

SOBRE EL ESTADO BASE DE LOS IONES-S

P. Negrete

*Departamento de Física, Escuela de Física y Matemáticas,
Universidad Central de Venezuela*

(Recibido: octubre 26, 1970)

ABSTRACT: It is shown in this paper, through the calculation of the spectroscopic factor g , that the point-multipole approximation is not sufficient to describe the ground state of the S -ions, its magnetic properties in particular, and some possible approaches to this problem are suggested.

I. INTRODUCTION

Los iones cuya estructura electrónica es $[Ar] 3d^5$ tienen un estado base S , es decir, momento angular orbital igual a cero; en particular, el estado base de los iones Mn^{2+} y Fe^{3+} es ${}^6S_{5/2}$. El campo cristalino no puede desdoblar este nivel como tampoco es posible hacerlo con la sola interacción espín-órbita. La teoría de grupos¹, sin embargo, establece que en un campo cúbico este nivel se desdobla en un nivel con simetría Γ_8 (con degeneración 4) y otro de simetría Γ_7 , con degeneración 2.

El origen de este desdoblamiento ha sido objeto de varios estudios empezando con un trabajo de Van Vleck². Desarrollos sucesivos han considerado los siguientes mecanismos: acoplamiento espín-órbita en orden superior de perturbación¹, interacción espín-espín además de mezcla de otras configuraciones³,

interacción espín-órbita, interacción espín-espín más mezcla de estados $|^4P\rangle$ y $|^6S\rangle$ via espín-órbita⁴, mezcla covalente anisotrópica⁵, estado S en red deformada⁶. El interés de conocer en forma más precisa el estado base de los iones- S está motivado por las siguientes evidencias experimentales¹:

- a) Hay grandes variaciones en la magnitud del desdoblamiento para diferentes sales que contienen el mismo ion.
- b) El signo del desdoblamiento en campo cúbico a , puede ser positivo o negativo.
- c) El desdoblamiento depende de la temperatura.
- d) El factor espectroscópico g muestra desviaciones del valor correspondiente al ion libre ($g_0 = 2.0023$). Estas desviaciones Δg son negativas en general, es decir, Δg es menor que cero, aunque para Mn^{2+} y Fe^{3+} , Δg es positivo.
- e) Se ha observado una estructura hiperfina anómala y muy grande.

La teoría de Watanabe⁴ da cuenta de muchas regularidades en conexión con las observaciones mencionadas arriba; sin embargo, no se logra obtener las observaciones relativas al factor espectroscópico g y al signo del desdoblamiento a . R. R. Sharma et al⁷ han desarrollado una teoría basada en la aproximación punto-multipolo obteniendo una función de onda para el estado base de los iones- S ; con esta función de onda han sido capaces de estimar la importancia relativa de los mecanismos de Watanabe, Blume-Orbach, Das, Sharma y Pryce.

El propósito del presente trabajo es el de investigar el estado base de los iones- S (obtenido con el modelo de punto-multipolo) mediante el estudio del cambio en el factor espectroscópico g .

II. FACTOR ESPECTROSCOPICO g .

Cuando un campo magnético H se halla presente su contribución al hamiltoniano del sistema es de la forma

$$\mathcal{H} = \beta\mu_0 H \cdot (L + g_0 S) \quad (1)$$

donde β es el magnetón de Bohr, μ_0 la permeabilidad del vacío, y g_0 es la relación giromagnética para espín libre. Escogiendo el eje Z tal que H es paralelo a él,

$$\mathcal{H} = \beta\mu_0 H (L_z + g_0 S_z) = \beta\mu_0 H [J_z + (g_0 - 1) S_z] \quad (2)$$

El cambio en la energía del estado base en presencia del campo magnético es, en primera aproximación

$$\Delta E = \langle JM | \mathcal{H} | JM \rangle = \beta\mu_0 H \{ M + (g_0 - 1) \langle JM | S_z | JM \rangle \} \quad (3)$$

Por definición $\Delta E = g\beta\mu_0 HM$ y por tanto

$$g = 1 + (g_0 - 1) [\langle JM | S_z | JM \rangle / M] \quad (4)$$

III. FUNCION DE ONDA PARA EL ESTADO BASE

Mezcla $|S\rangle - |P\rangle$.

