



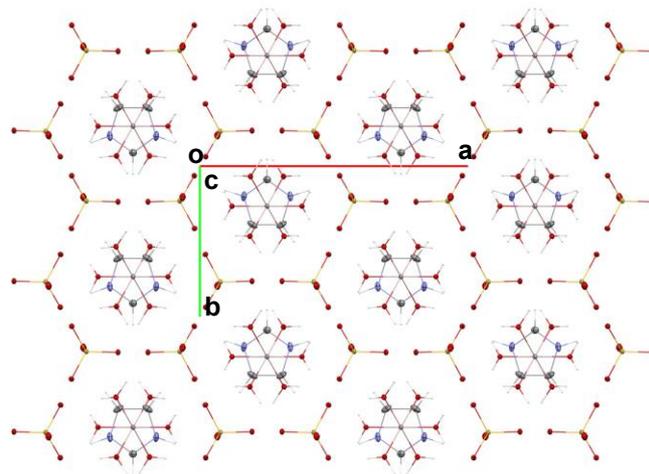
STRUCTURAL SCIENCE
CRYSTAL ENGINEERING
MATERIALS

Volume 77 (2021)

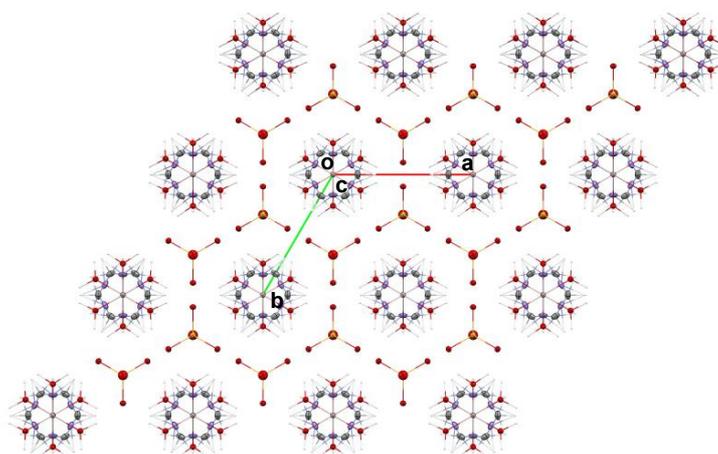
Supporting information for article:

**Structure, ferroelasticity and Goldilocks zone phase transitions in
 $C_3H_5N_2Al(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$**

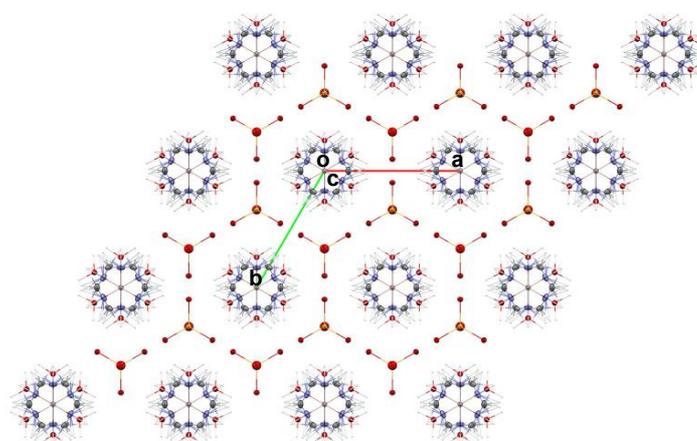
Bartosz Zarychta, Zbigniew Czapla, Janusz Przesławski and Przemysław Szklarz



(a)



(b)



(c)

Figure S1. Packing diagram of **1** in *c* direction at 290 K (**a**), 345 K (**b**) and 350 K (**c**). Anisotropic ellipsoids are drawn at the 10% probability level.

Table S1. Geometric parameters for **1** (Å, °) at 290 K (I), 345 K (II) and 350 K (III).

