

Multipole population coefficients

atom	P_v	P_{00}	P_{11}	P_{1-1}	P_{10}
F(4)	7.35(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.01(1)
F(3)	7.35(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.01(0)
F(6)	7.35(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.01(0)
F(1)	7.25(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.04(2)
F(5)	7.35(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.01(0)
F(2)	7.25(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.04(2)
F(8)	7.25(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.04(0)
F(7)	7.25(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.04(0)
C(2)	3.70(6)	0.00(0)	0.04(2)	0.04(2)	0.01(0)
C(5)	3.70(0)	0.00(0)	0.04(0)	0.04(0)	0.01(0)
C(3)	3.35(5)	0.00(0)	0.12(2)	0.06(2)	-0.01(0)
C(4)	3.35(0)	0.00(0)	0.12(0)	0.06(0)	-0.01(0)
C(1)	3.74(8)	0.00(0)	0.00(2)	0.00(2)	0.13(0)
C(6)	3.74(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.13(0)

atom	P_{20}	P_{21}	P_{2-1}	P_{22}	P_{2-2}
F(4)	-0.05(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(3)	-0.05(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(6)	-0.05(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(1)	-0.11(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(5)	-0.05(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(2)	-0.11(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(8)	-0.11(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(7)	-0.11(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(2)	0.01(2)	0.00(0)	0.03(0)	-0.07(2)	0.10(2)
C(5)	0.01(0)	0.00(0)	0.03(0)	-0.07(0)	0.10(0)
C(3)	0.05(2)	0.01(0)	-0.01(0)	0.02(1)	0.06(2)
C(4)	0.05(0)	0.01(0)	-0.01(0)	0.02(0)	0.06(0)
C(1)	0.19(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.02(2)	0.00(2)
C(6)	0.19(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.02(0)	0.00(0)

atom	P_{30}	P_{31}	P_{3-1}	P_{32}	P_{3-2}	P_{33}	P_{3-3}
F(4)	-0.01(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(3)	-0.01(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(6)	-0.01(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(1)	0.03(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(5)	-0.01(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(2)	0.03(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(8)	0.03(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(7)	0.03(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(2)	-0.03(0)	-0.04(2)	-0.03(2)	-0.01(0)	-0.01(0)	0.21(2)	-0.16(2)
C(5)	-0.03(0)	-0.04(0)	-0.03(0)	-0.01(0)	-0.01(0)	0.21(0)	-0.16(0)
C(3)	-0.02(0)	-0.22(2)	-0.23(2)	0.02(0)	0.03(0)	0.18(2)	-0.19(2)
C(4)	-0.02(0)	-0.22(0)	-0.23(0)	0.02(0)	0.03(0)	0.18(0)	-0.19(0)
C(1)	0.29(0)	0.00(2)	0.00(2)	0.33(0)	0.00(0)	0.00(3)	0.00(2)
C(6)	0.29(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.33(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)

atom	P_{40}	P_{41}	P_{4-1}	P_{42}	P_{4-2}	P_{43}	P_{4-3}	P_{44}	P_{4-4}
F(4)	0.00(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(6)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(1)	0.02(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(5)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(2)	0.02(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(8)	0.02(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
F(7)	0.02(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(2)	0.04(2)	0.00(0)	-0.03(0)	0.00(2)	-0.02(2)	0.02(0)	0.01(0)	0.06(2)	-0.01(2)
C(5)	0.04(0)	0.00(0)	-0.03(0)	0.00(0)	-0.02(0)	0.02(0)	0.01(0)	0.06(0)	-0.01(0)
C(3)	-0.04(2)	0.00(0)	0.01(0)	-0.01(2)	0.14(2)	0.00(0)	0.05(0)	0.08(2)	0.03(2)
C(4)	-0.04(0)	0.00(0)	0.01(0)	-0.01(0)	0.14(0)	0.00(0)	0.05(0)	0.08(0)	0.03(0)
C(1)	-0.03(3)	0.00(0)	0.00(0)	-0.05(3)	0.00(2)	0.00(0)	0.00(0)	-0.03(3)	0.00(3)
C(6)	-0.03(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.05(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.03(0)	0.00(0)