Consideremos la función $|LSJM\rangle$ como representativa del estado ${}^6S_{5/2}$ con $L = 0$, $S = 5/2$, $J = 5/2$, $M = J, J-1, \dots, -J$. La interacción espin-orbital opera bajo la siguiente regla de selección: $\Delta J = \Delta M = 0$, $\Delta L = 0, \pm 1$. Tomando $|0^{5/2}_{5/2} M\rangle \equiv |^{5/2}_{5/2} M\rangle$ como función de orden cero, la función correcta hasta segundo orden de perturbación es de la forma

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & |0^{5/2}_{5/2} M\rangle - \frac{\langle 1^{3/2}_{5/2} M | \Lambda | 0^{5/2}_{5/2} M \rangle}{E({}^4P) - E({}^6S)} |1^{3/2}_{5/2} M\rangle \\ & + \frac{\langle 1^{3/2}_{5/2} M | \Lambda | 1^{3/2}_{5/2} M \rangle \langle 1^{3/2}_{5/2} M | \Lambda | 0^{5/2}_{5/2} M \rangle}{[E({}^4P) - E({}^6S)]^2} |1^{3/2}_{5/2} M\rangle \\ & - \frac{\langle 0^{5/2}_{5/2} M | \Lambda | 0^{5/2}_{5/2} M \rangle \langle 1^{3/2}_{5/2} M | \Lambda | 0^{5/2}_{5/2} M \rangle}{[E({}^4P) - E({}^6S)]^2} |1^{3/2}_{5/2} M\rangle \\ & + \frac{|\langle 1^{3/2}_{5/2} M | \Lambda | 0^{5/2}_{5/2} M \rangle|^2}{[E({}^4P) - E({}^6S)]^2} |0^{5/2}_{5/2} M\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

donde $\Lambda = \sum_i \lambda_i l_i \cdot s_i$ es la interacción espín-órbita y $E(^4P) - E(^6S)$ es la diferencia de energía entre los niveles $|^4P\rangle$ y $|^6S\rangle$. Usando las relaciones dadas por Racah⁸ se obtiene la función

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \left(1 - \frac{1}{2}a^2\right) |0^{5/2}_{5/2} M\rangle - a |1^{3/2}_{5/2} M\rangle \\ &\equiv \left(1 - \frac{1}{2}a^2\right) |^6S_{5/2}\rangle - a |^4P_{5/2}\rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

donde

$$a = -\frac{25\sqrt{3}}{3} \frac{\lambda}{E(^4P) - E(^6S)}$$

Sustituyendo los valores adecuados para el Fe^{3+4} , $\lambda = 440 \text{ cm}^{-1}$, $E(^4P) - E(^6S) = 3.51 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ y combinando las ecuaciones (4) y (6) se obtiene $g = 1.8293$; esto es,

$$\Delta g = -0.1724$$

Mezcla con estados excitados superiores: modelo de punto multipolo

En la función de onda considerada aquí, por argumentos de simetría, basta considerar aquellas funciones que contengan componentes que se transformen de acuerdo a la representación irreducible Γ_4 del grupo cúbico; dichas funciones son $|^4P\rangle$, $|^4F\rangle$ y $|^4G\rangle$. Con las fases definidas de manera adecuada⁷ la función de onda para el estado base es de la forma

$$|\Psi\rangle = [\alpha_i |P^4\Gamma_4 M_\Gamma\rangle + \beta_i |F^4\Gamma_4 M_\Gamma\rangle + \gamma_i |G^4\Gamma_4 M_\Gamma\rangle] \quad (7)$$

en donde $M_\Gamma = 1, 0, -1$ y $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ son coeficientes que han sido obtenidos del determinante secular del campo cristalino. Aplicando la interacción espín-órbita se obtiene la función perturbada