I			
Bonds			
Al1—O1A ⁱ	1.866 (2)	S1—O2	1.4706 (19)
Al1—O1A	1.866 (2)	S1—O2A	1.478 (2)
Al1—O1B	1.869 (2)	S1—O2B	1.479 (2)
Al1—O1B ⁱ	1.869 (2)	N1—C2	1.282 (4)
Al1—O1	1.877 (2)	N1—C2A	1.331 (5)
Al1—O1 ⁱ	1.877 (2)	C2—N1 ⁱⁱ	1.282 (4)
S1—O3	1.455 (2)	C2A—C2A ⁱⁱ	1.307 (7)
Valance angles			
O1A ⁱ —Al1—O1A	179.92 (14)	O1B—Al1—O1 ⁱ	91.90 (11)
O1A ⁱ —Al1—O1B	91.03 (10)	O1B ⁱ —Al1—O1 ⁱ	178.99 (9)
O1A—Al1—O1B	89.03 (10)	O1—Al1—O1 ⁱ	87.77 (15)
O1A ⁱ —Al1—O1B ⁱ	89.03 (10)	O3—S1—O2	110.46 (12)
O1A—Al1—O1B ⁱ	91.03 (10)	O3—S1—O2A	109.45 (13)
O1B—Al1—O1B ⁱ	88.46 (14)	O2—S1—O2A	108.48 (13)
O1A ⁱ —Al1—O1	88.03 (10)	O3—S1—O2B	110.19 (14)
O1A—Al1—O1	91.91 (11)	O2—S1—O2B	109.58 (11)
O1B—Al1—O1	178.99 (9)	O2A—S1—O2B	108.64 (12)
O1B ⁱ —Al1—O1	91.90 (11)	C2—N1—C2A	109.2 (3)
O1A ⁱ —Al1—O1 ⁱ	91.91 (11)	N1 ⁱⁱ —C2—N1	108.0 (4)
O1A—Al1—O1 ⁱ	88.02 (10)	C2A ⁱⁱ —C2A—N1	106.77 (19)
Torsion angles			
C2A—N1—C2—N1 ⁱⁱ	0.09 (17)	C2—N1—C2A—C2A ⁱⁱ	−0.2 (5)
II			
Bonds			
Al1—O1	1.8728 (19)	N1—N1 ^{xi}	1.02 (4)
Al1—O1 ⁱⁱⁱ	1.8728 (19)	N1—N1 ^x	1.02 (4)
Al1—O1 ^{iv}	1.8728 (19)	N1—C2 ^{xi}	1.575 (11)
Al1—O1 ^v	1.8728 (19)	N1—C2 ^{xii}	1.575 (11)
Al1—O1 ^{vi}	1.873 (2)	N1—N1 ^{xiii}	1.75 (7)
Al1—O1 ^{vii}	1.8728 (19)	N1—N1 ^{xii}	1.75 (7)
S1—O3	1.450 (5)	C2—N1 ^{xi}	0.607 (15)
S1—O2 ^{viii}	1.474 (2)	C2—C2 ^x	1.21 (3)
S1—O2 ^{ix}	1.474 (2)	C2—C2 ^{xi}	1.21 (3)
S1—O2	1.474 (2)	C2—N1 ^x	1.575 (11)
N1—C2	0.607 (15)	C2—N1 ^{xiii}	1.575 (11)
N1—C2 ^x	0.607 (15)		
Valance angles			
O1—Al1—O1 ⁱⁱⁱ	180.0	C2 ^x —N1—C2 ^{xii}	43 (4)
O1—Al1—O1 ^{iv}	88.53 (9)	N1 ^{xi} —N1—C2 ^{xii}	109.7 (18)
O1 ⁱⁱⁱ —Al1—O1 ^{iv}	91.47 (9)	N1 ^x —N1—C2 ^{xii}	10.8 (19)
O1—Al1—O1 ^v	91.47 (9)	C2 ^{xi} —N1—C2 ^{xii}	100 (3)
O1 ⁱⁱⁱ —Al1—O1 ^v	88.53 (9)	C2—N1—N1 ^{xiii}	64 (5)
O1 ^{iv} —Al1—O1 ^v	180.0	C2 ^x —N1—N1 ^{xiii}	123 (5)
O1—Al1—O1 ^{vi}	91.47 (9)	N1 ^{xi} —N1—N1 ^{xiii}	30.6 (6)
O1 ⁱⁱⁱ —Al1—O1 ^{vi}	88.53 (9)	N1 ^x —N1—N1 ^{xiii}	89.999 (5)
O1 ^{iv} —Al1—O1 ^{vi}	88.53 (9)	C2 ^{xi} —N1—N1 ^{xiii}	20.2 (15)
O1 ^v —Al1—O1 ^{vi}	91.47 (9)	C2 ^{xii} —N1—N1 ^{xiii}	80.1 (16)
O1—Al1—O1 ^{vii}	88.53 (9)	C2—N1—N1 ^{xii}	123 (5)
O1 ⁱⁱⁱ —Al1—O1 ^{vii}	91.47 (9)	C2 ^x —N1—N1 ^{xii}	64 (5)
O1 ^{iv} —Al1—O1 ^{vii}	91.47 (9)	N1 ^{xi} —N1—N1 ^{xii}	89.999 (18)
O1 ^v —Al1—O1 ^{vii}	88.53 (9)	N1 ^x —N1—N1 ^{xii}	30.6 (5)

