PRÜFBERICHT

PROBENINFORMATIONEN:

Prüfberichtsnummer: C01-2-2026
Auftraggeber: Purple Dreamwave GmbH
Eingangsdatum: 18.12.2025
Analyselabor: Am Goldberg 2, 99817 Eisenach

Probenbezeichnung: 1BP-LSD Pulver
Verpackung: Schraubvial mit Zipplockbeutel durch Auftraggeber,
Probennahme: Probeneingang per Zustellung
Untersuchungsende: 09.01.2026

PROBENBEZEICHNUNG:



Probe Nr.	Bezeichnung	Beschaffenheit	Eingangsdatum
1	1BP-LSD - Pulver	Pulver	18.12.2025

ZUSAMMENFASSUNG:

BEMERKUNG:

NMR Analyse und Auswertung 1BP-LSD

IUPAC Name:
(6aR,9R)-N,N-diethyl-7-methyl-4-(4-(4,4,5,5-tetraethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoyl)-4,6,6a,7,8,9-hexahydroindolo[4,3-fg]quinoline-9-carboxamid

Summenformel: $C_{37}H_{48}BN_3O_4$
Molmasse: 609.62 g/mol
Berechnete Exakte Masse: 609.3738Da
Gefundene Masse[M+H]: 610.3782

