

SUPPLEMENTARY MATERIAL

Table 1 Hydrogen bond parameters for the 2·1 salt at 100K and at 293K (*italic*). Symmetry codes: (i) $-x, -y, -z+1$; (ii) $-x+1, y-1/2, -z+1/2+1$; (iii) $x, -y+1/2, x+1/2$; (iv) $x, -y+1/2, z-1/2$; (v) $-x+1, -y, -z+1$; (vi) $x, y, z+1$; (vii) $-x+1, -y, -z+2$; (viii) $-x+1, y+1/2, -z+1/2$; (ix) $x+1, y, z$.

<i>H...bond</i>	<i>D...A</i> (Å)	<i>H...A</i> (Å)	<i>D--H...A</i> (°)
N3--H3C...O2	3.071(2) <i>3.038(3)</i>	2.44(2) <i>2.27(4)</i>	131(1) <i>146(4)</i>
N3--H3C...O3	2.918(2) <i>3.026(3)</i>	2.09(2) <i>2.24(5)</i>	165(2) <i>149(4)</i>
N4--H4A...O11	3.048(1) <i>3.042(2)</i>	2.57(1) <i>2.38(4)</i>	116(1) <i>130(3)</i>
N4--H4D...O4	2.816(1) <i>2.792(3)</i>	2.26(2) <i>1.98(3)</i>	125(2) <i>154(4)</i>
N4--H4D...O22	2.892(2) <i>2.977(4)</i>	2.35(2) <i>2.55(5)</i>	124(1) <i>110(3)</i>
N5--H5C...O21	3.019(2) <i>2.899(4)</i>	2.21(2) <i>2.58(5)</i>	153(2) <i>108(3)</i>
N6--H6B...O11	3.046(2) <i>3.017(3)</i>	2.28(2) <i>2.16(5)</i>	161(2) <i>154(4)</i>
N6--H6B...O12	3.009(2) <i>3.040(3)</i>	2.33(2) <i>2.24(5)</i>	143(2) <i>146(4)</i>
N3--H3A...O3 ⁱ	2.916(2) <i>2.939(3)</i>	2.05(2) <i>2.11(4)</i>	163(2) <i>150(4)</i>
N5--H5B...O12 ⁱⁱ	2.971(1)	2.32(1)	136(1)
N3--H3B...O12 ⁱⁱ	2.979(1) <i>3.019(3)</i>	2.22(2) <i>2.20(5)</i>	150(2) <i>143(3)</i>
N3--H3B...O13 ⁱⁱ	2.944(2) <i>2.957(2)</i>	2.43(2) <i>2.19(4)</i>	120(1) <i>136(3)</i>
N3--H3D...O1 ⁱⁱⁱ	2.909(1) <i>3.011(3)</i>	2.04(2) <i>2.18(3)</i>	168(2) <i>155(3)</i>
N5--H5A...O2 ⁱⁱⁱ	2.815(1) <i>2.853(3)</i>	1.95(1) <i>2.10(4)</i>	175(2) <i>155(4)</i>
N3--H3D...O2 ⁱⁱⁱ	3.047(1) <i>3.065(3)</i>	2.54(1) <i>2.33(4)</i>	117(1) <i>140(3)</i>
N6--H6A...O11 ^{iv}	3.025(1) <i>3.042(3)</i>	2.29(2) <i>2.29(5)</i>	152(2) <i>142(3)</i>
N6--H6A...O13 ^{iv}	2.909(2) <i>2.984(3)</i>	2.38(2) <i>2.24(4)</i>	124(1) <i>141(3)</i>

N4--H4A...O21 ^{iv}	2.867(1) <i>3.041(3)</i>	2.09(2) <i>2.36(3)</i>	150(2) <i>132(3)</i>
N4--H4B...O23 ^v	2.898(2) <i>3.03(2)</i>	2.09(2) <i>2.57(4)</i>	171(2) <i>114(3)</i>
N4--H4C...O3 ^v	2.819(1) <i>2.860(3)</i>	1.96(2) <i>2.07(4)</i>	162(2) <i>155(4)</i>
N5--H5D...O1 ^{vi}	3.057(2) <i>2.943(4)</i>	2.66(2) <i>2.33(5)</i>	110(1) <i>130(4)</i>
N5--H5D...O4 ^{vi}	2.941(2) <i>3.132(4)</i>	2.09(2) <i>2.33(4)</i>	167(2) <i>160(4)</i>
N5--H5B...O21 ^{vii}	2.983(1) <i>2.990(3)</i>	2.32(2) <i>2.20(3)</i>	137(2) <i>138(2)</i>
N6--H6C...O1 ^{viii}	2.919(2) <i>2.928(3)</i>	2.04(2) <i>2.04(3)</i>	166(2) <i>169(3)</i>
N6--H6D...O2 ^{ix}	2.962(2) <i>3.032(3)</i>	2.13(2) <i>2.28(4)</i>	162(2) <i>146(3)</i>

Table 2 Hydrogen bond parameters for the 3·1 salt at 100K and at 293K (*italic*. Symmetry codes: (i) $-x+2, y+1/2, -z+1$; (ii) $-x+2, y-1/2, -z+1$; (iii) $-x+1, y+1/2, -z+1$; (iv) $x-1, y, z$; (v) $x, y-1, z$; (vi) $-x+2, y-1/2, -z+2$; (vii) $x+1, y-1, z$