O1 ^{vi} —A11—O1 ^{vii}	180.0	C2 ^{xi} —N1—N1 ^{xii}	80.1 (16)
O3—S1—O2 ^{viii}	109.73 (10)	C2 ^{xii} —N1—N1 ^{xii}	20.2 (15)
O3—S1—O2 ^{ix}	109.73 (10)	N1 ^{xiii} —N1—N1 ^{xii}	60.000 (6)
O2 ^{viii} —S1—O2 ^{ix}	109.21 (10)	N1—C2—N1 ^{xi}	113 (10)
O3—S1—O2	109.73 (10)	N1—C2—C2 ^x	6 (3)
O2 ^{viii} —S1—O2	109.21 (11)	N1 ^{xi} —C2—C2 ^x	116 (5)
O2 ^{ix} —S1—O2	109.21 (10)	N1—C2—C2 ^{xi}	116 (5)
C2—N1—C2 ^x	167 (5)	N1 ^{xi} —C2—C2 ^{xi}	6 (3)
C2—N1—N1 ^{xi}	33 (5)	C2 ^x —C2—C2 ^{xi}	120.001 (14)
C2 ^x —N1—N1 ^{xi}	151 (6)	N1—C2—N1 ^x	18 (4)
C2—N1—N1 ^x	151 (6)	N1 ^{xi} —C2—N1 ^x	96 (7)
C2 ^x —N1—N1 ^x	33 (6)	C2 ^x —C2—N1 ^x	20.2 (16)
N1 ^{xi} —N1—N1 ^x	118.8 (11)	C2 ^{xi} —C2—N1 ^x	99.9 (16)
C2—N1—C2 ^{xi}	43 (4)	N1—C2—N1 ^{xiii}	96 (7)
C2 ^x —N1—C2 ^{xi}	143 (7)	N1 ^{xi} —C2—N1 ^{xiii}	18 (4)
N1 ^{xi} —N1—C2 ^{xi}	10.8 (19)	C2 ^x —C2—N1 ^{xiii}	99.9 (16)
N1 ^x —N1—C2 ^{xi}	109.7 (18)	C2 ^{xi} —C2—N1 ^{xiii}	20.2 (16)
C2—N1—C2 ^{xii}	143 (7)	N1 ^x —C2—N1 ^{xiii}	80 (3)
Torsion angles			
C2 ^x —N1—C2—N1 ^{xi}	-119 (50)	C2 ^{xii} —N1—C2—C2 ^{xi}	-13 (5)
N1 ^x —N1—C2—N1 ^{xi}	-20 (7)	N1 ^{xiii} —N1—C2—C2 ^{xi}	0.000 (1)
C2 ^{xi} —N1—C2—N1 ^{xi}	6 (3)	N1 ^{xii} —N1—C2—C2 ^{xi}	-6 (3)
C2 ^{xii} —N1—C2—N1 ^{xi}	-7 (3)	C2 ^x —N1—C2—N1 ^x	-99 (53)
N1 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^{xi}	6 (3)	N1 ^{xi} —N1—C2—N1 ^x	20 (7)
N1 ^{xii} —N1—C2—N1 ^{xi}	0.001 (2)	C2 ^{xi} —N1—C2—N1 ^x	26 (10)
N1 ^{xi} —N1—C2—C2 ^x	119 (50)	C2 ^{xii} —N1—C2—N1 ^x	13 (4)
N1 ^x —N1—C2—C2 ^x	99 (52)	N1 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^x	26 (10)
