$(d\sqrt{2}, d\sqrt{2}, c\sqrt{2}, c\sqrt{2}, c\sqrt{2}, c\sqrt{2})$	$1s(T_2 : \Gamma_7):$	$\approx \left(0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{i}{2}, \frac{i}{2}\right)$
$B_2:$	$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, 0, 0\right)$	$1s(T_2 : \Gamma_6)$	$\left(0, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{i}{2}, \frac{i}{2}\right) \uparrow \rangle$ $\left(0, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{i}{2}, -\frac{i}{2}\right) \downarrow \rangle$

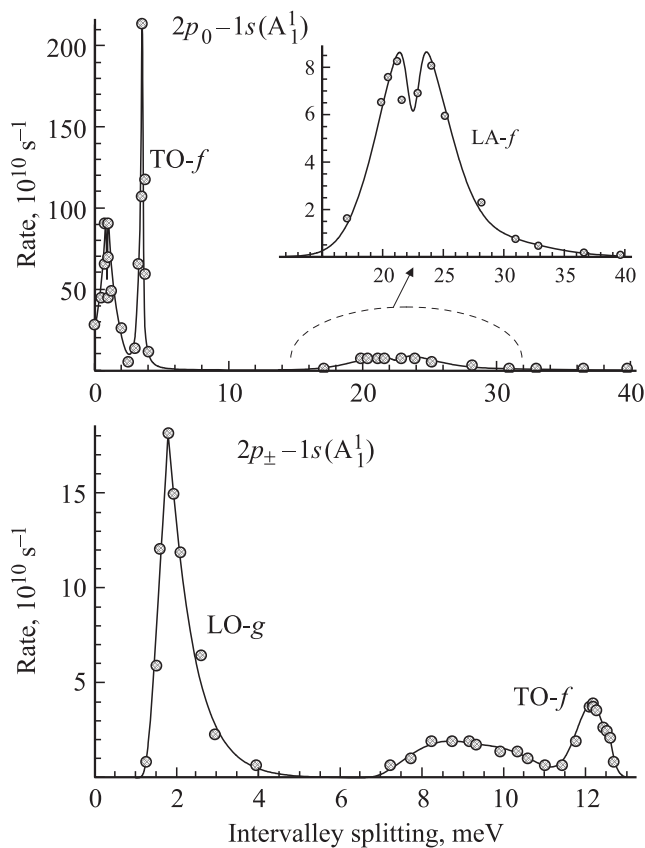


Рис. 2. Зависимости от деформации (междолинного расщепления) скорости релаксации состояний $2p_0$ и $2p_{\pm}$ в нижних долинах зоны проводимости при излучении различных фононов.

ной четности волновых функций состояний $2p$ и $1s$. Состояние $2p_0$ в импульсном пространстве нечетно в направлении волнового вектора фонона, с излучением которого происходит переход. Вследствие этого при расчете скорости релаксации состояния $2p_0$ имеет место компенсация вкладов в матричный элемент положительной и отрицательной частей его волновой функции [8].

На кривой, отражающей зависимость темпа излучения TO-f фонона на переходе $2p_0 - 1s(A_1')$ можно выделить две области (0–2.5 и 3–4 мэВ). Это связано с расщеплением дисперсионной зависимости TO фононов в направлении (110) [13]. Заметим, что в области 3–4 мэВ темп релаксации тоже должен иметь локальный провал в окрестности резонанса перехода с нижней ветвью дисперсионной зависимости для f-фононов, но из-за малой групповой скорости этих фононов этот минимум очень узкий, и его существованием можно пренебречь.

Зависимость от междолинного расщепления темпа излучения TO-f фононов из состояния $2p_{\pm}$ в основное состояние донора тоже имеет два максимума из-за расщепления дисперсионной зависимости TO-f фононов. Но в отличие от случая релаксации состояния $2p_0$ локальных минимумов на кривых в окрестности точного резонанса нет. Это связано с тем, что состояние $2p_{\pm}$ нечетно

не вдоль направления волнового вектора фонона, на котором происходит переход, а в перпендикулярном. В результате компенсации вкладов в матричный элемент положительной и отрицательной частей волновой функции состояния $2p_{\pm}$ для g-переходов не происходит, а для f-переходов она проявляется очень слабо.

