

Multipole population coefficients

atom	P_v	P_{00}	P_{11}	P_{1-1}	P_{10}
O(3)	6.25(4)	0.00(0)	-0.01(1)	-0.09(1)	0.00(0)
O(4)	6.39(3)	0.00(0)	-0.08(2)	-0.04(1)	-0.03(2)
O(1)	6.71(4)	0.00(0)	-0.01(2)	0.07(1)	-0.18(2)
O(2)	6.57(4)	0.00(0)	0.00(2)	-0.01(1)	-0.06(2)
N(1)	5.53(5)	0.00(0)	-0.04(2)	-0.12(1)	0.00(0)
C(1)	4.08(3)	0.00(0)	-0.04(1)	0.03(1)	-0.07(2)
C(2)	4.54(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.15(1)
C(3)	3.98(3)	0.00(0)	0.00(1)	-0.01(1)	-0.12(2)
C(4)	4.34(4)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.19(2)
C(5)	4.54(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.15(0)
C(6)	3.94(5)	0.00(0)	0.02(2)	-0.08(2)	0.00(0)
C(7)	3.86(4)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.01(1)
C(8)	4.85(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.14(1)
C(9)	4.85(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.14(0)
C(10)	4.85(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.14(0)
C(11)	3.87(5)	0.00(0)	0.11(2)	0.03(2)	0.02(2)
H(1)	0.71(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.20(2)
H(21)	0.89(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.18(1)
H(22)	0.89(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.18(0)
H(41)	0.89(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.14(1)
H(42)	0.89(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.14(0)
H(51)	0.98(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.18(1)
H(52)	0.98(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.18(0)
H(81)	0.90(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.22(1)
H(82)	0.90(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.22(0)
H(83)	0.90(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.22(0)
H(91)	0.95(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(1)
H(92)	0.95(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(0)
H(93)	0.95(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(0)
H(101)	0.89(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(1)
H(102)	0.89(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(0)
H(103)	0.89(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(0)
H(10)	0.67(3)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.16(2)

atom	P_{20}	P_{21}	P_{2-1}	P_{22}	P_{2-2}
O(3)	-0.01(2)	0.00(0)	0.00(0)	-0.05(1)	0.05(1)
O(4)	-0.06(2)	0.04(1)	0.03(2)	-0.09(1)	0.02(1)
O(1)	-0.05(2)	0.00(2)	-0.04(2)	-0.04(1)	0.00(2)
O(2)	-0.07(2)	0.00(2)	0.03(2)	-0.05(2)	0.00(1)
N(1)	-0.07(2)	0.00(0)	0.00(0)	-0.03(1)	0.07(1)
C(1)	0.05(2)	0.02(1)	0.01(1)	0.00(1)	-0.01(1)
C(2)	0.14(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.10(1)	0.00(0)
C(3)	0.01(2)	0.01(1)	-0.01(1)	-0.06(1)	0.03(1)
C(4)	0.13(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.13(2)	0.00(0)
C(5)	0.14(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.10(0)	0.00(0)
C(6)	-0.41(2)	0.00(0)	0.00(0)	-0.06(2)	0.06(2)
C(7)	-0.10(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(8)	-0.04(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(9)	-0.04(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(10)	-0.04(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(11)	-0.31(2)	-0.01(2)	-0.01(2)	0.11(2)	0.01(2)

atom	P_{30}	P_{31}	P_{3-1}	P_{32}	P_{3-2}	P_{33}	P_{3-3}
O(3)	0.00(0)	0.02(1)	-0.07(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.09(1)	0.01(1)
O(4)	0.01(2)	0.14(2)	-0.06(1)	0.02(1)	0.02(1)	0.04(1)	0.02(1)
O(1)	-0.08(2)	0.15(2)	-0.04(2)	-0.05(2)	-0.01(1)	0.10(1)	0.01(1)
O(2)	-0.08(1)	0.03(1)	0.00(1)	-0.01(1)	0.02(1)	0.03(1)	0.02(1)
N(1)	0.00(0)	0.03(2)	0.01(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.22(1)	0.01(1)
C(1)	0.28(2)	-0.02(2)	0.03(2)	-0.02(2)	0.01(2)	-0.03(1)	-0.14(2)
C(2)	0.01(1)	0.00(0)	0.00(0)	-0.29(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(3)	0.33(2)	-0.03(1)	-0.03(2)	-0.02(2)	0.01(1)	0.04(1)	-0.18(2)
C(4)	-0.02(2)	0.00(0)	0.00(0)	-0.25(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(5)	0.01(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.29(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(6)	0.00(0)	0.08(2)	0.07(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.41(2)	-0.10(2)
C(7)	0.29(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.25(2)	0.00(0)
C(8)	0.35(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(1)	0.00(0)
C(9)	0.35(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(0)	0.00(0)
C(10)	0.35(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.21(0)	0.00(0)
C(11)	0.05(2)	0.05(2)	-0.02(2)	0.06(2)	0.03(2)	0.35(2)	-0.02(2)

atom	P_{40}	P_{41}	P_{4-1}	P_{42}	P_{4-2}	P_{43}	P_{4-3}	P_{44}	P_{4-4}
O(3)	-0.02(2)	0.00(0)	0.00(0)	-0.03(2)	0.00(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(1)	0.00(1)
O(4)	-0.02(2)	-0.06(2)	0.02(2)	0.05(2)	-0.04(2)	0.00(1)	0.02(1)	0.02(1)	0.02(1)
O(1)	-0.05(2)	-0.04(2)	-0.01(2)	-0.05(2)	0.00(2)	0.03(2)	0.01(2)	0.01(1)	0.04(1)
O(2)	0.00(2)	-0.02(2)	0.00(1)	-0.01(2)	0.00(1)	0.05(1)	0.04(1)	-0.01(1)	-0.01(1)
N(1)	0.05(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.02(2)	0.00(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.05(2)	-0.01(2)
C(1)	0.02(2)	0.00(2)	-0.03(2)	-0.06(2)	0.06(2)	0.05(2)	0.09(2)	0.03(2)	-0.02(2)
C(2)	-0.03(2)	0.00(0)	0.00(0)	-0.08(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.11(1)	0.00(0)
C(3)	0.01(2)	-0.01(2)	0.05(2)	-0.02(2)	0.00(2)	-0.07(2)	0.14(2)	0.00(2)	-0.03(2)
C(4)	-0.08(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.01(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.11(2)	0.00(0)
C(5)	-0.03(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.08(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.11(0)	0.00(0)
C(6)	0.08(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.11(2)	-0.03(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.06(2)	-0.02(2)
C(7)	0.20(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(2)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(8)	0.11(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.05(1)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(9)	0.11(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.05(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(10)	0.11(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)	-0.05(0)	0.00(0)	0.00(0)	0.00(0)
C(11)	0.01(2)	-0.04(2)	0.00(2)	0.04(2)	-0.05(2)	-0.01(3)	0.03(2)	-0.12(3)	-0.04(2)