

Multipole population coefficients

atom	P_v	P_{00}	P_{11}	P_{1-1}	P_{10}
O(1)	6.28(4)	0.00(0)	-0.10(1)	-0.08(1)	0.07(1)
O(2)	6.23(3)	0.00(0)	-0.08(1)	0.07(1)	0.07(1)
O(3)	6.20(2)	0.00(0)	-0.06(1)	0.00(1)	0.01(1)
O(4)	6.20(0)	0.00(0)	-0.06(0)	0.00(0)	0.01(0)
N(1)	5.29(5)	0.00(0)	-0.05(1)	0.07(1)	0.03(1)
C(1)	4.06(3)	0.00(0)	-0.02(2)	0.05(1)	-0.07(2)
C(2)	3.92(3)	0.00(0)	-0.01(1)	0.10(2)	0.05(1)
C(3)	4.06(2)	0.00(0)	-0.04(1)	0.00(1)	-0.02(1)
C(4)	3.89(3)	0.00(0)	0.05(1)	0.15(1)	-0.01(2)
C(5)	4.06(0)	0.00(0)	-0.04(0)	0.00(0)	-0.02(0)
C(6)	4.06(0)	0.00(0)	-0.04(0)	0.00(0)	-0.02(0)
C(7)	3.93(4)	0.00(0)	0.14(1)	0.01(1)	-0.03(2)
C(8)	4.33(4)	0.00(0)	0.04(2)	0.04(1)	0.07(1)
H(1)	1.01(3)	0.00(0)	0.38(2)	-0.05(2)	-0.16(2)
H(3)	0.75(1)	0.00(0)	0.18(1)	0.00(0)	0.00(0)
H(5)	0.75(0)	0.00(0)	0.18(0)	0.00(0)	0.00(0)
H(6)	0.75(0)	0.00(0)	0.18(0)	0.00(0)	0.00(0)
H(8A)	0.74(1)	0.00(0)	0.11(1)	0.00(0)	0.00(0)
H(8B)	0.74(0)	0.00(0)	0.11(0)	0.00(0)	0.00(0)
H(8C)	0.74(0)	0.00(0)	0.11(0)	0.00(0)	0.00(0)

atom	P_{20}	P_{21}	P_{2-1}	P_{22}	P_{2-2}
O(1)	0.05(1)	-0.05(1)	0.02(1)	0.02(1)	0.04(1)
O(2)	-0.13(1)	0.05(1)	0.05(1)	-0.12(1)	-0.01(1)
O(3)	-0.08(1)	-0.01(1)	0.00(1)	-0.13(1)	0.00(1)
O(4)	-0.08(0)	-0.01(0)	0.00(0)	-0.13(0)	0.00(0)
N(1)	-0.24(1)	-0.07(1)	0.03(1)	0.04(1)	-0.01(1)
C(1)	-0.20(1)	0.01(1)	0.00(1)	-0.05(1)	0.01(1)
C(2)	-0.10(1)	0.05(1)	0.00(1)	0.01(1)	0.00(1)
C(3)	-0.20(1)	-0.02(1)	0.01(1)	0.01(1)	-0.01(1)
C(4)	-0.08(1)	0.06(1)	-0.03(1)	0.03(1)	-0.15(1)
C(5)	-0.20(0)	-0.02(0)	0.01(0)	0.01(0)	-0.01(0)
C(6)	-0.20(0)	-0.02(0)	0.01(0)	0.01(0)	-0.01(0)
C(7)	-0.35(1)	0.06(1)	-0.05(1)	0.06(1)	0.03(1)
C(8)	-0.02(1)	0.01(1)	-0.06(1)	-0.04(1)	-0.02(1)
H(1)	-0.14(3)	-0.05(3)	0.08(3)	0.23(3)	-0.02(3)

atom	P_{30}	P_{31}	P_{3-1}	P_{32}	P_{3-2}	P_{33}	P_{3-3}
O(1)	0.04(1)	-0.05(1)	0.01(1)	0.01(1)	0.00(1)	0.08(1)	-0.06(1)
O(2)	-0.02(1)	0.02(1)	0.01(1)	0.03(1)	-0.02(1)	0.06(1)	-0.04(1)
O(3)	0.00(1)	-0.01(1)	-0.01(1)	-0.01(1)	0.02(1)	0.03(1)	0.00(1)
O(4)	0.00(0)	-0.01(0)	-0.01(0)	-0.01(0)	0.02(0)	0.03(0)	0.00(0)
N(1)	-0.02(2)	0.05(2)	0.06(2)	-0.03(2)	0.03(1)	0.46(2)	0.04(2)
C(1)	-0.07(2)	-0.09(2)	0.03(2)	0.01(2)	0.04(2)	0.38(2)	-0.05(2)
C(2)	0.02(2)	0.07(2)	-0.01(2)	0.01(2)	-0.04(2)	0.29(2)	-0.02(2)
C(3)	0.02(1)	-0.01(1)	0.03(1)	-0.02(1)	0.01(1)	0.32(1)	-0.01(1)
C(4)	-0.01(2)	-0.04(2)	0.04(2)	0.03(2)	-0.01(2)	0.28(2)	0.01(2)
C(5)	0.02(0)	-0.01(0)	0.03(0)	-0.02(0)	0.01(0)	0.32(0)	-0.01(0)
C(6)	0.02(0)	-0.01(0)	0.03(0)	-0.02(0)	0.01(0)	0.32(0)	-0.01(0)
C(7)	-0.03(2)	0.01(2)	-0.02(2)	-0.03(2)	0.01(2)	0.43(2)	0.02(2)
C(8)	-0.07(2)	-0.08(2)	-0.23(2)	0.03(2)	0.01(2)	0.28(2)	-0.05(2)

atom	P_{40}	P_{41}	P_{4-1}	P_{42}	P_{4-2}	P_{43}	P_{4-3}	P_{44}	P_{4-4}
N(1)	0.11(2)	-0.01(2)	-0.03(2)	-0.04(2)	-0.04(2)	-0.06(2)	0.07(2)	0.02(2)	-0.04(2)