Co_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇的结构和磁性*

吕 瑾 许小红 武海顺

(山西师范大学化学与材料科学学院, 临汾 041004)

摘要 采用密度泛函理论中的局域自旋密度近似(LSDA)和广义梯度近似(GGA)对 Co_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇的几何构型进行优化, 并对能量、频率和磁性进行了计算, 两种方法确定的基态构型完全一致, 并从平均键长、平均配位数和对称性对磁性的影响进行了理论探讨. 研究表明, Co_n (*n* = 2 ~ 10) 基态团簇的磁性在 *n* = 2 ~ 4 时主要受平均键长的影响, 在 *n* = 5 ~ 9 时主要受平均配位数的影响, 在 *n* = 10 时受原子间距和平均配位数的相互影响, 最终导致与 Co₈ 基态团簇具有相同的磁性. 基态团簇在 Co₅ 和 Co₉ 出现了磁性局域最小点.

关键词: 团簇, 基态构型, 磁矩, 平均键长, 平均配位数, 对称性

中图分类号: O664

过渡金属团簇在开发新磁性材料和新催化剂领域具有广阔的应用前景. 对于铁族团簇体系, 理论^[1-6]和实验^[7-9]研究表明, 它们具有比相应的体材料更强的磁性. 前人已经做了大量理论研究. 如 Mlynarski 等^[10]用密度泛函理论(DFT)中非局域广义梯度近似(GGA)对 Co_n (*n* ≤ 6, 13) 的团簇进行了计算, 就团簇的对称性对磁矩的增强作了分析. Fan 等^[11]利用 ADF 对 Co_n (*n* = 2 ~ 8) 进行了几何、电子结构和磁性质的研究, 确定了它们的基态构型, 并指出 Co₆ 团簇具有超常的稳定性, 而且在 Co_n (*n* = 2 ~ 8) 团簇中没有磁幻数出现. Li 等^[12]对 Co₁₃ 的研究指出, 团簇的对称性越高, 磁性就越大. Duan 等^[13]在对 Fe₅₅、Co₅₅ 和 Ni₅₅ 团簇的对称性和磁性研究中指出对称性对磁性的影响与团簇的大小有关. 大量研究表明, 团簇的磁性与其对称性、平均配位数和平均键长有关^[6, 10, 12-14]. 用 DFT 中 GGA 和 LSDA 方法对 Co_n (*n* = 7 ~ 10) 团簇的研究尚未见报道. 本文将在优化 Co_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇构型的基础上, 从对称性、平均配位数和平均键长等角度对钴团簇的结构和磁性进行系统的研究. 所得结论不仅对探索钴团簇向体材料的演变过程具有重要的意义, 而且对新磁性材料的研制也有很重要的理论意义.

1 计算方法

采用 DFT 下的局域自旋密度近似(LSDA)和广义梯度近似(GGA), 用 Dmol³ 软件包对全部构型进行优化和电子结构计算. 在 LSDA 中, 对交换相关势的修正选择 VWN^[15] 函数; 在 GGA 中, 选择 Becke^[16] 的交换梯度修正和 Perdew-Wang^[17] 的关联梯度修正. 所有的计算均在 FINE 网格下完成. 采用带极化的双数值原子基组(DNP)进行全电子计算, 自洽过程以体系的能量和电荷密度分布是否收敛为依据, 精度均优于 10⁻⁶ a. u., 梯度和位移的收敛精度优于 10⁻² a. u. · nm⁻¹ 和 5 × 10⁻⁴ nm, 能量的收敛精度优于 10⁻⁵ a. u.; 另外, 在计算中, 我们在缺省轨道占据 Smearing 参数下, 对 Co_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇的所有几何构型进行优化, 并对能量和磁性进行计算, 在 Smearing 参数为 0.03 a. u. 时计算其频率, 其中 GGA 方法下 D_{3h} 对称性的 Co₉ 团簇和 D_{2h} 对称性的 Co₁₀ 团簇在 Smearing 参数为 0.04 a. u. 时计算其频率. 全部计算工作在山西师范大学材料化学研究所完成.