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle' = & |{}^6S M_S\rangle - \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{\Delta_i} \lambda [a(M_S) |{}^4\Gamma_4 \quad 1, M_S - 1\rangle \\
 & + b(M_S) |{}^4\Gamma_4 - 1, M_S + 1\rangle + c(M_S) |{}^4\Gamma_4 0, M_S\rangle] \quad (8)
 \end{aligned}$$

siendo Δ_i el valor propio de la función descrita en la eq. (7) con coeficientes $(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)$; las otras funciones están definidas de la manera siguiente:

$$\begin{aligned}
 a(M_S) &= \frac{1}{2} \langle {}^4P 1 M_S - 1 | \sum_j l_j^+ s_j^- | {}^6S M_S \rangle \\
 b(M_S) &= \frac{1}{2} \langle {}^4P - 1 M_S + 1 | \sum_j l_j^- s_j^+ | {}^6S M_S \rangle \\
 c(M_S) &= \langle {}^4P 0 M_S | \sum_j l_j^z s_j^z | {}^6S M_S \rangle
 \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
 |{}^4\Gamma_4 1 M_S\rangle &= \{ \alpha_i | P 1 \rangle + \beta_i [\sqrt{3}/8 | F 1 \rangle + \sqrt{5}/8 | F - 3 \rangle] \\
 &\quad - \gamma_i [\sqrt{7}/8 | G 1 \rangle + \sqrt{1}/8 | G - 3 \rangle] \} \cdot |{}^{3/2} M_S\rangle \\
 |{}^4\Gamma_4 0 M_S\rangle &= \{ \alpha_i | P 0 \rangle + \beta_i | F 0 \rangle + \\
 &\quad + \gamma_i [(-\sqrt{1}/2) | G 4 \rangle + \sqrt{1}/2 | G - 4 \rangle] \} \cdot |{}^{3/2} M_S\rangle \quad (10)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 |{}^4\Gamma_4 - 1 M_S\rangle &= \{ \alpha_i | P - 1 \rangle + \beta_i [(\sqrt{5}/8) | F 3 \rangle + \sqrt{3}/8 | F - 1 \rangle] \\
 &\quad + \gamma_i [-(\sqrt{1}/8) | G 3 \rangle + (\sqrt{7}/8) | G - 1 \rangle] \} \cdot |{}^{3/2} M_S\rangle
 \end{aligned}$$

con

$$|{}^4P M_L M_S\rangle \equiv |{}^4P M_L\rangle \cdot |S = 3/2 M_S\rangle.$$

Usando la función (8) y con los valores de los parámetros dados en las Tablas I, II y III, procedemos a calcular el factor espectroscópico g .

Para ello reescribimos (8) de la manera siguiente:

$$\begin{aligned}
 |\Phi\rangle = & \phi_0 - \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{\Delta_i} \lambda [a \{ \alpha_i \phi_1 + \beta_i \phi_2 - \gamma_i \phi_3 \} \\
 & + b \{ \alpha_i \phi_4 + \beta_i \phi_5 + \gamma_i \phi_6 \} \\
 & + c \{ \alpha_i \phi_7 + \beta_i \phi_8 + \gamma_i \phi_9 \}]
 \end{aligned} \tag{11}$$

donde las ϕ_i están definidas en (8), (9) y (10); puesto que estas funciones están expresadas en el esquema $|LSM_L M_S\rangle$, conviene expresarlas en el esquema $|LSJM\rangle$. La transformación correspondiente está dada por la expresión

$$\begin{aligned}
 |LSM_L M_S\rangle = & \sum_{J=L+S}^{\quad} \sum_{M=J}^{\quad} C(LSJ; M_L M_S M) |LSJM\rangle \\
 & J = |L-S| \quad M = -J
 \end{aligned} \tag{12}$$

con la restricción $M = M_L + M_S$, $M = -J, -J+1, \dots, +J$. El valor de g no depende de M_S , por lo cual escogemos uno cualquiera de los seis posibles valores de M_S , por ejemplo $1/2$. Realizando los cálculos correspondientes para las funciones ϕ_i , se obtiene el resultado siguiente:

$$\phi_0 = C_0 |0^{5/2} 5/2 1/2\rangle$$

$$\phi_1 = C_{11} |1^{3/2} 1/2 1/2\rangle + C_{12} |1^{3/2} 3/2 1/2\rangle + C_{13} |1^{3/2} 5/2 1/2\rangle$$

$$\begin{aligned}
 \phi_2 = & \sqrt{3}/8 [C_{21} |3^{1/2} 3/2 1/2\rangle + C_{22} |3^{3/2} 5/2 1/2\rangle + C_{23} |3^{3/2} 7/8 1/2\rangle \\
 & + C_{24} |3^{3/2} 9/2 1/2\rangle] + \sqrt{5}/8 [C_{25} |3^{3/2} 7/2 - 7/2\rangle + C_{26} |3^{3/2} 9/2 - 7/2\rangle]
 \end{aligned}$$

