论文

Co/Cu 多层膜沉积过程中结构和形貌的变化

刘红亮, 陈冷*

北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083

* E-mail: lchen@ustb.edu.cn

收稿日期: 2015-12-13; 接受日期: 2016-02-24; 网络出版日期: 2016-04-21

国家自然科学基金(批准号: 51171018)资助项目

摘要 从原子结合能和位错生成能入手, 分别计算了在 Co 基底上沉积 Cu 薄膜和在 Cu 基底上沉积 Co 薄膜时, 薄膜结构随沉积厚度增加所发生的变化. 结果表明, 在{100}纤维织构的 Co 基底上沉积 Cu 薄膜, 当薄膜厚度达到 3.33 nm 时会在薄膜与基底界面产生错配位错, 且随薄膜厚度增加, 错配位错密度逐渐增大. 在{100}纤维织构 Cu 基底上沉积 Co 薄膜, 当薄膜厚度达到 4.90 nm 时, 薄膜生长模式会由层状向岛状转变, 薄膜为 fcc 结构. 当厚度超过 12.64 nm 后会出现 hcp 结构. 计算结果与实验得出的结论基本相符.

关键词 巨磁电阻薄膜, 厚度, 位错, 择优取向

1 引言

1988 年, Baibich 等人^[1]在研究 Fe/Cr 多层膜时发现了巨磁电阻(GMR)效应. 巨磁电阻薄膜具有较大的磁电阻变化率, 可以实现磁信号和电信号之间的相互转换, 主要应用于各种传感器、随机存储器和读出磁头等^[2]. 巨磁电阻薄膜种类繁多, 其中 Co/Cu 多层膜以其良好的热稳定性和较大的磁电阻变化率而受到广泛关注^[3].

目前, 普遍认为多层膜中界面粗糙度和位错等缺陷会对电子传输产生影响, 进而影响其磁性能^[4], 因此, 国内外学者对巨磁电阻多层膜的结构进行了大量研究. 薄膜制备前在基底上沉积合适的缓冲层/种子层可以改善薄膜结构, 提高薄膜磁性能^[5,6]. Fermento 等人^[7]对不同种类缓冲层上沉积的 Co 薄膜

进行结构观察, 发现与 Ru, Al, Cu 缓冲层相比, Ta 缓冲层上沉积的 Co 薄膜具有单一的{111}纤维织构. 另有研究表明, 制备 Co/Cu 多层膜时, Ta 缓冲层越厚, Co/Cu 多层膜界面粗糙度越大^[8]. 对薄膜而言, 织构和界面粗糙度等结构参数均可通过实验观察得到, 但位错等缺陷的产生和发展过程则主要依靠数学模型进行计算^[9]. 薄膜中产生位错的原因有很多, 包括薄膜在以岛状模式生长时形成的“小岛”的聚合以及由晶格错配和基底缺陷引起的位错等, 其中将薄膜与基底间由于晶格错配而产生第一个错配位错时薄膜的厚度定义为临界厚度. Pang 和 Chen^[10]计算了 Si 基底取向分别为{100}, {110}, {111}和{112}时 Cu 薄膜的临界厚度, 发现在{111}取向的基底上沉积的 Cu 薄膜临界厚度最大. 与 Cu 这类单质薄膜相比, 化合物薄膜的临界厚度会随其成分变化而发生改变, 对

引用格式: 刘红亮, 陈冷. Co/Cu 多层膜沉积过程中结构和形貌的变化. 中国科学: 技术科学, 2016, 46: 586–592

Liu H L, Chen L. The change of structure and morphology during deposition process in Co/Cu multilayer film (in Chinese). Sci Sin Tech, 2016, 46: 586–592, doi: 10.1360/N092015-00118

于在 Si 基底上沉积的 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 薄膜而言, Ge 含量越大, 与基底间的错配度越高, 薄膜临界厚度越小^[11]. 除位错等缺陷, 晶体结构类型和择优取向也会对多层膜的磁性能产生影响. 例如, Cerisier 等人^[12]用电沉积法在 Si 基底上制备 Co 薄膜, 发现溶液 pH 不同时, Co 薄膜中 hcp 和 fcc 结构所占比例也不一样, 并且发现 Co 薄膜中 hcp 结构所占比例越大, 薄膜磁性能越差. Egelhoff 等人^[13]发现, 相比于 {111} 择优取向, 具有 {100} 择优取向的 Co/Cu 多层膜表现出更高的磁电阻变化率和更强的层间反铁磁耦合强度. 因此, 对具有 {100} 纤维织构的 Co/Cu 多层膜进行深入研究有重要意义.