2 结果与讨论

2.1 团簇的基态几何构型

图 1 给出了 GGA 和 LSDA 下优化得到的 Co_n (*n* = 2 ~ 10) 团簇的基态结构. *n* ≤ 3 为线性和平面构型, *n* ≥ 4 为紧密堆积的三维结构. 表 1 列出了 Co_n (*n* = 2 ~ 7) 基态几何结构的对称性和几何参数,

图 1 Co_n(n=2~10)团簇的基态几何结构

Fig. 1 Geometric configuration of the ground state structures of Co_n(n=2~10) clusters

表 1 Co_n(n=2~7)基态几何构型的对称性和几何参数

Table 1 Symmetry and geometric parameters of the ground state structures of Co_n(n=2~7) clusters

GGA			LSDA		
Cluster	Sym.	<i>l</i> /nm	Cluster	Sym.	<i>l</i> /nm
Co ₂	<i>D</i> _{∞<i>h</i>}	0.2125	Co ₂	<i>D</i> _{∞<i>h</i>}	0.1949
Co ₃	<i>D</i> _{3<i>h</i>}	0.2386	Co ₃	<i>D</i> _{3<i>h</i>}	0.2172
Co ₄	<i>T</i> _d	0.2295	Co ₄	<i>T</i> _d	0.2234
Co ₅	<i>D</i> _{3<i>h</i>}	<i>a</i> = 0.2383 <i>b</i> = 0.2312	Co ₅	<i>D</i> _{3<i>h</i>}	<i>a</i> = 0.2271 <i>b</i> = 0.2239
Co ₆	<i>O</i> _h	0.2303	Co ₆	<i>O</i> _h	0.2247
Co ₇	<i>D</i> _{3<i>h</i>}	<i>a</i> = 0.2232 <i>b</i> = 0.2393	Co ₇	<i>D</i> _{3<i>h</i>}	<i>a</i> = 0.2172 <i>b</i> = 0.2330

图 2 给出了 Co_n(n=8~10)基态团簇的几何参数。Co₂ 团簇基态构型为 *D*_{∞*h*} 对称性, 钴原子间为典型的 δ 键。就 Co₃ 团簇, 对同一对称性不同键长的构型进行优化和能量计算, GGA 和 LSDA 给出的基态均为 *D*_{3*h*} 对称性, 键长分别为 0.2386 nm (GGA)和 0.2172 nm(LSDA)。Co₄ 和 Co₆ 团簇的基态几何构型分别为典型正四面体和正八面体, Co₅ 和 Co₇ 团簇分别为紧密堆积的正三角双锥和正五三角双锥, 它们的几何参数见表 1。Co₈、Co₁₀ 和 Co₉ 团簇的基态构型分别是在 Co₆ 团簇八面体和三棱柱的基础上加了几个帽原子, 几何参数如图 2 所示。总之, GGA 和 LSDA 两种方法所确定的基态构型完全相同。而且我们所确定的 Co_n(n=2~6) 团簇基态的对称性与 Mlynarski 等^[10]结果完全一致。与 Fan

图 2 Co₈、Co₉ 和 Co₁₀ 基态团簇的键长

Fig. 2 Bond length of the ground state structures of Co₈, Co₉ and Co₁₀ clusters

the LSDA value in bracket

等^[11]的结果在 n=4、5、8 时出现了差别。我们所确定的 Co_n(n=5~8)的对称性与 Bouarab 等^[18]所研究的相应 Ni_n结果一致。

2.2 团簇的磁性

在 Co_n(n=2~10)团簇的磁性计算中, 我们所得磁矩与先前的理论结果一样, 除 LSDA 给出的 Co₉ 团簇的平均磁矩为 1.67 μ_B (1 μ_B = 1.165 $\times 10^{-29}$ Wb · m)外, 均大于钴体材料磁矩 1.76 μ_B 。团簇的局域磁矩列于表 2。为了更好地研究影响团簇磁性的因素, 根据公式 $\bar{m} = 1/N \sum_i m_i$ 计算了每个团簇的平均磁矩见表 3。当 n=2、3、4、6 时, 平均磁矩与文献 [10-11, 19]完全吻合, n=7、8 时, 与文献 [11]完全吻合, 仅在 n=5 时出现了差别。对于 Co₅ 团簇, GGA 的平均磁矩为 2.20 μ_B , 与 Andriotis 等^[19]的结果一致, LSDA 为 1.80 μ_B 。相对于其它团簇, GGA 和 LSDA 给出的 Co₅ 基态磁性出现了差别, 一方面是由于 GGA 在计算中低估结合能, 高估键长; LSDA

