Supplementary data

Stable Gold(III) Complexes with Thiosemicarbazone Derivatives

Isabel Garcia Santos, Adelheid Hagenbach and Ulrich Abram*

Freie Universität Berlin, Institute of Chemistry, Fabeckstr. 34-36, D-14195 Berlin, Germany.

Fax: #49 30 838 52676; Tel: #49 30 838 54002; E-mail: abram@chemie.fu-berlin.de

Table S1 Hydrogen bonds in the complexes [Au(Hdamp)(L^{3b})]Cl_2

	D-H / Å	H · · · A / Å	H · · · A / Å	D-H · · · A /°
N5-H5A · · · O2	0.86	2.24	2.931(8)	136.8
N5-H5B · · · O3	0.86	2.12	2.888(8)	148.4
N4-H4 · · · O1	0.86	2.30	2.986(9)	137.1
N6-H6A · · · Cl1	0.91	2.16	3.053(6)	165.1

Table S2 Hydrogen bonds in the complexes [Au(Hdamp)(L^{3c})]Cl_2 ·$2H_2O$

	D-H / Å	H · · · A / Å	H · · · A / Å	D-H · · · A /°
O1-H111 · · · Cl2	1.068(5)	2.155(2)	3.209(5)	168.8(3)
N5-H5A · · · O1(#1)	0.86	2.06	2.878(7)	157.5
N5-H5B · · · Cl1(#2)	0.86	2.42	3.260(6)	165.8
N6-H6 · · · Cl1(#3)	0.91	2.20	3.067(6)	159.7
O1-H1 · · · Cl2(#4)	0.859(5)	2.493(2)	3.353(5)	178.8(4)

Symmetry operations : (#1)1-x,-y,-z; (#2)x-1,y,z-1; (#3)x-1,y,z (#4)x, y, z-1

Table S3 Hydrogen bonds in the complexes [AuCl(L^{3a})]Cl ·2MeOH

	D-H / Å	H · · · A / Å	H · · · A / Å	D-H · · · A /°
N5-H5A · · · O20	0.88	1.92	2.751(4)	157.7
N5-H5B · · · O30	0.88	1.99	2.853(4)	165.3
N4-H4A · · · $Cl4^{(I)}$	0.88	2.41	3.288(3)	173.6
N15-H15A · · · O50	0.88	1.93	2.764(4)	157.5
N15-H15B · · · Cl4	0.88	2.33	3.189(3)	164.1
N14-H14B · · · O40	0.88	2.04	2.880(4)	159.9
N14-H14A · · · $Cl3^{(II)}$	0.88	2.50	3.375(3)	172.3
O20-H20 · · · $Cl4^{(I)}$	0.84	2.30	3.140(3)	175.1
O30-H30 · · · $Cl4^{(III)}$	0.84	2.28	3.096(3)	163.3
O40-H40 · · · $Cl3^{(IV)}$	0.84	2.40	3.206(4)	160.5
O50-H50 · · · $Cl3^{(III)}$	0.84	2.23	3.072(3)	174.7

Symmetry operations : (^{I})x-1/2,y+1/2,z; (^{II})-x+3/2,y+1/2,-z+1/2; (^{III})-x+3/2,y+1/2, -z+1/2 ; (^{IV})x,-y,z+1/2;

Table S4 Hydrogen bonds in the complexes [AuCl(L^{3d})]Cl ·MeOH

	D-H / Å	H · · · A / Å	H · · · A / Å	D-H · · · A /°
N5-H5B· · · Cl2	0.88	2.30	3.164(6)	167.2
N5-H5A· · · $Cl1^{(I)}$	0.88	2.85	3.624(7)	147.1
O20-H20· · · $Cl2^{(II)}$	0.84	2.39	3.199(8)	163.4

Symmetry operations: (^{I})x,y+1,z; (^{II})x-1, -y+3/2,z-1/2

Fig. S1 Molecular packing scheme in [AuCl(L^{3b})]Cl · 2MeOH a) along the xy plane illustrating the arrangement of the complex molecules in planes