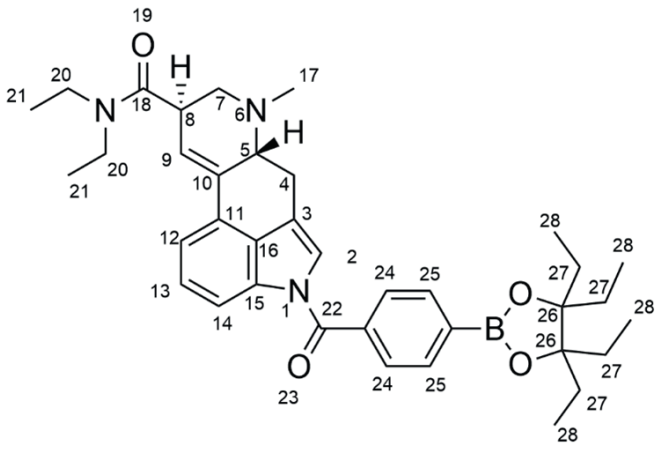


Abbildung 1: Struktur 1BP-LSD

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

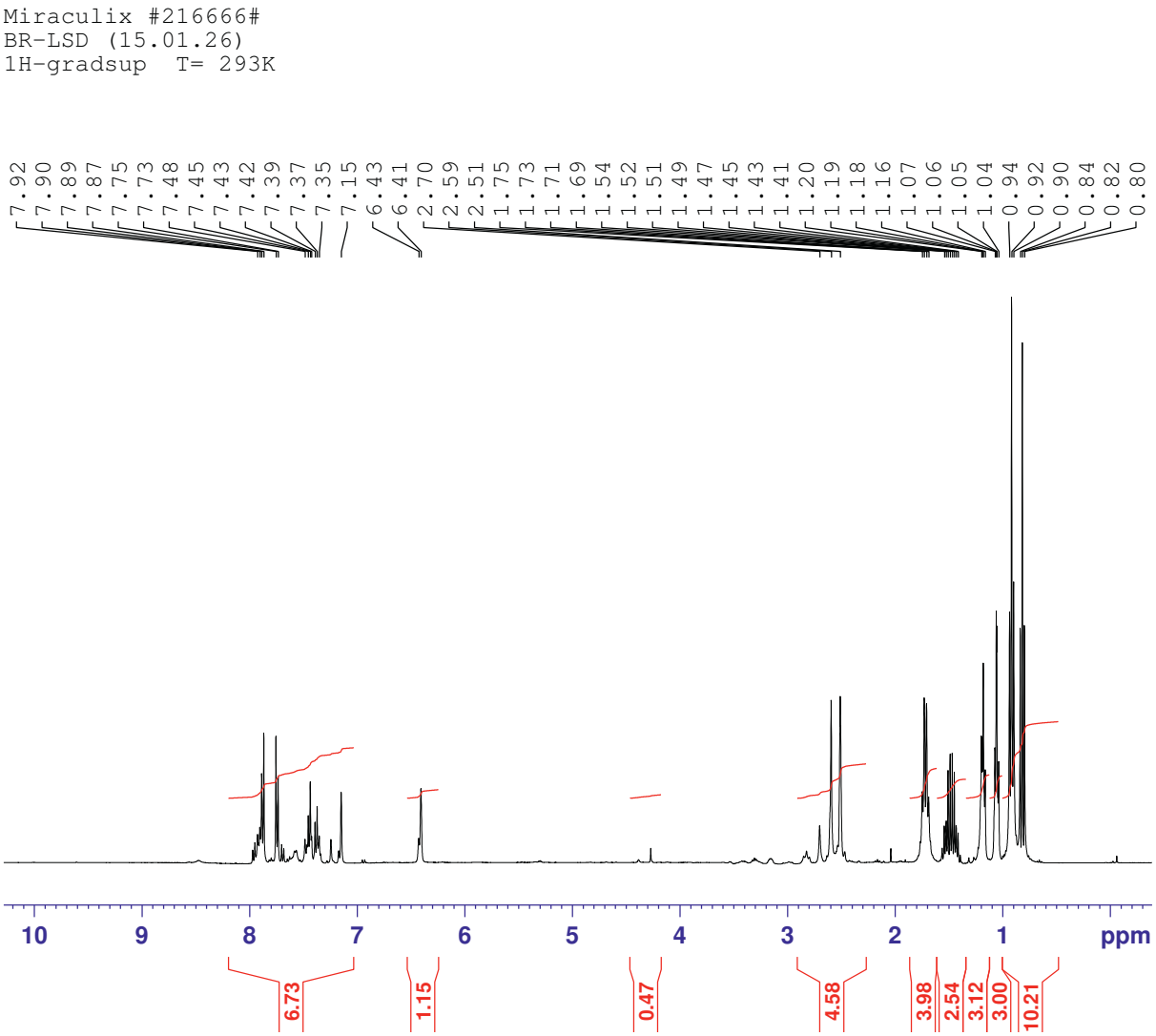


Abbildung 2: 1H-NMR (500 MHz, DMSO-d6, 25 °C)