На рис. 3 показаны зависимости от одноосной деформации темпов релаксации состояния $2p_0(u)$ ($2p_0$ в верхних долинах) на переходах в различные состояния. На переходах в состояния $1s$ наблюдается провал в окрестности точного резонанса по причинам, которые обсуждались выше.

Подобно случаю релаксации состояния $2p_0$ в нижних долинах, в верхних долинах так же существует канал релаксации с излучением внутримолиновых и междолинных LA g-фононов, которые не зависят от деформации, на переходе в отщепленную группу состояний $1s$ в верхних долинах. Значения этих суммарных темпов следующие: $2p_0 \rightarrow 1s(B_1) - 0.7 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$, $2p_0 \rightarrow 1s(T_2 : \Gamma_6) - 0.3 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$, $2p_0 \rightarrow 1s(T_2 : \Gamma_7) - 0.2 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$.

На рис. 4, a, b представлены зависимости от деформации скоростей релаксации состояний отщепленной группы $1s$ как в верхних, так и в нижних долинах зоны

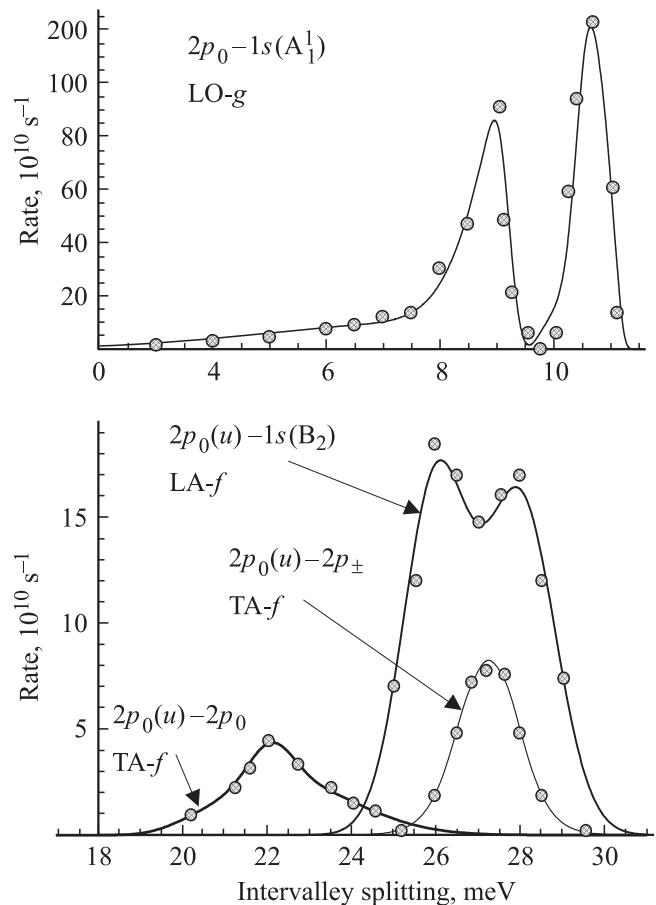


Рис. 3. Зависимость от деформации (междолинного расщепления) скорости релаксации состояния $2p_0(u)$ в верхних долинах зоны проводимости при излучении различных фононов.

