TABLE 1. MONOPOLE POPULATIONS, RADIAL PARAMETERS AND NET ATOMIC CHARGES.

ATOM	Pval	KAPPA	P00	KAPPA'	NET CHARGE
I(1)	7.909	0.939	0.000	1.337	-0.908
NA(1)	0.200	1.000	0.000	1.011	+0.800
O(1W)	6.065	0.995	0.000	0.935	-0.065
O(2W)	6.074	0.995	0.000	0.935	-0.073
H(2WB)	0.897	1.200	0.000	1.200	+0.102
H(2WA)	0.934	1.200	0.000	1.200	+0.065
H(1WB)	0.952	1.200	0.000	1.200	+0.047
H(1WA)	0.968	1.200	0.000	1.200	+0.031

TABLE 2. DIPOLE POPULATION PARAMETERS.

ATOM	D11+	D11-	D10	KAPPA'
I(1)	0.042(32)	0.008(33)	-0.078(30)	1.337
NA(1)	0.691(330)	0.318(265)	-0.652(229)	1.011
O(1W)	0.052(21)	-0.060(22)	-0.081(24)	0.935
O(2W)	0.007(21)	0.004(21)	-0.026(22)	0.935
H(2WB)	0.000	0.000	0.175(44)	1.200
H(2WA)	0.000	0.000	0.290(56)	1.200
H(1WB)	0.000	0.000	0.191(52)	1.200
H(1WA)	0.000	0.000	0.199(43)	1.200

TABLE 3. QUADRUPOLE POPULATION PARAMETERS.

ATOM	Q20	Q21+	Q21-	Q22+	Q22-	KAPPA'
I(1)	0.640(229)	0.606(330)	-0.081(265)	0.149(0)	-0.032(0)	1.337
NA(1)	-0.351(248)	0.307(188)	0.414(219)	-0.033(194)	0.136(251)	1.011
O(1W)	-0.021(172)	-0.009(161)	0.024(151)	0.104(150)	0.037(175)	0.935
O(2W)	-0.012(0)	-0.051(0)	-0.028(0)	0.017(0)	0.002(0)	0.935
H(2WB)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(2WA)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(1WB)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(1WA)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200

TABLE 4. OCTUPOLE POPULATION PARAMETERS.

ATOM	O30	O31+	O31-	O32+	O32-	O33+	O33-	KAPPA'
I(1)	-0.080(24)	0.015(23)	-0.008(23)	-0.007(23)	0.019(23)	0.051(23)	0.023(23)	1.337
NA(1)	0.110(172)	-0.288(161)	0.251(151)	-0.217(150)	-0.350(175)	0.059(161)	-0.017(149)	1.011
O(1W)	0.078(29)	-0.015(26)	0.003(25)	-0.004(26)	-0.004(27)	-0.001(26)	-0.057(26)	0.935
O(2W)	0.061(28)	-0.009(26)	-0.019(25)	0.039(26)	-0.033(26)	-0.026(26)	-0.038(27)	0.935
H(2WB)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(2WA)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(1WB)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(1WA)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200

TABLE 5. HEXADECAPOLE POPULATION PARAMETERS.

ATOM	H40	H41+	H41-	H42+	H42-	H43+	H43-	H44+	H44
I(1)	-0.328(39)	0.391(35)	-0.253(36)	-0.281(36)	-0.029(37)	-0.093(37)	0.065(37)	0.062(35)	-0.127(35)
NA(1)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
O(1W)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
O(2W)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H(2WB)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H(2WA)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H(1WB)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
H(1WA)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

```
loop_
_atom_local_axes_label
_atom_local_axes_atom0
_atom_local_axes_ax1
_atom_local_axes_atom1
_atom_local_axes_atom2
_atom_local_axes_ax2
I(1)      Na(1)      Z    I(1)      O(1W)     Y
Na(1)     O(1W)      Z    Na(1)     H(1WA)    Y
O(1W)     H(1WA)     Z    O(1W)     H(1WB)    Y
O(2W)     H(2WA)     Z    O(2W)     H(2WB)    Y
H(2WB)    O(2W)      Z    H(2WB)    H(2WA)    Y
H(2WA)    O(2W)      Z    H(2WA)    H(2WB)    Y
H(1WB)    O(1W)      Z    H(1WB)    H(1WA)    Y
H(1WA)    O(1W)      Z    H(1WA)    H(1WB)    Y
--------------------------------------------------------------------------------


loop_
_atom_site_label
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_occupancy
_atom_site_U_iso_or_equiv
I(1)        1.13489(3)     0.87695(3)     0.22314(2)      1.0000  0.015
NA(1)       0.81829(8)     0.64202(7)     0.48137(6)      1.0000  0.017
O(1W)       0.3822(1)      0.5121(1)      0.2877(1)       1.0000  0.019
O(2W)       0.2152(1)      0.7205(1)      0.7113(1)       1.0000  0.018
H(2WB)      0.38099        0.85051        0.73065         1.0000  0.028
H(2WA)      0.20380        0.74658        0.85253         1.0000  0.050
H(1WB)      0.27349        0.37841        0.15078         1.0000  0.045
H(1WA)      0.34881        0.63408        0.28214         1.0000  0.033
--------------------------------------------------------------------------------


loop_
_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_12
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_23
I(1)    0.01457(5)  0.01223(4)  0.01187(4)  0.00611(4)  0.00502(4)  0.00526(4)
NA(1)   0.0127(1)   0.0144(1)   0.0154(1)   0.0069(1)   0.0053(1)   0.0073(1)
O(1W)   0.0148(2)   0.0171(2)   0.0157(1)   0.0081(1)   0.0039(1)   0.0078(1)
O(2W)   0.0134(1)   0.0155(1)   0.0141(1)   0.0055(1)   0.0053(1)   0.0048(1)
--------------------------------------------------------------------------------

data_FFT
_refine_diff_density_max     0.239
_refine_diff_density_min    -0.422
_refine_diff_density_rms     0.047
--------------------------------------------------------------------------------
```

The residual electron density map in the plane formed by O(1W), Na(1) and I(1) atoms. Contours are drawn with 0.1 eÅ^{-3} step, the negative ones are dashed, the zero contour is drawn by a red dot line.