表 2 Co_n(n=2~10)团簇的局域磁矩 (m)

Table 2 Local magnetic moments (m) of the ground state structures of Co_n(n=2~10) clusters

Cluster	GGA LSDA		Cluster	GGA LSDA		Cluster	GGA LSDA	
	m/μ_{B}			m/μ_{B}			m/μ_{B}	
$\text{Co}_2(D_{\infty h})$	2.00	2.00	$\text{Co}_7(D_{5h})$	2.09	2.11	$\text{Co}_9(D_{3h})$	1.80	1.80
	2.00	2.00		2.27	2.22		1.41	1.41
$\text{Co}_3(D_{3h})$	2.33	2.33	2.09	2.11	1.80	1.80		
	2.33	2.33	2.09	2.11	1.80	1.80		
	2.33	2.33	2.09	2.11	1.41	1.41		
$\text{Co}_4(T_d)$	2.50	2.50	2.09	2.11	1.41	1.41		
	2.50	2.50	2.27	2.22	1.80	1.80		
	2.50	2.50	$\text{Co}_8(D_{2d})$	2.03	2.04	1.80	1.80	
	2.50	2.50		1.98	1.96	1.80	1.80	
$\text{Co}_5(D_{3h})$	2.18	1.76	2.03	2.04	$\text{Co}_{10}(D_{2h})$	1.90	1.83	
	2.22	1.87	1.98	1.96		1.92	1.95	
	2.18	1.76	2.03	2.04		1.92	1.95	
	2.22	1.87	1.98	1.96		2.13	2.14	
	2.18	1.76	2.03	2.04		2.13	2.14	
$\text{Co}_6(O_h)$	2.33	2.33	1.98	1.96	1.92	1.95		
	2.33	2.33			1.92	1.95		
	2.33	2.33			1.90	1.82		
	2.33	2.33			2.13	2.14		
	2.33	2.33			2.13	2.14		
	2.33	2.33						

1 μ_B = 1.165 $\times 10^{-29}$ Wb · m

表 3 Co_n ($n=2 \sim 10$) 团簇的平均磁矩 ($\bar{m}/\mu_B$)Table 3 Average magnetic moment ($\bar{m}/\mu_B$) of the ground state structures of Co_n ($n=2 \sim 10$) clusters

	Co_2	Co_3	Co_4	Co_5	Co_6	Co_7	Co_8	Co_9	Co_{10}
Our work (GGA)	2.00	2.33	2.50	2.20	2.33	2.14	2.00	1.67	2.00
(LSDA)	2.00	2.33	2.50	1.80	2.33	2.14	2.00	1.67	2.00
Literature [10]	2.00	2.33	2.50	2.60	2.33				
Literature [11]	2.00	2.33	2.50	2.60	2.33	2.14	2.00		
Literature [19]	2.00	2.33	2.50	2.20	2.33				

在计算中高估结合能, 低估键长, 使 Co_5 团簇的键长差别 $\Delta a = 0.0112 \text{ nm}$, $\Delta b = 0.0073 \text{ nm}$, 明显大于 Co_4 的 0.0061 nm 和 Co_6 的 0.0056 nm . 另一方面 Co_5 中 5 个原子有两种配位环境, 而 Co_4 和 Co_6 的所有原子配位环境相同, 键长的较大变化对 Co_5 的局域环境有很大的改变, 二者又是影响磁性的主要因素, 致使磁性出现差异. 从表 3 可以看出, 随着 n 的增大, 团簇磁性从 Co_2 到 Co_4 在逐渐地增大, 从 Co_4 到 Co_8 在逐渐地减小, Co_8 和 Co_{10} 具有相同的平均磁矩, 在 Co_5 和 Co_9 出现了磁性的局域最小点. 对称性是影响团簇磁性的一个很重要的因素. Dunlap 和 Li^[6,12] 在对 Fe_{13} 和 Co_{13} 团簇的研究中指出, 团簇的对称性越高, 磁性就越大. 通常团簇的对称性越高, 局域 d 电子态就越窄, 越容易导致自旋劈裂, 从而形成较多自旋平行的 d 电子, 产生较大磁性. 如 D_{3h} 的 Co_3 , T_d 的 Co_4 和 O_h 的 Co_6 与其对称性较低的异构体相比, 磁性均为最大.