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

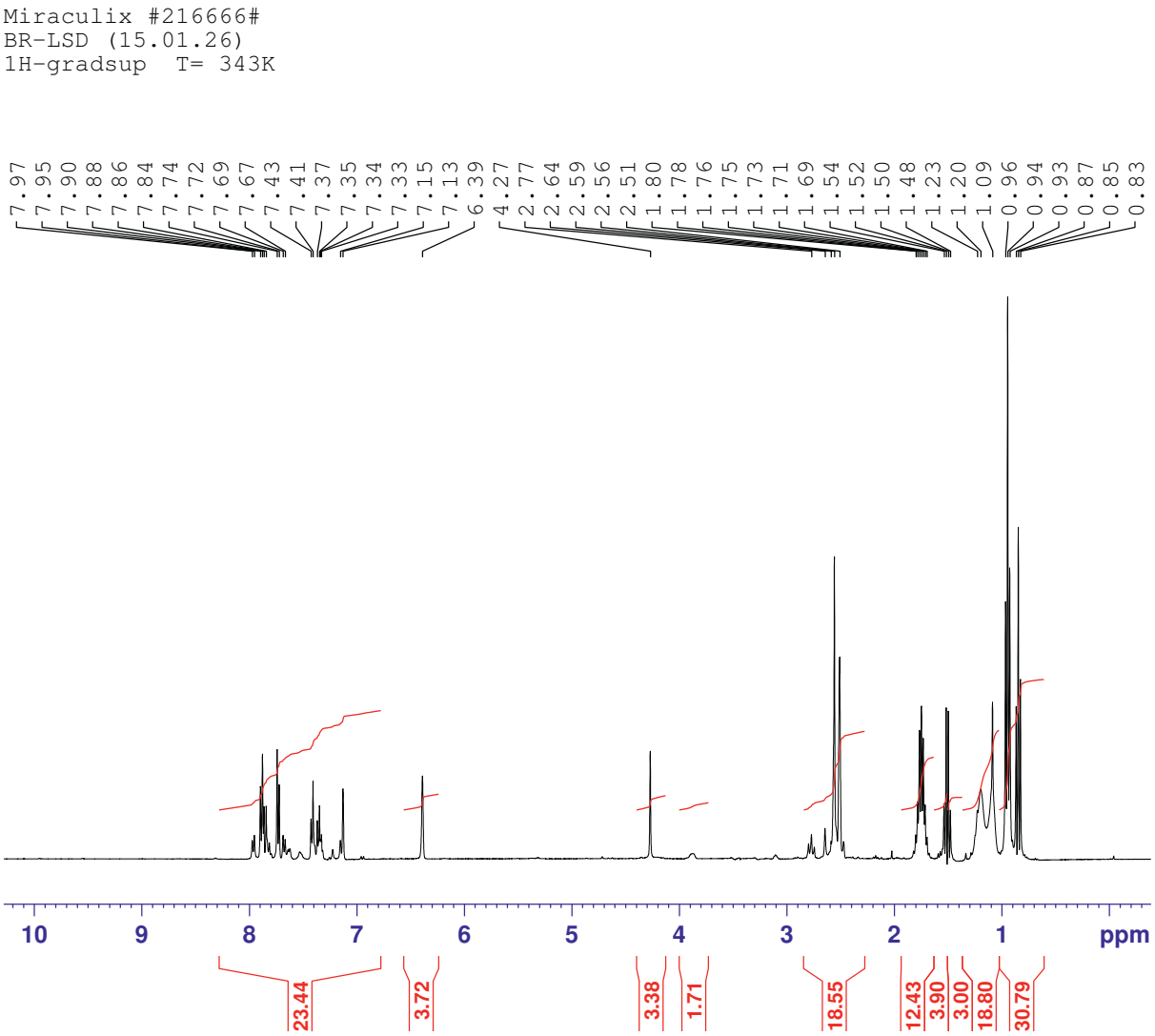


Abbildung 3: 1H-NMR (500 MHz, DMSO-d6, 70 °C)

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

	No.	70 °C	25 °C
LSD Grundgerüst	1		
	2	7.63 (m, 1 H)	7.57 (m, 1 H)
	3	-	-
	4	von DMSO Peak überdeckt	von DMSO Peak überdeckt
		von Wasser Peak überdeckt	3.51 (m, 1H an wasser peak)
	5	3.10 (m, 1 H)	3.16 (m, 1 H)
	6	-	-
	7	2.77 (m, 2H)	2.82 (m, 1H)
			2.7 (m, 1H)
	8	3.88 (m, 1 H)	von Wasser Peak überdeckt
	9	6.39 (s, 1H)	6.41 (s, 0.7/1 H)
	9´	-	6.43 (s, 0.3/1 H)
	10	-	-
	11	-	-
	12	7.42 (d, J = 7.6, 1H)	7.45 (d, J = 7.7, 1 H)
	13	7.35 (dd (apparent t), J = 7.6, 7.6, 1H)	7.37 (dd (apparent t), J = 7.7, 7.7, 1 H)
	14	7.86 (d, J = 7.6, 1H)	7.88 (d, J = 7.7, 1 H)
	15	-	-
	16	-	-
	17	2.56 (s, 3H)	2.59 (s, 3H)
	18	-	-
	19	-	-
	20	von Wasser Peak überdeckt	3.43 (m, 2H)
	20	von Wasser Peak überdeckt	3.31 (m, 2H)
	21	1.2 (m, 3H)	1.18 (m, 3H)
	21´	1.09 (m, 3H)	1.06 (m, 3H)

