

SYNTHESIS AND ANTIFUNGAL ACTIVITY OF HALOGENATED AROMATIC BIS- γ -LACTONES ANALOGOUS TO AVENACIOLIDE

Pedro A. Castelo-Branco*

Departamento de Pesquisa e Pós-Graduação, Instituto Federal Fluminense, Campus Campos-Centro, R. Dr. Siqueira, 273, 28030-130 Campos dos Goytacazes – RJ, Brasil

Mayura M. M. Rubinger, Leandro de C. Alves, Natalia A. Liberto, Thayane C. M. Nepel e Mariana Catrinck

Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, Av. PH Rolfs, s/n, 36571-000 Viçosa – MG, Brasil

Silvana Guilardi, Hudson A. Silvério e Wilson P. F. Neto

Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Av. João Naves de Ávila, 2121, 38400-902 Uberlândia – MG, Brasil

Laércio Zambolim

Departamento de Fitopatologia, Universidade Federal de Viçosa, Av. PH Rolfs, s/n, 36571-000 Viçosa – MG, Brasil

Dorila Piló-Veloso

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos, 6627, 31270-901 Belo Horizonte – MG, Brasil

Table 1S. Crystal data and structure refinement for compounds **7a** and **7b**

Compound	7a	7b
Formula	C ₁₅ H ₁₃ O ₄ Cl	C ₁₅ H ₁₃ O ₄ Cl
Molecular mass (g mol ⁻¹)	292.70	292.70
Crystal system/color/habit	Orthorhombic/colourless/Prism	Orthorhombic/colourless/Prism
Space Group (No.)	P 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (19)	P 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (19)
Parameters of unit cell (Å, °)	a = 7.241(4) b = 11.341(5) c = 16.487(8) $\alpha = \beta = \gamma = 90$	a = 7.860(4) b = 11.180(5) c = 15.855(6) $\alpha = \beta = \gamma = 90$
Limiting indices	-7 ≤ h ≤ 9 -14 ≤ k ≤ 13 -19 ≤ l ≤ 20	-9 ≤ h ≤ 10 -13 ≤ k ≤ 14 -20 ≤ l ≤ 19
Z / ρ_{calc} (g mL ⁻¹)/ μ (mm ⁻¹)	4/1.436/0.292	4/1.396 / 0.284
Crystal size (mm)	0.26 x 0.16 x 0.15	0.55 x 0.20 x 0.12
Volume (Å ³)	1353.9(1)	1393.2(1)
Refl. Collected/Unique (R _{int})	12170/2813 (0.0539)	13210/3016 (0.0589)
θ range for data collection (°)	3.05 < θ < 26.58	3.15 < θ < 27.11
Data / restr. / param. ref.	2813/0/181	3016/0/181
Refl. obs. [I > 2 σ (I)]	2271	1938
Flack	-0.08(9)	-0.01(9)
S on F ²	1.042	1.021
R _{obs} / R _w	0.0444/0.1101	0.0449/0.1159
$\Delta\rho_{\text{max}} / \Delta\rho_{\text{min}}$ (e/ Å ³)	0.219/-0.290	0.123/-0.229

*e-mail: pedro@iff.edu.br