2.3 团簇的磁性与平均键长和平均配位数的关系

过渡金属团簇的磁性主要受原子配位数和平均键长的影响. 团簇内原子配位数越小, 团簇的局域 d 电子态越窄越容易发生自旋劈裂, 从而有较多自旋平行的 d 电子, 形成较大的磁矩. 随着平均配位数的增大, 局域 d 电子态在加宽, 自旋劈裂减少, 磁矩变小. 团簇平均键长越大, 原子间的波函数交叠越少, 越能保持自由原子的磁矩, 磁矩越大. 表 4 给出了 Co_n ($n=2 \sim 10$) 基态团簇的平均配位数和平均键长, 平均配位数随着团簇的增大, 在逐渐地增大. 对于平均键长, GGA 下从 Co_2 到 Co_3 明显增大, 到了 Co_4 又有所降低, 但不影响从 Co_2 到 Co_4 的增

大趋势, LSDA 下从 Co_2 到 Co_4 在逐渐的增大, 从 Co_5 到 Co_9 两种方法下的平均键长都几乎不变, Co_{10} 又明显增大. 平均配位数和平均键长的这种变化与团簇磁性的变化相符. 平均键长和平均配位数对磁性的影响存在一定的竞争, 如 Co_2 到 Co_4 平均配位数从 1 到 3, 磁性应该在逐渐地减小, 而实际上却在增大, 这说明磁性主要受键长的影响. Co_5 团簇的基态出现了磁性局域最小点. 从 Co_6 到 Co_9 磁性在逐渐减小, 平均配位数在逐渐增大, 而平均键长几乎不变, 说明这些团簇的磁性主要受配位数的影响. Co_8 和 Co_9 比较, Co_8 的磁矩为 $2.00 \mu_B$, Co_9 为 $1.67 \mu_B$, Co_9 基态团簇的磁性大幅度的降低, 这是继 Co_5 之后又出现的一个磁性局域最小点. Co_{10} 基态团簇的磁性与 Co_8 完全相同, 这主要是由于在 Co_{10} 团簇中有一个 Co_6 的八面体母体, 在八面体母体中有两个 $\text{Co}-\text{Co}$ 键长达到 0.3231 nm (GGA), 0.3199 nm (LSDA), 如图 2 所示, 其值超出 $\text{Co}-\text{Co}$ 间的成键范围, 原子间的波函数交叠较小, 磁性有增大的趋势, 而配位数增大又使磁性减小, 两种因素相互作用最终导致其磁性在 Co_8 基态的基础上没有发生变化.

在同一团簇中, 原子的配位数越小, 局域磁矩就越大, 如表 2 中 Co_5 团簇三角双锥两个顶端原子的磁矩就大于其它三个原子的磁矩; 局域配位数越大, 局域磁矩就应该越小, 如 Co_{10} 团簇八面体的两个顶端原子配位数为 7, 大于其它原子, 它的局域磁矩均小于其它 8 个原子. 但也有例外, 如在 Co_9 基态团簇中, 柱面上的三个帽原子尽管配位数 4 小于棱柱原子的配位数 5, 其帽原子磁矩 $1.41 \mu_B$ (GGA) 和 $1.41 \mu_B$ (LSDA) 小于棱柱原子的磁矩 $1.80 \mu_B$

表 4 Co_n ($n=2 \sim 10$) 团簇的平均配位数 (NC) 和平均键长 ($\bar{l}$)Table 4 Average coordination numbers (NC) and bond lengths ($\bar{l}$) the ground state structures of Co_n ($n=2 \sim 10$) clusters

	Co_2	Co_3	Co_4	Co_5	Co_6	Co_7	Co_8	Co_9	Co_{10}
Average NC (GGA)	1.0	2.0	3.0	3.6	4.0	4.3	4.5	4.7	5.2
(LSDA)	1.0	2.0	3.0	3.6	4.0	4.3	4.5	4.7	5.2
$\bar{l}/\text{nm}$ (GGA)	0.2125	0.2386	0.2295	0.2336	0.2303	0.2340	0.2356	0.2347	0.2433
(LSDA)	0.1949	0.2172	0.2234	0.2250	0.2247	0.2277	0.2274	0.2274	0.2361

表 5 Co_n(n=2~10)团簇的 E_n、E_b、Δ²E_n(a. u.)