<i>H...bond</i>	<i>D...A(Å)</i>	<i>H...A(Å)</i>	<i>D--H...A(°)</i>
N4--H4B...O12	2.913(1) <i>3.031(3)</i>	2.18(1) <i>2.35(3)</i>	148(1) <i>135(2)</i>
N5--H5C...O33	2.973(1) <i>2.975(6)</i>	2.15(2) <i>2.14(3)</i>	165(1) <i>173(2)</i>
N5--H5C...O331	3.49(1) <i>3.34(3)</i>	2.69(2) <i>2.56(4)</i>	158(1) <i>169(2)</i>
N5--H5C...O321	2.994(6) <i>3.01(1)</i>	2.28(2) <i>2.32(3)</i>	143(1) <i>140(2)</i>
N6--H6A...O11	3.096(1) <i>3.178(4)</i>	2.24(1) <i>2.50(2)</i>	176(1) <i>151(2)</i>
N6--H6A...O31	2.913(1) <i>2.965(4)</i>	2.54(1) <i>2.50(3)</i>	107(1) <i>122(2)</i>
N6--H6D...O3	3.055(1) <i>2.959(3)</i>	2.55(1) <i>2.38(3)</i>	119(1) <i>125(3)</i>
N6--H6D...O4	2.865(1) <i>3.048(4)</i>	2.02(2) <i>2.19(3)</i>	176(2) <i>172(3)</i>
N7--H7C...O3	2.850(1) <i>2.958(3)</i>	1.95(1) <i>2.25(3)</i>	169(1) <i>141(3)</i>

N7--H7D...O21	3.031(1) 2.974(3)	2.45(1) 2.30(3)	123(1) 142(2)
N7--H7D...O22	2.946(1) 3.012(3)	2.22(1) 2.57(3)	140(1) 116(2)
N7--H7D...O32	3.150(1) 3.201(4)	2.54(1) 2.61(2)	127(1) 132(2)
N8--H8C...O21	2.889(1) 3.004(3)	2.02(2) 2.32(3)	163(1) 140(3)
N8--H8C...O23	3.110(1) 3.078(4)	2.52(2) 2.46(3)	124(1) 131(3)
N4--H4A...O32 ⁱ	2.924(2) 3.012(7)	2.14(2) 2.44(3)	152(2) 127(2)
N4--H4A...O321 ⁱ	3.048(6) 3.05(1)	2.20(2) 2.36(4)	173(2) 144(3)
N4--H4A...O21 ⁱ	2.926(1) 2.948(3)	2.60(2) 2.38(3)	104(1) 127(3)
N5--H5A...O11 ⁱ	2.991(1) 3.137(5)	2.16(2) 2.26(3)	175(1) 167(3)
N5--H5A...O12 ⁱ	3.089(1) 3.029(4)	2.55(2) 2.37(3)	124(1) 130(3)
N4--H4D...O2 ⁱⁱ	2.823(1) 2.847(2)	1.97(1) 1.94(2)	174(1) 170(2)
N4--H4B...O22 ⁱⁱ	3.076(1) 3.061(3)	2.60(1) 2.34(3)	118(1) 140(3)
N4--H4C...O33 ⁱⁱ	2.908(2) 2.999(7)	2.07(2) 2.23(3)	178(2) 162(3)
N5--H5D...O4 ⁱⁱ	2.766(1) 2.754(2)	1.92(1) 1.87(2)	169(1) 165(2)
N4--H4C...O331 ⁱⁱ	3.311(9) 3.29(2)	2.49(2) 2.53(3)	169(1) 162(2)
N4--H4C...O321 ⁱⁱ	3.054(6) 3.03(1)	2.44(2) 2.57(3)	131(2) 119(3)
N5--H5B...O13 ⁱⁱ	2.910(1) 2.970(3)	2.08(2) 2.25(3)	165(2) 143(3)
N6--H6B...O12 ⁱⁱⁱ	3.034(1) 3.054(3)	2.32(2) 2.34(3)	140(1) 141(2)
N6--H6B...O23 ^{iv}	3.104(1) 3.121(2)	2.37(1) 2.48(3)	142(1) 131(2)
N8--H8A...O22 ^v	3.098(1) 3.024(3)	2.42(1) 2.18(3)	131(1) 149(3)
N8--H8A...O23 ^v	2.981(1) 3.037(3)	2.08(2) 2.20(3)	170(2) 149(3)

N7--H7B...O1 ^v	3.214(1) 3.057(3)	2.48(1) 2.15(3)	137(1) 161(2)
N7--H7B...O2 ^v	2.877(1) 3.009(4)	2.00(2) 2.37(3)	159(1) 125(2)
N6--H6C...O1 ^v	2.853(1) 2.853(3)	1.97(2) 1.90(3)	170(2) 172(2)
N7--H7A...O2 ^{vi}	2.920(1) 2.969(2)	2.10(1) 2.10(2)	167(1) 153(2)
N8--H8D...O3 ^{vi}	2.940(1) 3.013(3)	2.22(2) 2.22(3)	142(1) 149(2)
N8--H8B...O1 ^{vii}	2.848(1) 2.998(3)	1.99(1) 2.27(3)	174(1) 145(2)
N8--H8B...O3 ^{vii}	3.241(1) 3.102(3)	2.68(2) 2.34(3)	124(1) 152(2)

Figure 1. DSC profile for Sample S3.