对薄膜而言, 很难在生长过程中对其微观结构进行实时观察, 因此计算和模拟成为主要的分析手段. 目前关于多层膜生长过程中结构变化与子层厚度间关系的报导还不多见. 本文在已有工作的基础上, 分别计算并讨论了在 Co 上沉积 Cu 薄膜和在 Cu 上沉积 Co 薄膜过程中, 随着厚度的增加, 薄膜结构发生的变化. 为验证计算结果, 用离子束溅射法在 Ta 缓冲层上制备了 Cu/Co 双层膜, 观察 Co 层厚度大小与薄膜表面形貌间的关系. 研究结果有助于深入理解 Co/Cu 多层膜制备过程中薄膜结构变化的微观机制.

2 方法与结果

2.1 实验方法

用 ISB700 离子束溅射镀膜机, 在表面经热氧化处理的 Si 片上制备多层膜. 镀膜前, 基底需分别在丙酮和无水乙醇中超声波清洗 10 min. 溅射室的本底真空度优于 10^{-4} Pa, 工作压强为 4.3×10^{-3} Pa. 用原子力显微镜 (AFM) 观察和测量样品的表面形貌和表面粗糙度.

2.2 计算方法和结果

薄膜制备方法的多样性以及每种制备方法中可选择的工艺参数的多样性使得薄膜制备过程中有很多制备条件可选, 这些不同的制备条件会对多层膜的结构和性能产生影响. 但一般我们认为, 制备条件对薄膜结构的影响与薄膜厚度大小关系不大, 相反, 薄膜沉积过程中微观结构随薄膜厚度增加的变化主要受沉积材料的物理性质决定, 例如晶格常数、键

能、表面自由能等. 正因如此, Co 和 Cu 物理参数的不同是计算过程中主要考虑的内容.

2.2.1 Cu 薄膜在 Co 基底上沉积

在外延薄膜生长过程中, 临界厚度是一个重要的参数. 由于薄膜和基底之间存在晶格常数差异, 因此在薄膜外延生长过程中会产生内应力. 当外延薄膜的应变能到达临界值时, 薄膜与基底界面会产生错配位错以降低应变能. 外延层的应变能与其厚度密切相关, 导致外延生长的薄膜形成相对稳定的临界厚度. 这个观点首先由 Van der Merwe 等人^[14]提出. 之后, Matthews 和 Blakeslee^[15]从薄膜生长过程中外延应力和错配位错线张力的力平衡方面入手, 推导了外延薄膜临界厚度的计算公式. 在此基础上, Hu^[16]综合考虑螺型位错和刃型位错, 通过使总能量最小重新推导了薄膜临界厚度公式:

$$h_c = \frac{b}{8\pi f \sin \theta \cos \phi} \left[\frac{1 - \nu \cos^2 \theta}{1 + \nu} \right] \ln \left(\frac{h_c}{r_0} - 1 \right), \quad (1)$$

式中, h_c 为薄膜临界厚度, b 为柏氏矢量的大小, f 为外延膜与基底材料之间的晶格错配度, θ 为位错线与柏氏矢量间的夹角, ϕ 为滑移面与薄膜平面间的夹角, ν 为外延薄膜材料的泊松比, r_0 为位错的核心半径.