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

1-Substituent	22	-	-
	23	-	-
	24	7.73 (d, J= 7.7Hz, 1.5/2 H)	7.74 (d, J= 8.1Hz, 1.7/2 H)
	24´	7.68 (d, J= 7.7Hz, 0.5/2 H)	7.69 (d, J= 8.1Hz, 0.3/2 H)
	25	7.89 (d, J=7.7Hz, 1.5/2 H)	7.88 (d, J=8.1Hz, 1.7/2 H)
	25´	7.96 (d, J= 7.7Hz, 0.5/2 H)	7.96 (d, J= 8.1Hz, 0.3/2 H)
	26	-	-
	26´	-	-
	27	1.75 (m, 5.2/8 H)	1.72 (m, 4.9/8 H)
	27´	1.50 (q, J = 7.5Hz, 2.8/8 H)	1.48 (m, 3.1/8 H)
	28	0.94 (t, J = 7.4Hz, 7.6/12 H)	0.92 (t, J = 7.5Hz, 7.3/12 H)
	28´	0.85 (t, J = 7.5Hz, 4.4/12 H)	0.82 (t, J = 7.6Hz, 4.7/12 H)
Gegenion	TA	-	-
	TA	4.27 (s, 1H)	4.27 (s, 1H)

Die Zuordnung 1H Signale für 70 °C und 25 °C

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

Rotameranalyse Position 9:

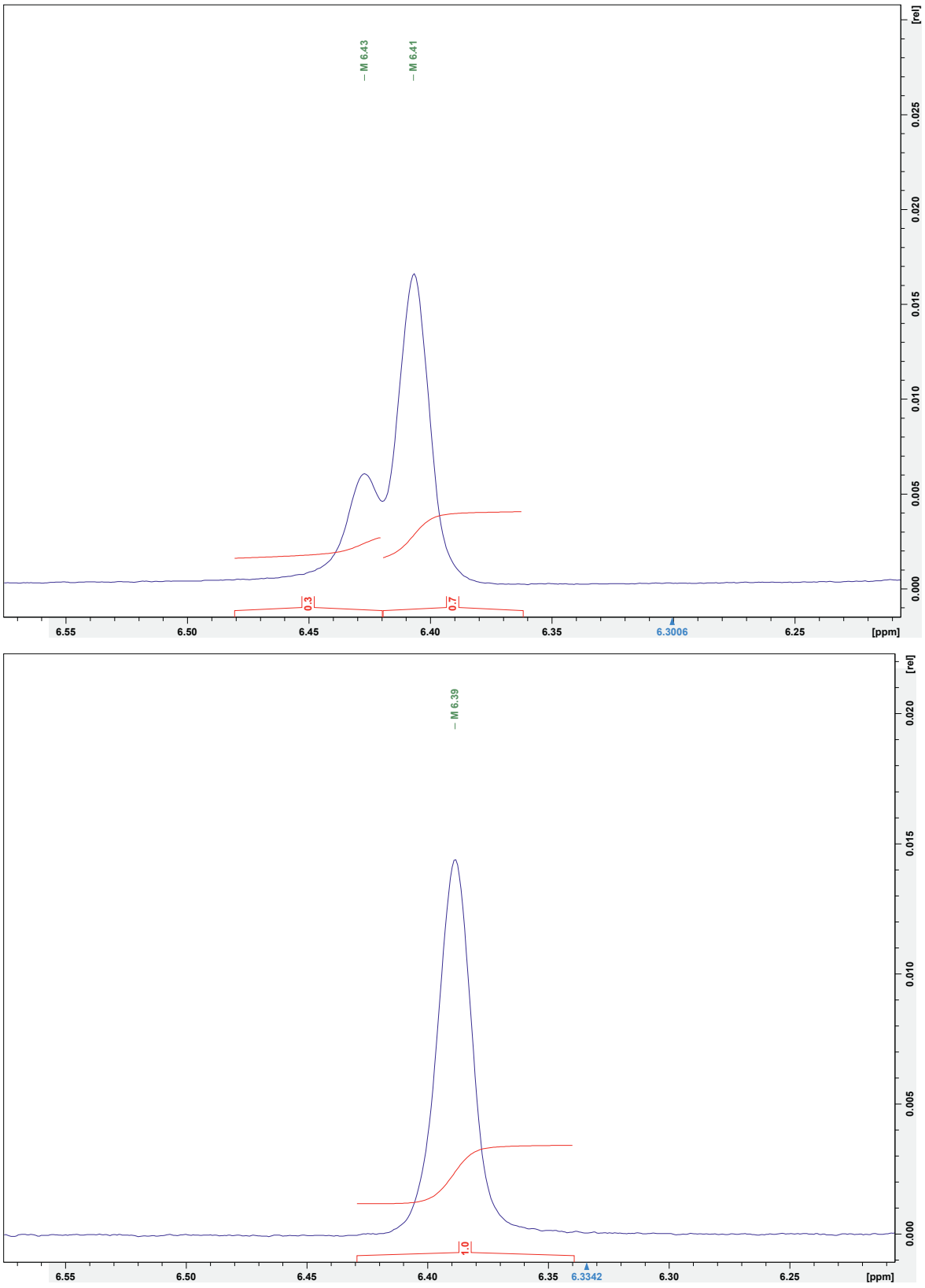


Abbildung 4: 1H-NMR (500 MHz, DMSO-d6, 25 °C oben, 70 °C unten); Position 9

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

Bemerkung:

Bei 25 °C (oben) sind zwei Signale (6.43 ppm und 6.41 ppm; 0.02 ppm voneinander getrennt) zu sehen, welche der 9-CH Gruppe zugeordnet wurden. Sie liegen zu 31 % bzw. 69 % vor. Bei 70 °C (unten) ist nur ein Signal zu sehen (bei 6.39 ppm). Dies spricht dafür, dass die zwei benachbarten Signale bei 25 °C verschiedenen Rotameren des LSD-Grundgerüsts zuzuordnen sind und kein Hinweis auf Isomere darstellen.

	25 °C			70 °C		
Position	**Shift [ppm]**	**Integral**	**Rotamer Anteil [%]**	**Shift [ppm]**	**Integral**	**Rotamer Anteil [%]**
9	**6.43**	**0.3**	**30**	**6.39**	**1**	**100**
9	**6.41**	**0.7**	**70**	**-**	**-**	