$$\phi_3 = \sqrt{7}/8 [C_{31} |4^{3/2} 5/2 1/2\rangle + C_{32} |4^{3/2} 7/2 1/2\rangle + C_{33} |4^{3/2} 9/2 1/2\rangle + C_{34} |4^{3/2} 11/2 1/2\rangle]$$

$$+ \sqrt{1/8} [C_{35} | 4^{3/2} 7/2 - 7/2 \rangle + C_{36} | 4^{3/2} 9/2 - 7/2 \rangle + C_{37} | 4^{3/2} 11/2 - 7/2 \rangle]$$

$$\phi_4 = C_{41} | 1^{3/2} 1/2 1/2 \rangle + C_{42} | 1^{3/2} 3/2 1/2 \rangle + C_{43} | 1^{3/2} 5/2 1/2 \rangle$$

$$\phi_5 = \sqrt{5/8} [C_{51} | 3^{3/2} 9/2 9/2 \rangle] + \sqrt{3/8} [C_{52} | 3^{3/2} 3/2 1/2 \rangle + C_{53} | 3^{3/2} 5/2 1/2 \rangle + C_{54} | 3^{3/2} 7/2 1/2 \rangle + C_{55} | 3^{3/2} 9/2 1/2 \rangle]$$

$$\phi_6 = -\sqrt{1/8} [C_{61} | 4^{3/2} 9/2 9/2 \rangle + C_{62} | 4^{3/2} 11/2 9/2 \rangle] + \sqrt{7/8} [C_{63} | 4^{3/2} 5/2 1/2 \rangle + C_{64} | 4^{3/2} 7/2 1/2 \rangle + C_{65} | 4^{3/2} 9/2 1/2 \rangle + C_{66} | 4^{3/2} 11/2 1/2 \rangle]$$

$$\phi_7 = C_{71} | 1^{3/2} 1/2 1/2 \rangle + C_{72} | 1^{3/2} 3/2 1/2 \rangle + C_{73} | 1^{3/2} 5/2 3/4 \rangle$$

$$\phi_8 = C_{81} | 3^{3/2} 3/2 1/2 \rangle + C_{82} | 3^{3/2} 5/2 1/2 \rangle + C_{83} | 3^{3/2} 7/2 1/2 \rangle + C_{84} | 3^{3/2} 9/2 1/2 \rangle$$

$$\phi_9 = -\sqrt{1/2} [C_{91} | 4^{3/2} 9/2 9/2 \rangle + C_{92} | 4^{3/2} 11/2 9/2 \rangle]$$

$$+ \sqrt{1/2} [C_{93} | 4^{3/2} 7/2 - 7/2 \rangle + C_{94} | 4^{3/2} 9/2 - 7/2 \rangle + C_{95} | 4^{3/2} 11/2 - 7/2 \rangle]$$

donde las C_{ij} son coeficientes de Racah definidos en la Tabla IV.

En forma compacta se puede escribir

$$|\Phi\rangle = \sum_{LSM_L} \sum_{J = |L-S|}^{J=L+S} \sum_{M=-J}^{M=J} A(LSM_L M_S) C(LSJ; M_L M_S M) |LSJM\rangle \quad (13)$$

donde $L = 0, 1, 3, 4$; $S = 3/2, 5/2$ y los $A(LSM_L M_S)$ son coeficientes numéricos dados en la Tabla V.

Usando la función de onda anterior, el cálculo del factor espectroscópico g se reduce esencialmente a la evaluación de la expresión

$$\begin{aligned}
 & \langle \Phi | J_z + S_z | \Phi \rangle \\
 &= \sum_{L S M_L M_S} \sum_J \sum_M A^2(L S M_L M_S) | C(L S J ; M_L M_S M) |^2 \langle L S J M | J_z + S_z | L S J M \rangle^2
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

obteniéndose el resultado

$$g = \sum_{L S M_L M_S} \sum_J \sum_M A^2(L S M_L M_S) | C(L S J ; M_L M_S M) |^2 g(L S J)
 \tag{15}$$

Usando los valores de las constantes numéricas dadas en las diferentes Tablas del Apéndice, con los datos adecuados al Mn^{2+} se obtiene : $g = 2.00076$ y

$$\Delta g = - 0.00154
 \tag{16}$$

IV. CONCLUSIONES

El modelo de punto-multipolo produce una función de onda para el estado base de los iones-S que da cuenta de muchas de las características de estos iones. Sin embargo, el cálculo realizado en este trabajo para el factor espectroscópico g muestra que algunas contribuciones no han sido incluidas. La inclusión de más estados excitados no parece mejorar esencialmente los resultados con respecto al factor espectroscópico g , al menos para los iones de metales de transición. Como puede verse en la ecuación (16) el valor calculado para Δg , aunque mejora sustancialmente en valor absoluto con respecto al cálculo realizado usando funciones más simplificadas [ec. (6)], aún es del signo inapropiado.