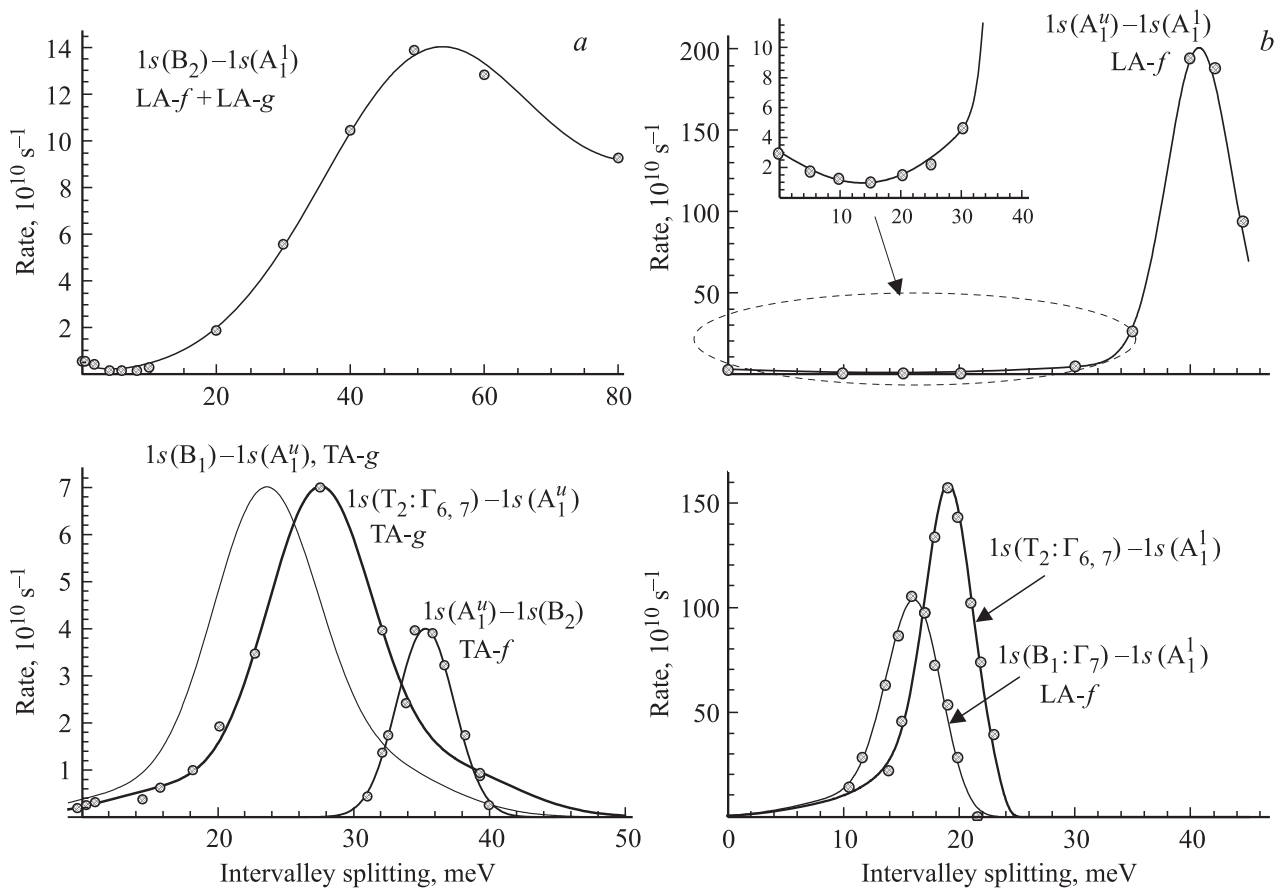


Рис. 4. *a, b* — зависимости от деформации скорости релаксации состояний отщепленной группы $1s$, в верхних и нижних долинах зоны проводимости кремния. Тип излучаемых фононов указан на рисунке.

проводимости кремния. В условиях генерации стимулированного излучения состоянием, соответствующим нижнему уровню рабочего перехода, является одно из состояний этой группы. Поэтому знание времен жизни данных состояний, определяемых излучением фононов, является особенно важным. То, какое именно состояние будет являться нижним рабочим, зависит от величины прикладываемого к кристаллу кремния давления и величины кванта накачки [1].

Релаксация состояния $1s(B_2)$ при малых деформациях определяется взаимодействием с $LA-f$ фононами. Темп излучения этого фонона быстро падает с увеличением прикладываемого к кристаллу давления, и при $P > 0.5$ кбар релаксация начинает определяться излучением $LA-g$ фононов.