C2 ^{xi} —N1—C2—C2 ^x	125 (48)	N1 ^{xii} —N1—C2—N1 ^x	20 (7)
C2 ^{xii} —N1—C2—C2 ^x	112 (51)	C2 ^x —N1—C2—N1 ^{xiii}	-125 (48)
N1 ^{xiii} —N1—C2—C2 ^x	125 (48)	N1 ^{xi} —N1—C2—N1 ^{xiii}	-6 (3)
N1 ^{xii} —N1—C2—C2 ^x	119 (50)	N1 ^x —N1—C2—N1 ^{xiii}	-26 (10)
C2 ^x —N1—C2—C2 ^{xi}	-125 (48)	C2 ^{xi} —N1—C2—N1 ^{xiii}	0.000 (1)
N1 ^{xi} —N1—C2—C2 ^{xi}	-6 (3)	C2 ^{xii} —N1—C2—N1 ^{xiii}	-13 (5)
N1 ^x —N1—C2—C2 ^{xi}	-26 (10)	N1 ^{xii} —N1—C2—N1 ^{xiii}	-6 (3)
III			
Bonds			
A11—O1	1.8741 (17)	N1—N1 ^x	1.02 (4)
A11—O1 ⁱⁱⁱ	1.8741 (17)	N1—N1 ^{xi}	1.02 (4)
A11—O1 ^{iv}	1.8741 (17)	N1—C2 ^x	1.577 (10)
A11—O1 ^v	1.8741 (17)	N1—C2 ^{xiii}	1.577 (10)
A11—O1 ^{vi}	1.8741 (17)	N1—N1 ^{xiii}	1.76 (6)
A11—O1 ^{vii}	1.8741 (17)	N1—N1 ^{xii}	1.76 (6)
S1—O3	1.445 (4)	C2—N1 ^x	0.607 (12)
S1—O2 ^{viii}	1.4702 (19)	C2—C2 ^x	1.21 (2)
S1—O2 ^{ix}	1.4702 (19)	C2—C2 ^{xi}	1.21 (2)
S1—O2	1.4702 (19)	C2—N1 ^{xii}	1.577 (11)
N1—C2	0.607 (12)	C2—N1 ^{xi}	1.577 (11)
N1—C2 ^{xi}	0.607 (12)		
Valance angles			
O1—A11—O1 ⁱⁱⁱ	180.0	C2 ^{xi} —N1—C2 ^{xiii}	43 (3)
O1—A11—O1 ^{iv}	88.51 (7)	N1 ^x —N1—C2 ^{xiii}	109.4 (16)
O1 ⁱⁱⁱ —A11—O1 ^{iv}	91.49 (7)	N1 ^{xi} —N1—C2 ^{xiii}	11.2 (16)
O1—A11—O1 ^v	91.49 (7)	C2 ^x —N1—C2 ^{xiii}	100 (3)
O1 ⁱⁱⁱ —A11—O1 ^v	88.51 (7)	C2—N1—N1 ^{xiii}	123 (5)
O1 ^{iv} —A11—O1 ^v	180.0	C2 ^{xi} —N1—N1 ^{xiii}	63 (5)
O1—A11—O1 ^{vi}	91.49 (7)	N1 ^x —N1—N1 ^{xiii}	90.00 (2)
O1 ⁱⁱⁱ —A11—O1 ^{vi}	88.51 (7)	N1 ^{xi} —N1—N1 ^{xiii}	30.8 (5)
O1 ^{iv} —A11—O1 ^{vi}	88.51 (8)	C2 ^x —N1—N1 ^{xiii}	79.9 (14)
O1 ^v —A11—O1 ^{vi}	91.49 (7)	C2 ^{xiii} —N1—N1 ^{xiii}	20.0 (14)
O1—A11—O1 ^{vii}	88.51 (7)	C2—N1—N1 ^{xii}	63 (5)