Los resultados anteriores permiten sugerir que una descripción más adecuada del estado base de los iones-S debe hacerse considerando enfoques como los siguientes:

a) Construcción de la función de onda considerando no sólo funciones $3d^5$, sino mezclando éstas con otras configuraciones "excitadas". Esto podría mejorar los resultados al introducir explícitamente los factores de apantallamiento discutidos por Sternheimer¹⁰.

b) Descripción de la función de onda considerando la mezcla de funciones $3d^5$ del metal con funciones $2s$, $2p$, etc., de los iones no metálicos vecinos,

es decir, en el espíritu de la teoría de Ligantes⁹.

El segundo de los enfoques podría suministrar un esquema apropiado para discutir el efecto de anisotropía y estructura hiperfina anómala ya que en dicho esquema los efectos direccionales se consideran en forma explícita. Un estudio del estado base del Fe^{3+} en el esquema de la teoría de Ligantes está en proceso de publicación¹¹.

AGRADECIMIENTOS

El autor agradece a Juan Peyre y Miroslav Vetrovec por sus comentarios sobre este problema.

REFERENCIAS

1. Low, W., Solid State Physics, Suplemento 2, 32 (New York, London; Academic Press, 1960).
2. Van Vleck, J.M., and Penney, W.G., Phil. Mag. 17 (1934) 961.
3. Pryce, M.H.L., Phys. Rev. 80 (1950) 1107.
4. Watanabe, H., Progr. Theor. Phys. 18 (1957) 405.
5. Kondo, J., Progr. Theor. Phys. 23 (1960) 106.
6. Blume, M., and Orbach, R., Phys. Rev. 127 (1962) 1587.
7. Sharma, R.R., Das, T.P., and Orbach, R., Phys. Rev. 149 (1966) 257.
8. Racah, G., Phys. Rev. 63 (1943) 367.
9. Watanabe, H., "Operator Methods in Ligand Field Theory", (Prentice-Hall, New Jersey, 1966).
10. Sternheimer, R.M., Phys. Rev. 132 (1963) 1637.
11. Negrete, P., and Leon, V., para publicarse en Journ. of Phys. and Chem. of Sol., 1970.
12. Moore, C.E., "Atomic Energy Levels", Natl. Bur. of Standards (US). Washington, D.C., 1949.

RESUMEN

En este trabajo se muestra, mediante el cálculo del factor espectroscópico g , que la aproximación punto-multipolo no es suficiente para describir el estado base de los iones-S, en particular sus propiedades magnéticas, y se sugieren algunos enfoques posibles a este problema.

APENDICE

TABLA I.- Energías de separación de los niveles del ion Mn^{2+} libre¹²

$$E(^4G) - E(^6S) = 26800 \text{ cm}^{-1}$$

$$E(^4F) - E(^4G) = 16782.6 \text{ cm}^{-1}$$

$$E(^4P) - E(^4G) = 2357.5 \text{ cm}^{-1}$$

TABLA II.- Valores de las funciones $a(M_S)$, $b(M_S)$ y $c(M_S)$

M_S	5/2	3/2	1/2	- 1/2	- 3/2	- 5/2
$a(M_S)$	$\sqrt{5}$	$\sqrt{3}$	$\frac{1}{2}\sqrt{6}$	$\frac{1}{2}\sqrt{2}$	0	0
$b(M_S)$	0	0	$\frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{6}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{5}$
$c(M_S)$	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	0

TABLA III.- Valores de los coeficientes α_i , β_i , γ_i , adecuados para un $10 Dq = 9000 \text{ cm}^{-1}$.

i	α_i	β_i	γ_i	Δi [en cm^{-1}]
1	0.633	- 0.127	0.763	19501
2	0.761	0.285	- 0.583	35380
3	0.143	- 0.950	- 0.277	44805

TABLA IV.- Tabla de los coeficientes C_{ij} (Racah [8]).