Релаксация состояний отщепленной группы $1s$ состояний в верхних долинах определяется взаимодействием с $TA-g$, $TA-f$ и $LA-f$ фононами. Деформационные зависимости релаксационных темпов представлены на рисунке. Следует заметить, что существуют так же переходы из состояний $1s(T_2: \Gamma_{6,7})$ и $1s(B_1)$ в состояние $1s(B_2)$ с излучением $TA-f$ фононов. Но эти переходы не оказывают заметного влияния на населенности состояний по той причине, что в том же диапазоне прикладываемых к

кристаллу давлений существуют гораздо более быстрые, превосходящие более чем на порядок, переходы из этих состояний в основное состояние донора висмута.

Согласно результатам вычислений релаксационных темпов, состояния отщепленной группы $1s$ в верхних долинах ($1s(T_2: \Gamma_6)$, $1s(T_2: \Gamma_7)$, $1s(B_1: \Gamma_7)$) начинают быстро релаксировать при давлениях, больших чем 1 кбар. Время жизни этих состояний при таких деформациях меньше, чем время жизни состояния $2p_0(u)$. Это дает основания считать, что на переходе между состоянием $2p_0(u)$ и одним из $1s$ состояний отщепленной группы в верхних долинах возможно формирование инвертированного распределения электронов при возбуждении такой среды, что находится в согласии с полученными ранее экспериментальными данными [1].

На рис. 5 показаны графики зависимостей темпа релаксации состояния $2p_{\pm}$, принадлежащего верхним долинам зоны проводимости кремния, от междолинного расщепления, вызванного одноосной деформацией в кристаллографическом направлении [100]. Следует отметить, что, помимо указанных на рисунке темпов междолинных переходов, релаксация данного состояния определяется также и внутридолинными процессами электрон-фононного взаимодействия, темпы которых,

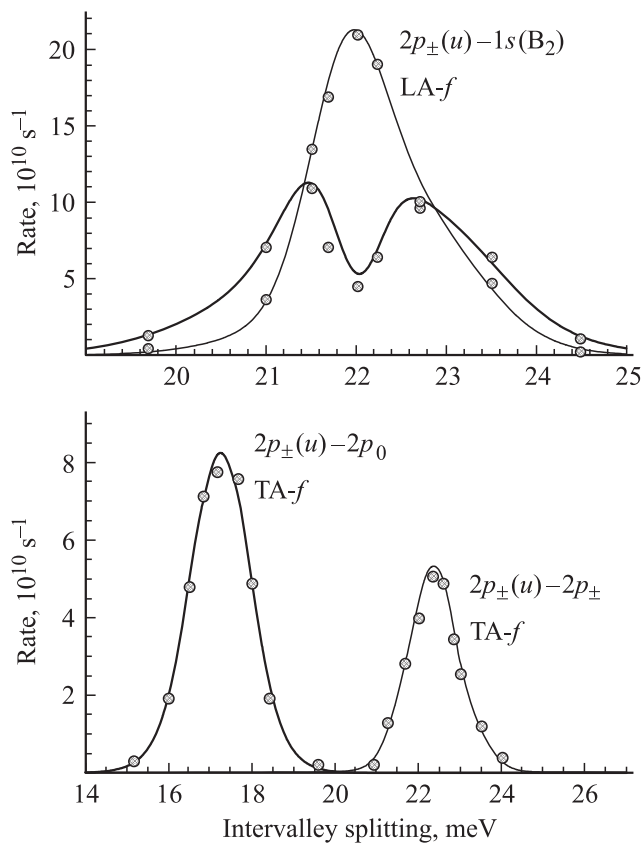


Рис. 5. Зависимость от деформации скорости релаксации состояния $2p_{\pm}(u)$ в верхних долинах зоны проводимости кремния при излучении TA- f и LA- f фононов.

как считается, не зависят от деформации, и их значения представлены в табл. 1.