当 Cu 薄膜在 {100} 晶面平行于表面的 β -Co 基底上沉积时, 由于 Cu 薄膜的表面自由能比 Co 的低, 并且在沉积过程中, Cu 原子在薄膜表面移动性较强, 因此 Cu 薄膜在 Co 基底上沉积时倾向于按层状模式生长, 浸润表面^[17]. 且 Cu 和 β -Co 的晶格常数十分接近 (Cu: 0.3615 nm, Co: 0.3545 nm)^[18], 所以 Cu 薄膜在生长初期会沿 Co 基底表面外延生长, 此时 Cu 薄膜与 Co 基底间的晶格错配度为

$$f = \frac{|a_s - a_f|}{a_s} = \frac{0.3615 - 0.3545}{0.3545} = 1.97\%.$$

图 1 是自由表面为 (001) 时坐标系的相对取向示意图. 由于位错线在 Cu/Co 界面上产生且沿 Cu 的密排面滑移, 滑移方向为密排方向, 因此由图 1 可以看出 Cu 薄膜中位错线应与 z 轴方向平行, 滑移方向平行于 $[10\bar{1}]$ 或 $[01\bar{1}]$. 进一步分析计算可知, $\theta = 60^\circ$, $\phi = \arccos \sqrt{3}/3$. 另外, Cu 的泊松比为 0.343, 柏氏矢量 $\vec{b}$ 的值为 $\sqrt{2}a/2$, a 为 Cu 的晶格常数, $r_0 = b/2$. 将上述数据代入式 (1) 中得到 Cu 薄膜的临界厚度约为 3.33 nm.

图1 自由表面为(001)时坐标系的相对取向

当外延薄膜厚度大于其临界厚度之后会在薄膜与基底界面处产生错配位错,以降低外延膜的应变,减小其应变能。但由于位错生成能等因素的影响,外延薄膜的晶格常数不会因为大于临界厚度而发生突变,而是随着薄膜厚度的增加,晶格常数发生连续变化^[19,20]。

当薄膜厚度大于临界厚度时,其错配应变 δ 会随厚度增加而逐步降低,即:

$$\delta = f \frac{h_c}{h} \frac{\ln(4h/b)}{\ln(4h_c/b)}, \quad h > h_c. \quad (2)$$

其应变值可以进一步近似为

$$\delta = f \frac{h_c}{h}, \quad h > h_c. \quad (3)$$

式(2)最早由 Chappert 和 Bruno^[20]提出并广泛应用于各种磁性薄膜体系。

结合式(1)和(3)的计算结果,我们得出了在{100}面平行于表面的 β -Co基底上沉积Cu薄膜时,Cu薄膜的错配应变随其厚度的变化曲线,如图2所示。

2.2.2 Co 薄膜在 Cu 基底上沉积

Li 和 Tonner^[21]认为,Co 薄膜在{100}晶面平行于

图2 在具有{100}择优取向的Co基底上沉积Cu薄膜时Cu薄膜的错配应变随其厚度的变化曲线

表面的Cu基底上沉积,当Co薄膜厚度较小时,其会以层状模式生长。Huang等人^[22]通过反射高能电子衍射仪(RHEED)测试发现,厚度小于20分子层的Co薄膜在{100}择优取向的Cu基底上沉积时会以层状模式生长,且为fcc结构。但由于Co薄膜的表面能较大,Co原子在薄膜表面移动性较差,容易聚集,导致当Co薄膜到达一定厚度时会转变为岛状模式生长,以降低Co薄膜沿Cu基底外延生长产生的应变能^[23,24]。Wessels^[24]从能量角度出发推导了薄膜以S-K(先层状后岛状)模式生长时表面形成“小岛”的薄膜临界厚度公式为

$$h_c = \frac{\gamma_F}{\mu f^2} (1 - \lambda \mu f^2 h_c / \gamma_F), \quad (4)$$

式中, $\mu = \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)}$, γ_F 为单位面积的表面自由能,

Co的表面自由能为2700 mJ/m²; G为切变模量,取值83 GPa; 泊松比 ν 为0.33。当小岛刚刚生成时, λ 近似为1。Co在Cu基底上沉积时初始错配度 f 约为1.97%。

