

Fractional atomic co-ordinates

atom	$x/a$	$y/b$	$z/c$
O(1)	0.01932(8)	0.38216(7)	0.05393(12)
O(2)	-0.10826(8)	0.44258(7)	-0.13191(12)
C(1)	-0.10587(6)	0.26669(6)	-0.08362(9)
C(2)	-0.08085(6)	0.18295(6)	0.02177(9)
C(3)	-0.12199(7)	0.08753(6)	-0.02639(10)
C(4)	-0.18899(8)	0.07545(7)	-0.17071(11)
C(5)	-0.21586(8)	0.15867(8)	-0.27167(11)
C(6)	-0.17363(7)	0.25338(7)	-0.22814(10)
C(7)	-0.05968(6)	0.36861(6)	-0.04584(9)
C(10)	-0.02155(7)	0.18981(5)	0.17983(10)
H(3)	-0.10196	0.02247	0.05211
H(4)	-0.22040	0.00060	-0.20165
H(5)	-0.26803	0.15057	-0.38480
H(6)	-0.19274	0.31806	-0.30762
H(7)	-0.07287	0.50427	-0.10008

Mean-square atomic displacements ( $\text{\AA}^2$ )

	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
O(1)	0.0260(4)	0.0175(4)	0.0287(4)	-0.0052(3)	-0.0151(3)	0.0054(3)
O(2)	0.0233(4)	0.0181(4)	0.0316(4)	-0.0031(3)	-0.0124(3)	0.0076(3)
C(1)	0.0153(3)	0.0169(3)	0.0148(3)	-0.0016(2)	-0.0038(2)	0.0013(2)
C(2)	0.0167(3)	0.0149(3)	0.0145(3)	-0.0010(2)	-0.0032(2)	-0.0009(2)
C(3)	0.0234(3)	0.0165(3)	0.0197(3)	-0.0028(3)	-0.0034(3)	-0.0027(3)
C(4)	0.0262(4)	0.0230(4)	0.0214(4)	-0.0062(3)	-0.0047(3)	-0.0064(3)
C(5)	0.0247(4)	0.0303(4)	0.0180(3)	-0.0064(3)	-0.0072(3)	-0.0030(3)
C(6)	0.0200(3)	0.0251(4)	0.0167(3)	-0.0037(3)	-0.0063(2)	0.0017(3)
C(7)	0.0164(3)	0.0163(3)	0.0176(3)	-0.0022(2)	-0.0042(2)	0.0030(2)
C(10)	0.0205(3)	0.0152(3)	0.0157(3)	-0.0003(2)	-0.0057(2)	0.0000(2)

## Multipole Population Coefficients ( $\text{\AA}^2$ )

atom	$P_v$	$P_{00}$	$P_{11}$	$P_{1-1}$	$P_{10}$
O(1)	6.37( 6)	-	-0.06( 2)	-0.04( 2)	-0.05( 3)
O(2)	6.45( 6)	-	0.00( 2)	0.02( 3)	0.04( 3)
C(1)	3.84( 5)	-	0.04( 2)	0.01( 3)	-0.04( 3)
C(2)	4.03( 5)	-	0.01( 2)	0.06( 3)	-0.03( 3)
C(3)	4.10( 5)	-	-0.03( 2)	0.00( 3)	-0.06( 3)
C(4)	4.06( 5)	-	0.02( 3)	0.05( 4)	-0.03( 4)
C(5)	4.04( 6)	-	0.04( 3)	0.05( 3)	-0.01( 4)
C(6)	4.07( 5)	-	-0.01( 2)	-0.01( 3)	-0.04( 4)
C(7)	4.00( 6)	-	0.00( 2)	0.16( 4)	-0.03( 3)
C(10)	4.14( 5)	-	0.00( 4)	-0.05( 2)	-0.14( 2)
H(3)	0.79( 3)	-	-	-	0.12( 2)
H(4)	0.81( 3)	-	-	-	0.17( 2)
H(5)	0.79( 3)	-	-	-	0.16( 2)
H(6)	0.78( 3)	-	-	-	0.14( 2)
H(7)	0.72( 4)	-	0.00( 2)	0.04( 2)	0.05( 3)

atom	$P_{20}$	$P_{21}$	$P_{2-1}$	$P_{22}$	$P_{2-2}$
O(1)	0.00( 3)	-0.05( 2)	0.03( 2)	-0.11( 2)	0.07( 2)
O(2)	-0.01( 3)	0.00( 2)	-0.04( 2)	-0.07( 2)	0.02( 2)
C(1)	0.08( 3)	-0.02( 2)	0.00( 3)	-0.22( 2)	-0.02( 2)
C(2)	0.09( 3)	0.00( 2)	0.00( 3)	-0.24( 2)	0.01( 2)
C(3)	0.10( 3)	0.02( 2)	0.02( 3)	-0.22( 2)	0.01( 2)
C(4)	0.19( 3)	0.01( 3)	-0.01( 3)	-0.22( 3)	0.02( 2)
C(5)	0.15( 3)	-0.02( 3)	0.02( 3)	-0.22( 3)	0.04( 2)
C(6)	0.16( 3)	-0.04( 3)	-0.01( 3)	-0.24( 2)	0.02( 2)
C(7)	0.20( 3)	-0.02( 2)	-0.09( 3)	-0.24( 3)	0.00( 2)
C(10)	0.34( 2)	-0.02( 3)	0.02( 2)	-0.02( 2)	0.00( 2)

atom	$P_{30}$	$P_{31}$	$P_{3-1}$	$P_{32}$	$P_{3-2}$	$P_{33}$	$P_{3-3}$
O(1)	0.01( 2)	0.00( 2)	0.00( 2)	0.05( 2)	-0.02( 2)	-0.03( 1)	0.00( 1)
O(2)	0.09( 2)	-0.01( 2)	-0.04( 2)	0.09( 2)	-0.02( 1)	0.01( 1)	-0.01( 2)
C(1)	0.27( 3)	-0.01( 2)	0.00( 4)	0.19( 2)	0.00( 3)	-0.02( 2)	-0.03( 2)
C(2)	0.34( 3)	0.02( 2)	-0.08( 4)	0.25( 2)	0.01( 3)	-0.01( 2)	-0.01( 2)
C(3)	0.28( 3)	0.00( 2)	0.03( 3)	0.20( 2)	-0.02( 2)	0.01( 2)	0.03( 2)
C(4)	0.25( 3)	0.01( 2)	0.02( 3)	0.22( 3)	0.01( 3)	-0.01( 2)	-0.03( 2)
C(5)	0.25( 3)	-0.02( 3)	0.05( 3)	0.26( 3)	-0.04( 2)	-0.03( 2)	-0.03( 2)
C(6)	0.29( 3)	-0.02( 2)	0.01( 3)	0.26( 3)	-0.02( 2)	-0.01( 2)	0.00( 2)
C(7)	0.44( 3)	-0.03( 2)	0.04( 4)	0.25( 3)	-0.01( 3)	-0.03( 2)	0.00( 2)
C(10)	0.04( 2)	0.01( 3)	0.02( 3)	-0.01( 2)	0.01( 3)	-0.01( 2)	0.02( 2)

## Kappa Parameters

$\kappa$ set	$\kappa'$	$\kappa''$
O	0.980(4)	0.81(6)
C	1.006(6)	0.84(1)
H	1.16	1.16