O1 ⁱⁱⁱ —Al1—O1 ^{vii}	91.49 (7)	C2 ^{xi} —N1—N1 ^{xii}	123 (5)
O1 ^{iv} —Al1—O1 ^{vii}	91.49 (7)	N1 ^x —N1—N1 ^{xii}	30.8 (5)
O1 ^v —Al1—O1 ^{vii}	88.51 (8)	N1 ^{xi} —N1—N1 ^{xii}	90.002 (8)
O1 ^{vi} —Al1—O1 ^{vii}	180.0	C2 ^x —N1—N1 ^{xii}	20.0 (14)
O3—S1—O2 ^{viii}	109.75 (9)	C2 ^{xiii} —N1—N1 ^{xii}	79.9 (14)
O3—S1—O2 ^{ix}	109.75 (9)	N1 ^{xiii} —N1—N1 ^{xii}	59.999 (4)
O2 ^{viii} —S1—O2 ^{ix}	109.19 (9)	N1 ^x —C2—N1	115 (10)
O3—S1—O2	109.75 (9)	N1 ^x —C2—C2 ^x	7 (2)
O2 ^{viii} —S1—O2	109.19 (9)	N1—C2—C2 ^x	117 (5)
O2 ^{ix} —S1—O2	109.19 (9)	N1 ^x —C2—C2 ^{xi}	117 (5)
C2—N1—C2 ^{xi}	167 (4)	N1—C2—C2 ^{xi}	7 (2)
C2—N1—N1 ^x	33 (5)	C2 ^x —C2—C2 ^{xi}	120.000 (11)
C2 ^{xi} —N1—N1 ^x	150 (5)	N1 ^x —C2—N1 ^{xii}	19 (4)
C2—N1—N1 ^{xi}	150 (5)	N1—C2—N1 ^{xii}	97 (6)
C2 ^{xi} —N1—N1 ^{xi}	33 (5)	C2 ^x —C2—N1 ^{xii}	20.0 (14)
N1 ^x —N1—N1 ^{xi}	118.5 (10)	C2 ^{xi} —C2—N1 ^{xii}	100.1 (14)
C2—N1—C2 ^x	43 (3)	N1 ^x —C2—N1 ^{xi}	97 (6)
C2 ^{xi} —N1—C2 ^x	142 (6)	N1—C2—N1 ^{xi}	19 (4)
N1 ^x —N1—C2 ^x	11.2 (16)	C2 ^x —C2—N1 ^{xi}	100.1 (14)
N1 ^{xi} —N1—C2 ^x	109.4 (16)	C2 ^{xi} —C2—N1 ^{xi}	20.0 (14)
C2—N1—C2 ^{xiii}	142 (6)	N1 ^{xii} —C2—N1 ^{xi}	80 (3)
Torsion angles			
C2 ^{xi} —N1—C2—N1 ^x	-111 (43)	C2 ^{xiii} —N1—C2—C2 ^{xi}	103 (43)
N1 ^{xi} —N1—C2—N1 ^x	-22 (6)	N1 ^{xiii} —N1—C2—C2 ^{xi}	111 (43)
C2 ^x —N1—C2—N1 ^x	7 (2)	N1 ^{xii} —N1—C2—C2 ^{xi}	118 (41)
C2 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^x	-8 (2)	C2 ^{xi} —N1—C2—N1 ^{xii}	-118 (42)
N1 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^x	-0.001 (2)	N1 ^x —N1—C2—N1 ^{xii}	-7 (2)
N1 ^{xii} —N1—C2—N1 ^x	7 (2)	N1 ^{xi} —N1—C2—N1 ^{xii}	-29 (8)
C2 ^{xi} —N1—C2—C2 ^x	-118 (42)	C2 ^x —N1—C2—N1 ^{xii}	0.000 (1)
N1 ^x —N1—C2—C2 ^x	-7 (2)	C2 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^{xii}	-15 (5)
N1 ^{xi} —N1—C2—C2 ^x	-29 (8)	N1 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^{xii}	-7 (2)
C2 ^{xiii} —N1—C2—C2 ^x	-15 (5)	C2 ^{xi} —N1—C2—N1 ^{xi}	-89 (44)
N1 ^{xiii} —N1—C2—C2 ^x	-7 (2)	N1 ^x —N1—C2—N1 ^{xi}	22 (6)
N1 ^{xii} —N1—C2—C2 ^x	0.000 (2)	C2 ^x —N1—C2—N1 ^{xi}	29 (8)
N1 ^x —N1—C2—C2 ^{xi}	111 (43)	C2 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^{xi}	14 (3)
N1 ^{xi} —N1—C2—C2 ^{xi}	89 (44)	N1 ^{xiii} —N1—C2—N1 ^{xi}	22 (6)
C2 ^x —N1—C2—C2 ^{xi}	118 (41)	N1 ^{xii} —N1—C2—N1 ^{xi}	29 (8)