将以上数据代入式(4)得到Co薄膜生长模式发生改变时对应的厚度约为4.90 nm。

在薄膜的制备过程中,原子沉积到薄膜表面并由气态转变为固态,相应的产生原子间结合能。薄膜结构不同,原子结合能就会产生差异,结合能相对较大的结构会稳定存在。例如 $\Delta E_{Co}^{hcp-fcc} = 0.0206$ eV。在室温下,Co的晶体结构以hcp结构为主,但当其处于440℃左右的高温环境时,Co会转变成fcc结构,因此与Cu薄膜的生长过程相比,Co薄膜要复杂许多。由于上述原因,导致制备出的Co薄膜有可能同时存在hcp和fcc两种晶体结构。然而研究人员^[25,26]对在{100}纤维织构的Cu基底上沉积的一定厚度的Co薄膜进行结构测试时,发现其存在单一的fcc结构,而无hcp结构。造成这种现象的主要原因是 Co_{hcp} 的低指数晶面与Cu的{100}面错配度较大。但有研究发现Co薄膜在Cu基底上沉积到一定厚度时,会发生fcc-hcp结构转变,并随着Co薄膜厚度的增加,hcp结构所占比例不断增大^[27]。Li等人^[28]从原子结合能方面入手,推导了薄膜发生结构转变时的厚度。

当薄膜与基底的晶体结构都为fcc时:

$$E_{p,fcc} = E_{fcc} \left\{ 1 + \frac{\pi r}{3h} \left[\frac{1}{4} \left(1 + \frac{E_M}{E_{fcc}} \right) - 1 \right] \right\}; \quad (5)$$

当Co薄膜晶体结构为hcp时:

$$E_{p,hcp} = E_{hcp} \left\{ 1 - \frac{\pi r}{3h} \right\}, \tag{6}$$

式中, $E_{p,fcc}$ 和 $E_{p,hcp}$ 分别为 Co 薄膜的晶体结构为 fcc 和 hcp 时, Co 原子的结合能; E_{fcc} 和 E_{hcp} 分别为 fcc 和 hcp 结构的块体材料中 Co 原子的结合能; r 为 Co 原子的原子半径, h 为薄膜厚度, E_M 为基底材料 Cu 的原子结合能. 公式中参数的详细数值如表 1 所示.

将以上数值分别代入式(5)和(6)中, 可以得到原子结合能和薄膜厚度关系, 如图 3 所示. 两条曲线交点所对应的薄膜厚度为 12.64 nm.

2.3 实验结果

实验观察和理论计算都已表明, 受表面自由能等因素影响, Cu 上沉积的 Co 薄膜在生长初期会以层状模式生长^[21,30]. 为验证 Co 薄膜厚度增加后, 生长模式是否发生改变, 在 5 nm Cu 薄膜上分别沉积了 5 和 15 nm 的 Co 薄膜, 并用原子力显微镜对薄膜表面进行观测, 结果如图 4 所示.

从图 4 中可以看出, Co 薄膜厚度为 5 nm 时, 表面已生成凹凸不平的小岛, 说明其生长模式已由层状生长变为岛状生长, 但此时岛高度较小, 起伏在 1 nm 左右, 均方根粗糙度只有 0.572 nm. Co 薄膜厚度变为 15 nm 时, 岛的高度和起伏明显增加, 薄膜表面粗糙度也增加到 0.962 nm. 初步分析这种现象主要

表 1 式(5)和(6)中参数所对应数值^[29]

	E_{fcc}	E_{hcp}	E_M	r
参数值	4.39 eV	4.41 eV	3.49 eV	0.125 nm

图 3 Co 薄膜在表面取向为{100}的 Cu 基底上沉积时 Co 原子的结合能随薄膜厚度的变化曲线

与薄膜生长方式的改变有关. 由于在 Co 层厚为 5 nm 时, 岛高度较小, 因此可以推断薄膜表面的小岛刚刚生成, Co 薄膜在厚度增加到 3~4 nm 左右时生长模式发生转变, 与计算结果基本相符. 之后随着 Co 的继续沉积, 岛高度增加并逐步趋于稳定.