Tabelle 1: Rotameranalyse Position 9

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

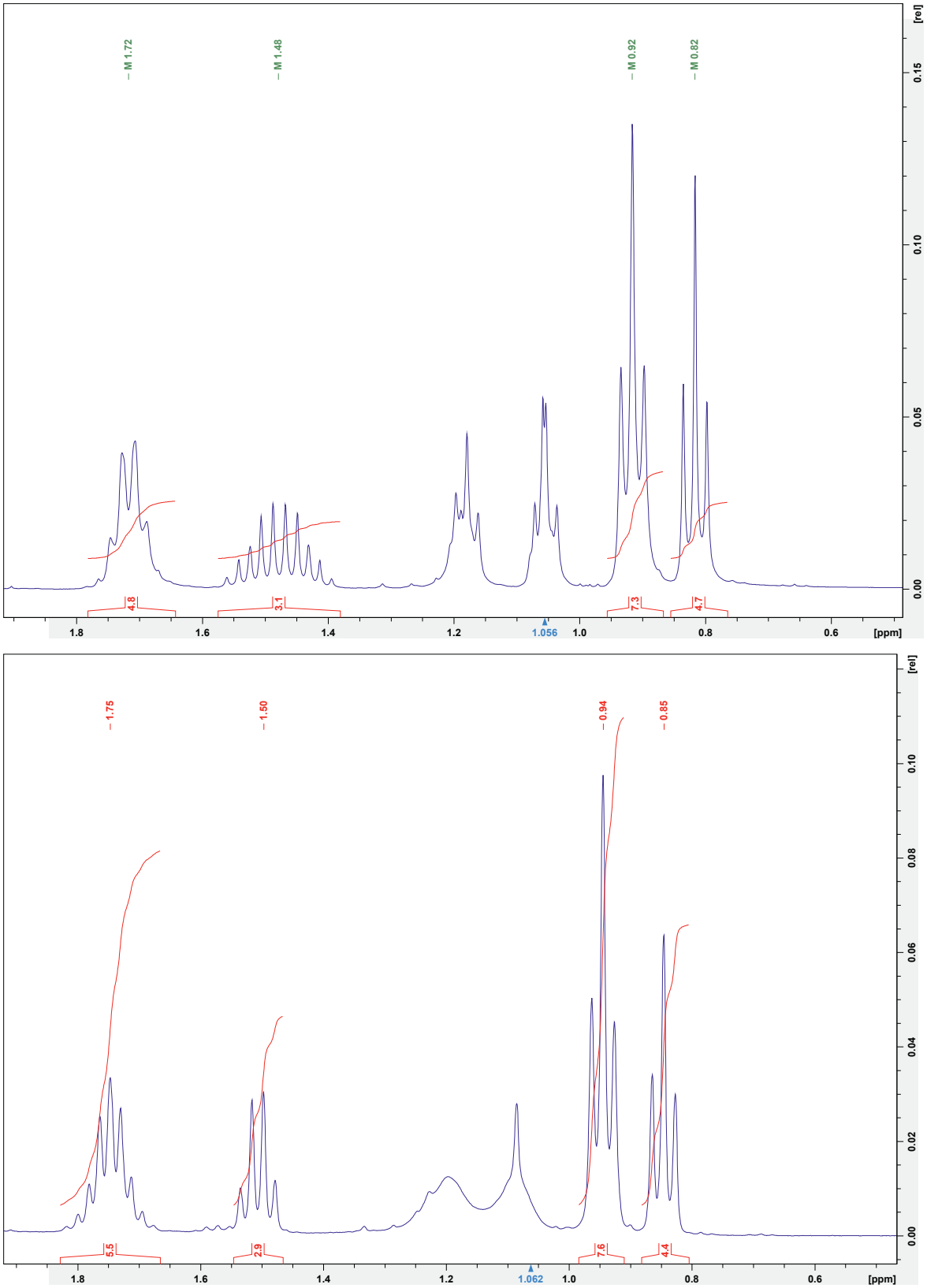


Abbildung 5: 1H-NMR (500 MHz, DMSO-d6, 25 °C oben, 70 °C unten); Pinaolboronat-Rest alkyl Gruppen

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

Bemerkung:

Bei 25 °C (oben: 0.82 ppm und 0.92 ppm), wie bei 70 °C (unten: 0.85 ppm und 0.94 ppm) sind je zwei getrennte Signale zu sehen, welche den Methylgruppen des Pinaolboronat-Rests zugeordent wurden. Dies gilt auch für die Signale, welche den Methylengruppen (25 °C oben: 1.72 ppm und 1.48 ppm; wie bei 70 °C unten: 1.75 ppm und 1.51 ppm) zugeordnet wurden. Bei 25 °C liegen die beiden Rotamere zu ~40 % bzw. 60 % vor, bei 70 °C verschiebt sich deren Verhältnis nur leicht, zu ~36 % bzw. 64 %. Die Signale dazwischen (25 °C oben: 1.72 ppm und 1.48 ppm; wie bei 70 °C unten: 1.75 ppm und 1.51 ppm) sind dem Methylgruppen des Diethylamids des Lysergsäure Grundgerüsts zuzuordnen, wobei das Verhältnis temperaturunabhängig 1 zu 1 beträgt.