Table 5 Total energy, binding energies and Δ²E_n of the ground state structures of Co_n(n=2~10) clusters

GGA				LSDA			
Cluster	E _n	E _b	Δ ² E _n	Cluster	E _n	E _b	Δ ² E _n
Co ₂	-2765.8677	0.1019		Co ₂	-2760.5528	0.1093	
Co ₃	-4148.8858	0.1299	0.0499	Co ₃	-4140.9436	0.1474	0.0788
Co ₄	-5531.8539	0.1315	-0.0245	Co ₄	-5521.2556	0.1468	-0.0383
Co ₅	-6914.8464	0.1373	-0.0374	Co ₅	-6901.6060	0.1540	-0.0724
Co ₆	-8287.8764	0.1474	0.0298	Co ₆	-8282.0287	0.1709	0.0639
Co ₇	-9680.8766	0.1504	-0.0279	Co ₇	-9662.3875	0.1739	-0.0285
Co ₈	-11063.9047	0.1561	0.0163	Co ₈	-11042.7748	0.1796	-0.0079
Co ₉	-12446.9165	0.1587	0.2265	Co ₉	-12423.1700	0.1851	0.0439
Co ₁₀	-13829.9056	0.1586		Co ₁₀	-13803.5214	0.1850	

(GGA)和 1.80 μ_B (LSDA), 这主要是由于与帽原子相互成键的键比较集中, 致使帽原子的 d 电子较多地参与了成键的电子, 磁矩变小; 反之, 如果原子相互成键比较分散, 尽管配位数大, 仍能获得较大的磁矩. 如 Co₇ 团簇五角双锥的两个顶端原子, 其原子配位数为 5, 双锥其它五个原子的配位数是 4, 但其磁矩为 2.27 μ_B (GGA)和 2.22 μ_B (LSDA)却大于其它五个原子的磁矩 2.09 μ_B (GGA)和 2.11 μ_B (LSDA).

2.4 团簇的相对稳定性

表 5 列出了由 GGA 和 LSDA 两种方法计算得到的总能量. 为了进一步了解 Co_n(n=2~10)团簇的最低能量的几何构型稳定性的变化规律, 我们从如下的反应定义能量 E_b, 以及总能量的二次差分

Co_n → nCo (1)

E_b = E - 1/nE_n (2)

Δ²E_n = E_{n-1} + E_{n+1} - 2E_n (3)

式(2)中 E_b 为 Co_n 团簇分解为 Co 原子时的平均结合能, E 为一个 Co 原子的能量, E_n 为 Co_n 团簇的总能量. E_b 与 n 的关系曲线如图 3 所示. 随着 n

图 3 Co_n(n=2~10)团簇 E_b 与 n 的关系

Fig. 3 E_b of Co_n(n=2~10) clusters versus n

图 4 Co_n(n=2~10)团簇 Δ²E_n 与 n 的关系

Fig. 4 Δ²E_n of Co_n(n=2~10) clusters versus n

的增大, E_b 在逐渐地增大, 而且有收敛于一点的趋势, 在 n=9、10 时, 两种方法给出的平均结合能几乎完全相同. 式(3)中 E_n、E_{n-1} 和 E_{n+1} 分别为 Co_n、Co_{n-1} 和 Co_{n+1} 基态团簇的总能量. Δ²E_n 与 n 的关系曲线如图 4 所示. 随着 n 值的增大, 曲线没有奇偶交替出现, 在 n=3 出现了峰值, 以后每隔两个点出现一个峰值, 即 n=6、9 相继出现了峰值, 存在峰谷交替, 而且两种方法的平行性相当好. 在图 4 中, n=3、6 和 9 这些 3 的整数倍时, Δ²E_n 处于峰值, 说明在 Co_n(n=2~10)团簇中, Co₃、Co₆、Co₉ 的相对稳定性要大于其它团簇. 最稳定的是 Co₃ 团簇, Co₆ 次之, Co₆ 团簇的稳定性与 Mlynarski^[10] 和 Fan^[11] 所得结论相吻合. 最不稳定的团簇是 Co₅ 团簇, Co₇ 次之. 这些结果为下一步在实验上合成和理论上研究更大的团簇提供了一些理论依据.

3 结 论

1)在 GGA 和 LSDA 两种方法下, 我们所确定的基态构型完全一致, n=2、3 为线性和平面结构, n ≥ 4 为紧密堆积的三维结构.