3 分析和讨论

对巨磁电阻多层膜而言, 可以在制备过程中通

图 4 (网络版彩图)薄膜表面的 AFM 图及表面起伏曲线

(a) Cu 5 nm/Co 5 nm 薄膜表面的 AFM 图; (b) Cu 5 nm/Co 15 nm 薄膜表面的 AFM 图; (c) Cu 5 nm/Co 5 nm 薄膜的表面起伏曲线; (d) Cu 5 nm/Co 15 nm 薄膜的表面起伏曲线

过控制多层膜的结构达到改善其性能的目的. 因此我们分析了 Co/Cu 多层膜生长过程中, Cu 层和 Co 层随厚度增加, 其结构发生的变化, 为 Co/Cu 多层膜的制备提供参考和理论依据.

Cu 的晶格常数和 β -Co 的晶格常数十分接近, 所以 Cu 薄膜在生长初期会沿 Co 基底外延生长, 二者界面完全匹配. 图 2 中 h 趋近于 0 时表示 Cu 原子刚开始在 Co 薄膜表面沉积时候的信息, 此时 Cu 层还不连续, 但已经有一些 Cu 原子开始聚集并与 Co 薄膜表面保持外延关系, 因此不连续的 Cu 层内存在较大的错配应变. 由于 Cu 的晶格常数较大, Cu 薄膜会受到拉应力. 当 Cu 薄膜厚度增加到一定值时, 其应变能达到临界值, 此时薄膜和基底界面会产生错配位错, 应变能降低. 当 Co 基底的 {100} 面平行于表面时, Cu 薄膜的临界厚度约为 3.33 nm. 随着 Cu 薄膜厚度的继续增加, 错配位错的面密度会随之升高, Cu 薄膜应变能降低, Cu 的晶格常数逐渐恢复到正常值, 如图 2 所示.

当 Co 薄膜在 {100} 晶面平行于表面的 Cu 基底上沉积时, Co 薄膜会沿基底外延生长. 此时, Co 薄膜为 fcc 结构, 且受压应力. 随着 Co 薄膜厚度的增加, 应变能不断增大, 到达 4.90 nm 左右时 Co 薄膜表面会形成小岛, 以降低薄膜的应变能. 在此之后, Co 薄膜会以岛状模式生长. 当薄膜厚度大于 12.64 nm 时, 薄膜结构会趋向于 hcp 结构. 由于薄膜实际生长过程中, 表面都不是理想的平整状态, 造成实际转变厚度会比计算值稍大. 此外, 由图 3 可以看出, 在 fcc 和 hcp 结构的 Co 薄膜中 Co 原子的结合能差值较小, 薄膜结构转变可能发生较慢, 而不会在 12.64 nm 左右发生突变, 但基本趋势不会发生变化.

上述计算结果表明, 对于 Co/Cu 多层膜而言, 其子层厚度大小与其结构有着密切联系. 对于外延生长且为 {100} 纤维织构的 Co/Cu 多层膜而言, 当 Co 层

和 Cu 层厚度较小时, 多层膜界面为共格界面, 此时多层膜以层状模式生长, 界面粗糙度较小, 多层膜为 fcc 晶体结构. Cu 层厚度大于临界厚度时会产生错配位错; Co 层厚度增加过程中, 其生长方式会发生变化, 使得多层膜的界面粗糙度增加, 同时还会发生 fcc-hcp 结构转变. 位错等缺陷及界面粗糙度的增加会对薄膜磁性能产生不利影响, 因此 Co/Cu 多层膜的各子层厚度越小越好. 另外, Co 层厚度达到 12.64 nm 左右时会产生 hcp 结构的 Co, 使得薄膜矫顽力增加, 对外界磁场灵敏度降低. 但如果 Co 层和 Cu 层厚度过小, 在制备过程或处于温度稍高的环境中易形成针孔等缺陷, 影响 Co/Cu 多层膜结构的稳定性. 此外, Co/Cu 多层膜的 MR 比值会随 Cu 层厚度变化而发生周期性振荡. 综合以上几种影响因素, 实际生产的 Co/Cu 多层膜各子层厚度对应 Cu 的第二振荡周期, 即 2 nm 左右较为合适.

