



Numerical summary (mean  $\pm$  std) :

$|\Delta N| (e^-)$ :  $-3.155 \pm 11.65$   $|\Delta\rho| (e^-)$ :  $169 \pm 136.9$   $\Delta\mu$  (Debye):  $452.7 \pm 705.3$  RMSD (Å):  $1.779 \pm 1.523$