4. Заключение

Полученные результаты расчета темпов релаксации отмеченных выше состояний донора висмута в кремнии с излучением междолинных фононов позволяют дать оценку населенности состояний такого центра и определить рабочие переходы в зависимости от деформации кристалла и энергии кванта накачки такой активной среды. Показано, что темпы релаксации состояний этого центра сложным образом зависят от прикладываемого к кристаллу кремния давления. Это может приводить к смене рабочих переходов, которые отличаются как по частоте излучения, так и другими параметрами, такими как интенсивность излучения, поляризация и т. п. В частности, результаты расчетов показывают принципиальную возможность стимулированного на переходах между состояниями в отщепленных деформацией верхних (4Δ) долинах зоны проводимости кремния.

В заключение хочется выразить благодарность С.Г. Павлову, Н.-W. Hübers, К.А. Ковалевскому за экспериментальное изучение эффектов стимулированного

излучения мелкими донорами в деформированном кремнии, что стимулировало данные теоретические исследования.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 8622), а также РФФИ (№ 11-02-00957-а, № 12-02-31291 мол_а, № 13-02-97116 р_поволжье_а).

Список литературы

- [1] К.А. Ковалевский, Р.Х. Жукавин, В.В. Цыпленков, В.Н. Шасти, Н.В. Абросимов, Г. Рима, С.Г. Павлов, Г.-В. Хьюберс. ФТП, **47**, 199 (2013).
- [2] T.G. Castner. Phys. Rev., **130**, 58 (1963).
- [3] E.E. Orlova. 26th Int. Conf. on Physics of Semiconductors: 29 July–2 Aug., 2002. Cambridge, Great Britain. In: J.H. Davies, A.R. Long (eds). Publisher: Institute of Physics. Publishing ISBN: –7503-0924-5. Conf. Proc., v. 3, p. 123.
- [4] V. Tyuterev, J. Sjakste, N. Vast. Phys. Rev. B, **81**, 245 212 (2010).
- [5] N.Q. Vinh, B. Redlich, A.F.G. van der Meer, C.R. Pidgeon, P.T. Greenland, S.A. Lynch, G. Aeppli, B.N. Murdin. Phys. Rev. X, **3**, 011 019 (2013).
- [6] C. Jacoboni, L. Reggiani. Rev. Mod. Phys., **55** (3), 645 (1983).
- [7] Е.В. Демидов, М.С. Кузнецов, В.В. Цыпленков, В.Н. Шасти. Матер. X Симпоз. по нанозифике и нанозлектронике (ИФМ РАН, Н. Новгород, 13–17 марта 2006 г.) т. 2, с. 320 (2006).
- [8] В.В. Цыпленков, Е.В. Демидов, К.А. Ковалевский, В.Н. Шасти. ФТП, **42**, 1032 (2008).
- [9] В.В. Цыпленков, К.А. Ковалевский, В.Н. Шасти. ФТП, **43**, 1450 (2009).
- [10] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках (М., Наука, 1972) с. 584.
- [11] R.J. Bell, W.T. Bousman, G.M. Goldman, D.G. Rathbun. Surf. Sci., **7**, 293 (1067).
- [12] D.K. Wilson, G. Feher. Phys. Rev., **124** (4), 1068 (1961).
- [13] G. Dolling. In: Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids (IAEA, Vienna), **11**, 37 (1963).

Редактор Т.А. Полянская

Phonon assisted relaxation of excited bismuth donor states in uniaxially stressed silicon

V.V. Tsyplenkov, R.Kh. Zhukavin, V.N. Shastin

The Institute for Physics of Microstructures of the Russian Academy of Sciences, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract Low temperature phonon assisted relaxation rates of the excited of bismuth (Bi) donor in silicon under [100] crystal uniaxial deformation are calculated. All principal donor states bound to the low (2Δ) as well as to the upper (4Δ) valleys of silicon conduction band are taken into account. As shown the population inversion of the 4Δ bismuth donor states can be excited under optical pump.