Symmetry code(s): (i) $-x+1/2, y, -z$; (ii) $-x+3/2, y, -z+1$; (iii) $-x+2, -y+2, -z+2$; (iv) $x-y+1, x, -z+2$; (v) $-x+y+1, -x+2, z$; (vi) $-y+2, x-y+1, z$; (vii) $y, -x+y+1, -z+2$; (viii) $-y+1, x-y+1, z$; (ix) $-x+y, -x+1, z$; (x) $x-y, x, -z+1$; (xi) $y, -x+y, -z+1$; (xii) $-y, x-y, z$; (xiii) $-x+y, -x, z$.

Table S2. Hydrogen-bond parameters at 290 K (I), 345 K (II) and 350 K (III).

<i>D</i> —H... <i>A</i>	<i>D</i> —H (Å)	H... <i>A</i> (Å)	<i>D</i> ... <i>A</i> (Å)	<i>D</i> —H... <i>A</i> (°)
I				
O1—H1A...O2B ⁱ	0.91 (4)	1.73 (4)	2.643 (3)	174 (3)
O1—H1B...O2	0.69 (4)	2.01 (4)	2.692 (3)	172 (4)
O1A—H1AA...O2 ⁱ	0.70 (3)	1.94 (3)	2.640 (3)	175 (4)
O1A—H1AB...O2A ⁱⁱ	0.77 (3)	1.84 (3)	2.606 (3)	178 (4)
O1B—H1BA...O2A ⁱⁱⁱ	0.74 (4)	1.87 (4)	2.614 (3)	175 (4)
O1B—H1BB...O2B ^{iv}	0.95 (4)	1.70 (4)	2.653 (3)	177 (3)
N1—H1...O3 ^v	0.86	2.04	2.811 (4)	148.2
C2—H2...O3 ^{vi}	0.93	2.58	3.084 (4)	114.4
C2—H2...O3 ^{vii}	0.93	2.58	3.084 (4)	114.4
C2A—H2A...O3	0.93	2.39	3.269 (4)	157.6
II				
O1—H1A...O2 ^{ix}	0.92	1.74	2.6413 (17)	170.0
N1—H1...O3	0.80	2.28	3.04 (4)	158.8
C2—H1...O3	0.97	2.28	3.075 (18)	138.6

N1—H2...O3 ^v	1.30	2.52	3.661 (9)	145.0
C2—H1...O3	0.97	2.28	3.075 (18)	138.6
C2—H2...O3 ^v	0.86	2.52	3.075 (18)	122.9
III				
O1—H1A...O2 ^{ix}	0.91	1.74	2.6400 (15)	170.0
N1—H1...O3 ^v	0.95	2.16	3.03 (4)	151.5
C2—H2...O3 ^v	0.80	2.47	3.074 (15)	133.8
N1—H2...O3	1.18	2.66	3.658 (8)	141.7
C2—H2...O3	0.80	2.66	3.074 (15)	114.5
C2—H2...O3 ^v	0.80	2.47	3.074 (15)	133.8

Symmetry code(s): (i) $x-1/2, -y+1, z$; (ii) $x-1/2, -y, z$; (iii) $-x+1/2, y, -z$; (iv) $-x+1, -y, -z$; (v) $-x+1, -y+1, -z+1$; (vi) $x, y+1, z$; (vii) $-x+3/2, y+1, -z+1$; (viii) $x+1, y, z$; (ix) $-x+y+1, -x+1, z$.