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

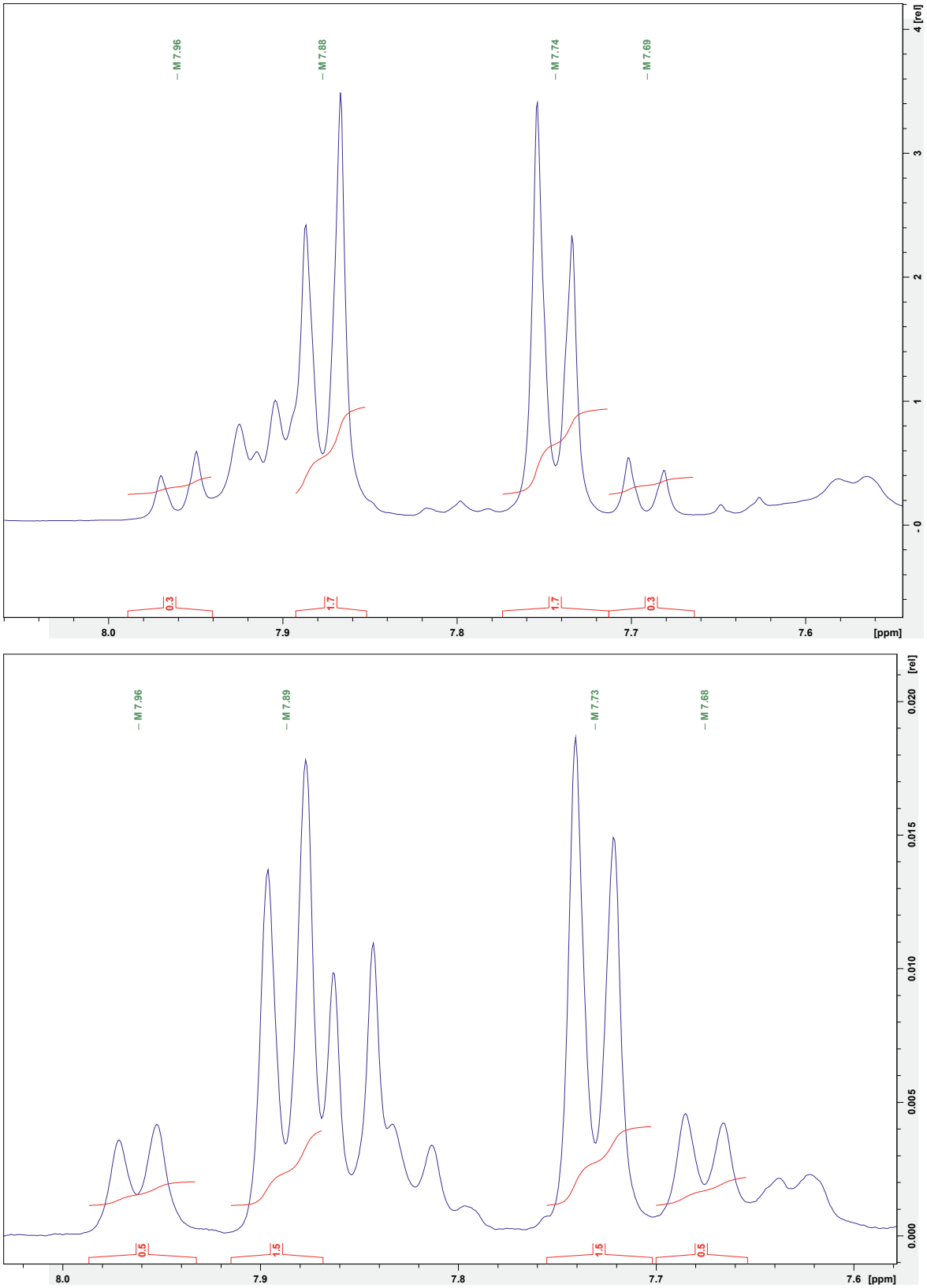


Abbildung 6: 1H-NMR (500 MHz, DMSO-d6, 25 °C oben, 70 °C unten); Pinaolboronat-Rest

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023

Aromatische Signale

Bei 25 °C (oben: 7.69 ppm, 7.74 ppm, 7.88 ppm und 7.96 ppm), wie bei 70 °C (unten: 7.68 ppm. 7.73 ppm, 7.89 pp, und 7.96) sind je vier getrennte Signale zu sehen welche den zwei chemisch äquivalenten aromatischen Wasserstoffe des Pinaolboronat-Rests zuzuordnen wurden. Das aus den Integralen bestimmte Rotamerverhälnis bei 25 °C weicht hier allerdings mit ~19 % bzw. 81 % recht stark von dem bestimmten Rotamer Verhältnis, bestimmt durch die Alkylgruppen, ab. Bei 70 °C ist zudem eine stärkere Veränderung des Rotamerverhältnisses zu sehen, zu ~25 % bzw. 75 %, als bei den Alkylgruppen.