2)Co_n(n=2~10)基态团簇的磁性在 n=5 和

9 出现了磁性局域最小点, 且基态团簇的磁性在 $n=2\sim 4$ 主要受平均键长的影响, 在 $n=5\sim 9$ 主要受平均配位数的影响, 在 $n=10$ 受原子间距和平均配位数的相互影响, 最终导致与 Co_8 基态团簇具有相同的磁性.

3) 在 Co_n ($n=2\sim 10$) 基态团簇中, Co_3 、 Co_6 和 Co_9 的相对稳定性要大于其它团簇. 最稳定的是 Co_3 团簇, Co_6 次之, 最不稳定的是 Co_5 团簇, Co_7 次之.

References

- Salahub, D. R. ; Messmer, R. P. *Surf. Sci.*, **1981**, **106**: 415
- Lee, K. ; Callaway, J. ; Dhar, S. *Phys. Rev. B*, **1985**, **30**: 1724
- Rosen, A. ; Rantala, T. T. *Z. Phys. D*, **1986**, **3**: 205
- Pastor, G. M. ; Dorantes-Davila, J. ; Benneman, K. H. *Phys. Rev. B*, **1989**, **40**: 7642
- Fujima, N. ; Yamaguchi, T. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **1989**, **58**: 3290
- Dunlap, B. I. *Phys. Rev. A*, **1990**, **41**: 5691
- Deheer, W. A. ; Milani, P. ; Chatelain, A. *Phys. Rev. Lett.*, **1990**, **65**: 488
- Bucher, J. P. ; Douglass, D. C. ; Bloomfield, L. A. *Phys. Rev. Lett.*, **1991**, **66**: 3052
- Louderback, J. G. ; Cox, A. J. ; listing, L. J. ; Douglass, D. C. ; Bloomfield, L. A. *Z. Phys. D*, **1993**, **26**: 301
- Mlynarski, P. ; Iglesias, M. ; Pereiro, M. ; Baldomir, D. ; Wojtczak, L. *Vacuum*, **1999**, **54**: 143
- Fan, H. J. ; Liu, C. W. ; Liao, M. S. *Chem. Phys. Lett.*, **1997**, **273**: 353
- Li, Z. Q. ; Gu, B. L. *Phys. Rev.*, **1993**, **47**: 13611
- Duan, H. M. ; Zhang, Q. O. *Phys. Lett. A*, **2001**, **280**: 333
- Webber, S. E. ; Rao, B. K. ; Jena, P. ; Stepanyuk, V. S. ; Hergert, W. ; Wildberger, K. ; Zeller, R. ; Dederichs, P. H. *J. Phys. : Condens. Matter*, **1997**, **9**: 10739
- Vosko, S. H. ; Wilk, L. ; Nusair, M. *Can. J. Phys.*, **1980**, **58**: 1200
- Becke, A. D. *J. Chem. Phys.*, **1998**, **88**: 1053
- Perdew, J. P. ; Wang, Y. *Phys. Rev. B*, **1992**, **54**: 13244
- Bouarab, S. ; Vega, A. ; López, M. J. ; Iñiguez, M. P. ; Alonso, J. A. *Phys. Rev. B*, **1997**, **55**: 13279
- Andriotis, A. N. ; Meonon, M. *Phys. Rev. B*, **1998**, **57**: 10069

Structure and Magnetism of Co_n ($n=2\sim 10$) Clusters*

Lü Jin Xu Xiao-Hong Wu Hai-Shun

(School of Chemistry and Material Science, Shanxi Normal University, Linfen 041004)

Abstract All geometry structures of Co_n ($n=2\sim 10$) clusters have been optimized, and the energy, frequency and magnetism of Co_n ($n=2\sim 10$) clusters were calculated using the local spin density approximation and generalized gradient approximation of density functional theory. We found the same ground state structures in the two methods, and discussed theoretically the influence of the average coordination number, average bond length and symmetry on clusters magnetism. For Co_n ($n=2\sim 4$) clusters, the magnetism of ground states strongly depends on average bond length, for Co_n ($n=5\sim 9$), it strongly depend on average coordination number, for Co_{10} , the factors of interatomic distance and average coordination number together lead to the same magnetism as Co_8 cluster. Average moments of Co_5 and Co_9 present magnetic magic number.

Keywords: Clusters, Structure of ground state, Magnetic moment, Average bond length, Average coordination number, Symmetry