4 结论

在 {100} 纤维织构的 Co 和 Cu 基底上分别沉积 Cu 和 Co 薄膜, 随沉积厚度增加, 薄膜结构发生变化, 主要结论如下.

(1) Cu 薄膜在 {100} 晶面平行于表面的 Co 基底上沉积时, 当薄膜厚度 $h < 3.33$ nm, 晶格常数不发生变化, 薄膜与基底界面完全匹配. 若 $h > 3.33$ nm, 薄膜与基底界面处将产生错配位错, 同时随 h 增加, 位错密度逐渐增大, 错配应变逐步降低.

(2) 在 {100} 面平行于表面的 Cu 基底上沉积 Co 薄膜时, 初始阶段薄膜会以层状模式生长, 且为 fcc 结构. 当厚度达到 4.90 nm 时, 薄膜表面会形成小岛以降低应变能, 同时薄膜会转变为岛状模式生长. 当薄膜厚度继续增加, 超过 12.64 nm 之后, 薄膜中会出现 hcp 结构, 且随厚度升高, hcp 结构所占比例不断增大.

参考文献

- 1 Baibich M N, Broto J, Fert A, et al. Giant magnetoresistance of (001) Fe/(001) Cr magnetic superlattices. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 2472-2475
- 2 Giebler C, Adelerhof D J, Kuiper A E T, et al. Robust GMR sensors for angle detection and rotation speed sensing. *Sensor Actuat A-Phys*, 2001, 91: 16-20
- 3 Parkin S, Li Z, Smith D J. Giant magnetoresistance in antiferromagnetic Co/Cu multilayers. *Appl Phys Lett*, 1991, 58: 2710-2712
- 4 Tsymbal E Y, Pettifor D G. Perspectives of giant magnetoresistance. *Solid State Phys*, 2001, 56: 113-237