	25 °C			70 °C		
Position	**Shift [ppm]**	**Integral**	**Rotamer Anteil [%]**	**Shift [ppm]**	**Integral**	**Rotamer Anteil [%]**
Alkyl Wasserstoffe						
27	**1.48**	**3.2**	**40**	**1.51**	**2.9**	**35**
27	**1.72**	**4.9**	**60**	**1.75**	**5.5**	**65**
28	**0.82**	**4.6**	**38**	**0.85**	**4.4**	**37**
28	**0.92**	**7.4**	**62**	**0.94**	**7.6**	**63**
Aromarische Wasserstoffe						
24	**7.69**	**0.3**	**19**	**7.68**	**0.5**	**26**
24	**7.74**	**1.3**	**81**	**7.73**	**1.4**	**74**
25	**7.88**	**1.3**	**81**	**7.89**	**1.5**	**75**
25	**7.96**	**0.3**	**19**	**7.96**	**0.5**	**25**

Tabelle 2: Rotameranalyse Pinaolboronat-Rest

ERGEBNISSE:

Der genannte IUPAC-Name, die Masse und die Struktur lassen sich durch die NMR Spektren bestätigen.
Die erhaltenen ^{1}H-NMR-Daten weisen auf die Struktur eines 4-(4,4,5,5-tetraethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl) benzoyl Derivates hin.

Hinweis: Eine Aussage zur genauen Stereochemie an den Positionen 6, 6a, 7 und 8 (R-/S-Konfiguration) ist anhand der vorliegenden NMR-Daten nicht möglich.

Die Substanz liegt vermutlich als Tartrat salz vor, was sich auf das Signal im 1H Spektrum bei 4.27 stützt.
Durch den Vergleich der Spektren bei 25 °C und 70 °C konnte die Aufspaltung des Signals der 9-CH Gruppe auf zwei Rotamere zurückgeführt werden, welche bei 25 °C vorliegen. Bei 70 °C ist nur noch ein Signal zu sehen, was auf das vorhanden sein von nur noch einer Rotamerspezies zurückzuführen ist. Somit kann ausgeschlossen werden, dass die Signalaufspaltung durch verschiedene Epimere zu erklären ist.

Weiter sind die Aromatischen Signale der Alkylgruppen und Aromatischen Wasserstoffe des Pinaolboronat-Rest ebenfalls aufgespalten, was auf unterschiedliche Rotamere zurückzuführen ist. Hier wird die Rotationsbarriere allerdings vermutlich nur wenig überwunden, da die Spektren nur eine relativ geringe Veränderung des Rotamerverhältnisses schließen lassen.

Die erhaltenen NMR-Daten bestätigen die Struktur von „1-(4-(4,4,5,5-tetraethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoyl-LSD (1-BP-LSD. Alle charakteristischen Gruppen (Aromaten, Carbonylfunktionen, Ethylseitenketten) sind vollständig und korrekt zugeordnet. Weitere größere Verunreinigungen konnten nicht identifiziert werden.

Dr. Felix Blei
Geschäftsführer LeadiX GmbH

Sebastian Dörner
M.Sc. in Chemischer Biologie

Die Prüfergebnisse beziehen sich ausschließlich auf den Prüfgegenstand. Der Prüfbericht darf nur mit Zustimmung der LeadiX GmbH vervielfältigt werden. Die Weitergabe eines unvollständigen Berichtes bzw. eines Auszuges ist nicht gestattet.

LeadiX GmbH
Geschäftsführer Dr. Felix Blei
Hans-Knöll-Straße 6
07745 Jena

Amtsgericht Jena, HRB 518072
Steuernr. 162/113/03372
USt.-ID: DE342354997

www.miraculix-lab.de
info@miraculix-lab.de
Tel. 03641/2716023