

# Supplementary Data

## Table S4

### Multipole population coefficients

atom	$P_0$	$P_{00}$	$P_{11}$	$P_{1-1}$	$P_{10}$
S(1)	5.29( 4)	0.00( 0)	0.04( 2)	-0.06( 2)	-0.12( 2)
O(1)	6.28( 4)	0.00( 0)	-0.05( 1)	-0.12( 1)	-0.02( 1)
C(8)	3.92( 4)	0.00( 0)	0.05( 2)	0.02( 2)	-0.15( 2)
C(3)	4.09( 4)	0.00( 0)	-0.01( 2)	0.04( 2)	0.02( 3)
C(9)	3.99( 4)	0.00( 0)	0.04( 2)	0.07( 2)	-0.11( 2)
C(2)	3.97( 4)	0.00( 0)	0.03( 2)	0.03( 2)	0.04( 3)
C(4)	4.06( 5)	0.00( 0)	-0.02( 2)	0.00( 2)	0.07( 3)
C(1)	3.91( 4)	0.00( 0)	0.01( 2)	-0.03( 2)	-0.21( 2)
C(7)	4.24( 4)	0.00( 0)	-0.01( 2)	0.10( 2)	0.01( 3)
C(6)	4.29( 5)	0.00( 0)	-0.01( 2)	0.07( 3)	0.02( 3)
C(5)	3.97( 5)	0.00( 0)	0.02( 2)	-0.04( 3)	0.01( 3)
H(3)	0.90( 4)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 2)
H(7)	1.01( 5)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 3)
H(4)	1.31( 5)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.14( 3)
H(5)	0.92( 5)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.11( 3)
H(6)	0.97( 4)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.11( 2)
H(2)	0.88( 4)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.17( 2)

atom	$P_{20}$	$P_{21}$	$P_{2-1}$	$P_{22}$	$P_{2-2}$
S(1)	-0.05( 2)	-0.09( 2)	0.05( 2)	0.01( 2)	-0.08( 2)
O(1)	-0.01( 1)	0.02( 1)	0.02( 1)	-0.01( 1)	-0.01( 1)
C(8)	0.04( 2)	0.06( 2)	0.00( 2)	-0.22( 2)	0.05( 2)
C(3)	0.06( 2)	-0.04( 2)	-0.12( 2)	-0.30( 2)	0.01( 2)
C(9)	0.06( 2)	0.03( 2)	0.01( 2)	-0.21( 2)	-0.02( 2)
C(2)	0.16( 2)	0.06( 2)	-0.11( 2)	-0.14( 2)	0.00( 2)
C(4)	0.05( 2)	-0.05( 2)	-0.01( 2)	-0.19( 2)	-0.02( 2)
C(1)	-0.02( 2)	0.01( 2)	0.09( 2)	-0.30( 2)	-0.02( 2)
C(7)	0.12( 2)	-0.02( 2)	-0.07( 2)	-0.14( 2)	0.03( 2)
C(6)	0.08( 2)	-0.04( 2)	-0.03( 2)	-0.24( 2)	0.01( 2)
C(5)	0.10( 2)	0.09( 2)	-0.01( 2)	-0.19( 2)	-0.02( 2)

atom	$P_{30}$	$P_{31}$	$P_{3-1}$	$P_{32}$	$P_{3-2}$	$P_{33}$	$P_{3-3}$
S(1)	0.00( 3)	-0.02( 2)	0.11( 5)	0.05( 1)	0.04( 4)	-0.04( 2)	-0.11( 4)
O(1)	0.09( 1)	0.00( 1)	0.01( 1)	0.09( 1)	0.02( 1)	0.00( 1)	-0.02( 1)
C(8)	0.48( 3)	0.04( 2)	0.00( 3)	0.24( 2)	0.03( 2)	0.06( 2)	-0.04( 2)
C(3)	0.28( 2)	0.01( 2)	-0.11( 2)	0.21( 3)	0.04( 2)	0.05( 2)	-0.06( 2)
C(9)	0.32( 2)	0.07( 2)	-0.05( 3)	0.20( 2)	0.01( 2)	0.03( 2)	-0.01( 2)
C(2)	0.31( 3)	0.05( 2)	-0.01( 2)	0.20( 2)	-0.07( 2)	0.00( 2)	0.04( 2)
C(4)	0.28( 3)	-0.05( 2)	-0.04( 2)	0.25( 2)	-0.05( 2)	-0.03( 2)	0.02( 2)
C(1)	0.36( 2)	-0.05( 2)	0.11( 2)	0.20( 2)	0.02( 2)	0.00( 2)	0.03( 2)
C(7)	0.30( 3)	-0.07( 2)	-0.05( 2)	0.13( 2)	0.04( 2)	-0.04( 2)	0.06( 2)
C(6)	0.27( 2)	0.00( 2)	-0.11( 2)	0.12( 2)	0.04( 2)	-0.02( 2)	-0.07( 2)
C(5)	0.29( 2)	0.08( 2)	0.07( 3)	0.20( 2)	-0.02( 2)	0.00( 2)	0.03( 2)

atom	$P_{40}$	$P_{41}$	$P_{4-1}$	$P_{42}$	$P_{4-2}$	$P_{43}$	$P_{4-3}$	$P_{44}$	$P_{4-4}$
S(1)	0.02( 2)	0.01( 2)	-0.04( 2)	0.00( 2)	-0.03( 2)	0.01( 1)	0.02( 2)	-0.08( 2)	0.04( 2)
O(1)	0.05( 1)	-0.02( 1)	0.01( 1)	0.03( 1)	0.02( 1)	0.02( 1)	0.01( 1)	0.01( 1)	-0.02( 1)
C(8)	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)
C(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)
C(9)	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)
C(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)	0.00( 0)
C(4)	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)
C(1)	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)
C(7)	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)
C(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)
C(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)