- 5 方庆清, 张启平, 王伟娜, 等. Cr 缓冲层对 SmCo/Cu 薄膜结构及形貌的影响. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2013, 43: 48–53
- 6 席力, 周建军, 孙青锦, 等. 种子层对 FeCoNd 薄膜的磁性影响研究. 科学通报, 2010, 17: 1648–1653
- 7 Fermento R, Leitao D C, Teixeira J M, et al. Structural, magnetic and transport properties of ion beam deposited Co thin films. *J Non-Cryst Solids*, 2008, 354: 5279–5281
- 8 Ishiji K, Hashizume H. Interface structures and magnetic properties of exchanged-coupled Co/Cu multilayers sputter-grown on Ta buffers. *Jpn J Appl Phys*, 2006, 45: 4187–4195
- 9 Wang H Y, Yu Y, Yan S P. Elastic stress fields caused by a dislocation in $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ film-substrate system. *Sci China Phys Mech Astron*, 2014, 6: 1078–1089
- 10 Pang N, Chen L. Effect of substrate orientation on critical thickness of Cu thin films. *Electron Mater Lett*, 2011, 7: 359–363
- 11 People R, Bean J. Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ strained layer heterostructures. *Appl Phys Lett*, 1985, 47: 322–324
- 12 Cerisier M, Attenborough K, Celis J P, et al. Structure and magnetic properties of electrodeposited Co films onto Si (100). *Appl Surf Sci*, 2000, 166: 154–159
- 13 Egelhoff W, Kief M. Fe/Cu/Fe and Co/Cu/Co multilayers on Cu (111): The absence of oscillatory antiferromagnetic coupling. *IEEE T Magn*, 1992, 28: 2742–2744
- 14 Van der Merwe J. Equilibrium structure of a thin epitaxial film. *J Appl Phys*, 1970, 41: 4725–4731
- 15 Matthews J, Blakeslee A. Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations. *J Cryst Growth*, 1974, 27: 118–125
- 16 Hu S. Misfit dislocations and critical thickness of heteroepitaxy. *J Appl Phys*, 1991, 69: 7901–7903
- 17 Chopra H D, Yang D X, Chen P, et al. Surfactant-assisted atomic-level engineering of spin valves. *Phys Rev B*, 2002, 65: 094433
- 18 Pearson W B, Vineyard G H. A handbook of lattice spacings and structures of metals and alloys. *Zeitschrift Für Kristallographie*, 1961, 115: 319–320
- 19 Bochi G, Ballentine C, Inglefield H, et al. Perpendicular magnetic anisotropy, domains, and misfit strain in epitaxial $\text{Ni}/\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x/\text{Cu}/\text{Si}$ (001) thin films. *Phys Rev B*, 1995, 52: 7311–7321
- 20 Chappert C, Bruno P. Magnetic anisotropy in metallic ultrathin films and related experiments on cobalt films. *J Appl Phys*, 1988, 64: 5736–5741
- 21 Li H, Tonner B. Structure and growth mode of metastable fcc cobalt ultrathin films on Cu (001) as determined by angle-resolved X-ray photoemission scattering. *Surf Sci*, 1990, 237: 141–152
- 22 Huang F, Kief M, Mankey G, et al. Magnetism in the few-monolayers limit: A surface magneto-optic Kerr-effect study of the magnetic behavior of ultrathin films of Co, Ni, and Co-Ni alloys on Cu (100) and Cu (111). *Phys Rev B*, 1994, 49: 3962–3971
- 23 Eaglesham D, Cerullo M. Dislocation-free stranski-krastanow growth of Ge on Si (100). *Phys Rev Lett*, 1990, 64: 1943–1946
- 24 Wessels B. Morphological stability of strained-layer semiconductors. *J Vac Sci Technol B*, 1997, 15: 1056–1058
- 25 Clarke A, Jennings G, Willis R, et al. A leed determination of the structure of cobalt overlayers grown on a single-crystal Cu (001) substrate. *Surf Sci*, 1987, 187: 327–338
- 26 Schneider C, Bressler P, Schuster P, et al. Curie temperature of ultrathin films of fcc-cobalt epitaxially grown on atomically flat Cu (100) surfaces. *Phys Rev Lett*, 1990, 64: 1059–1062
- 27 Liu Y, Chen Y, Yu K Y, et al. Stacking fault and partial dislocation dominated strengthening mechanisms in highly textured Cu/Co multilayers. *Int J Plasticity*, 2013, 49: 152–163
- 28 Li Y, Qi W, Huang B, et al. Thickness dependent phase stability of epitaxial metal films. *Phys B: Condens Mat*, 2010, 405: 2334–2336
- 29 Wang Y, Curtarolo S, Jiang C, et al. Ab initio lattice stability in comparison with CALPHAD lattice stability. *Calphad*, 2004, 28: 79–90
- 30 Levanov N, Stepanyuk V, Hergert W, et al. Molecular dynamics simulation of Co thin films growth on Cu (001). *Surf Sci*, 1998, 400: 54–62

The change of structure and morphology during deposition process in Co/Cu multilayer film

LIU HongLiang & CHEN Leng

School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

We consider in terms of atomic binding energy and dislocation formation energy to calculate the structure and morphology changing progress of films in two cases, including deposit Cu on Co substrate and deposit Co on Cu substrate. The results showed that misfit dislocation will generate at the interface of film and substrate when the thickness of Cu film reached 3.33 nm during deposition Cu film on {100} fiber textured Co substrate and the density of misfit dislocation will increase with the growth of film. When Co film grow on {100} fiber textured Cu substrate, the growth mode will change from layer-by layer to island after film thickness arriving 4.90 nm and it's fcc structure. The hcp structure will generate when the thickness of Co film exceeds 12.64 nm. The results is basically consistent with the conclusions of experiment.

giant magnetoresistance film, thickness, dislocation, preferred orientation

doi: 10.1360/N092015-00118