$C_0 = C(0^5 \frac{1}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$	$C_{36} = C(4^3 \frac{1}{2}; -3 - \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$	$C_{66} = C(4^3 \frac{1}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$
$C_{11} = C(1^3 \frac{1}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{37} = C(4^3 \frac{1}{2}; -3 - \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$	$C_{71} = C(1^3 \frac{1}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$
$C_{12} = C(1^3 \frac{3}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{41} = C(1^3 \frac{1}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{72} = C(1^3 \frac{3}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$
$C_{13} = C(1^3 \frac{5}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{42} = C(1^3 \frac{3}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{73} = C(1^3 \frac{5}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$
$C_{21} = C(3^3 \frac{3}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{43} = C(1^3 \frac{5}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{81} = C(3^3 \frac{3}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$
$C_{22} = C(3^3 \frac{5}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{51} = C(3^3 \frac{1}{2}; 3^3 \frac{1}{2})$	$C_{82} = C(3^3 \frac{5}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$
$C_{23} = C(3^3 \frac{7}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{52} = C(3^3 \frac{3}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{83} = C(3^3 \frac{7}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$
$C_{24} = C(3^3 \frac{9}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{53} = C(3^3 \frac{5}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{84} = C(3^3 \frac{9}{2}; 0^1 \frac{1}{2})$
$C_{25} = C(3^3 \frac{7}{2}; -3 - \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$	$C_{54} = C(3^3 \frac{7}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{91} = C(4^3 \frac{1}{2}; 4^1 \frac{1}{2})$
$C_{26} = C(3^3 \frac{9}{2}; -3 - \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$	$C_{55} = C(3^3 \frac{9}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{92} = C(4^3 \frac{1}{2}; -4^1 \frac{1}{2})$
$C_{31} = C(4^3 \frac{1}{2}; -1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{61} = C(4^3 \frac{1}{2}; -3^3 \frac{1}{2})$	$C_{93} = C(4^3 \frac{1}{2}; -4^1 \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$
$C_{32} = C(4^3 \frac{1}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{62} = C(4^3 \frac{1}{2}; 3^3 \frac{1}{2})$	$C_{94} = C(4^3 \frac{1}{2}; -4^1 \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$
$C_{33} = C(4^3 \frac{1}{2}; -1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{63} = C(4^3 \frac{1}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	$C_{95} = C(4^3 \frac{1}{2}; -4^1 \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$
$C_{34} = C(4^3 \frac{1}{2}; 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$C_{64} = C(4^3 \frac{1}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	
$C_{35} = C(4^3 \frac{1}{2}; -3 - \frac{1}{2} - 7 \frac{1}{2})$	$C_{65} = C(4^3 \frac{1}{2}; -1^3 \frac{1}{2})$	

TABLA V.- Tabla de los coeficientes $A(\text{LSM}_L M_S)(\times 10^{-3})$. Los no indicados son cero.

$A(0^5 \overline{0^1 \frac{1}{2}}) = 10^3$	$A(4^3 \frac{1}{2} - 3 - \frac{1}{2}) = 8$	$A(4^3 \frac{1}{2} - 1^3 \frac{1}{2}) = -5$
$A(1^3 \frac{1}{2} 1 - \frac{1}{2}) = 7$	$A(1^3 \frac{1}{2} - 1^3 \frac{1}{2}) = 4.5$	$A(1^3 \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}) = -1$
$A(3^3 \frac{1}{2} 1 - \frac{1}{2}) = 1$	$A(3^3 \frac{1}{2} 3^3 \frac{1}{2}) = 1$	$A(3^3 \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}) = -2$
$A(3^3 \frac{1}{2} - 3 - \frac{1}{2}) = 2$	$A(3^3 \frac{1}{2} - 1^3 \frac{1}{2}) = 1$	$A(4^3 \frac{1}{2} 4^1 \frac{1}{2}) = 9$
$A(4^3 \frac{1}{2} 1 - \frac{1}{2}) = 8$	$A(4^3 \frac{1}{2} 3^3 \frac{1}{2}) = 2$	$A(4^3 \frac{1}{2} - 4^1 \frac{1}{2}) = -9$