

## PROBENINFORMATIONEN:

**Prüfberichtsnummer:** C03-2025  
**Auftraggeber:** Cofana GmbH  
**Eingangsdatum:** 07.11.2025  
**Analyselabor:** Am Goldberg 2,  
 99817 Eisenach

**Probenbezeichnung:** 1FE-LSD oranges Pulver  
**Verpackung:** HPLC Vial mit Luftpolsterfolie  
 durch Auftraggeber,  
**Probennahme:** Probeneingang per Zustelldienst  
**Untersuchungsende:** 28.11.2025

## PROBENBEZEICHNUNG:



Probe Nr.	Bezeichnung	Beschaffenheit	Eingangsdatum
1	FE-LSD - Pulver	oranges Pulver	07.11.2025

## ZUSAMMENFASSUNG:

### BEMERKUNG:

NMR-Auswertung für 1FE-LSD (1-Ferrocenylcarbonyl-LSD)

### IUPAC Name:

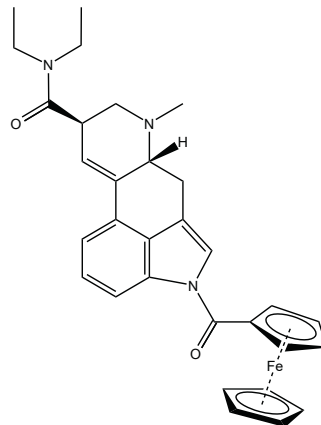
(8β)-1-ferrocenecarbonyl-N,N-diethyl-6-methyl-9,10-didehydroergoline-8-carboxamide hemi-L-tartrate

**Summenformel:** C<sub>31</sub>H<sub>34</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>Fe

**Molmasse:** 536.46 g/mol

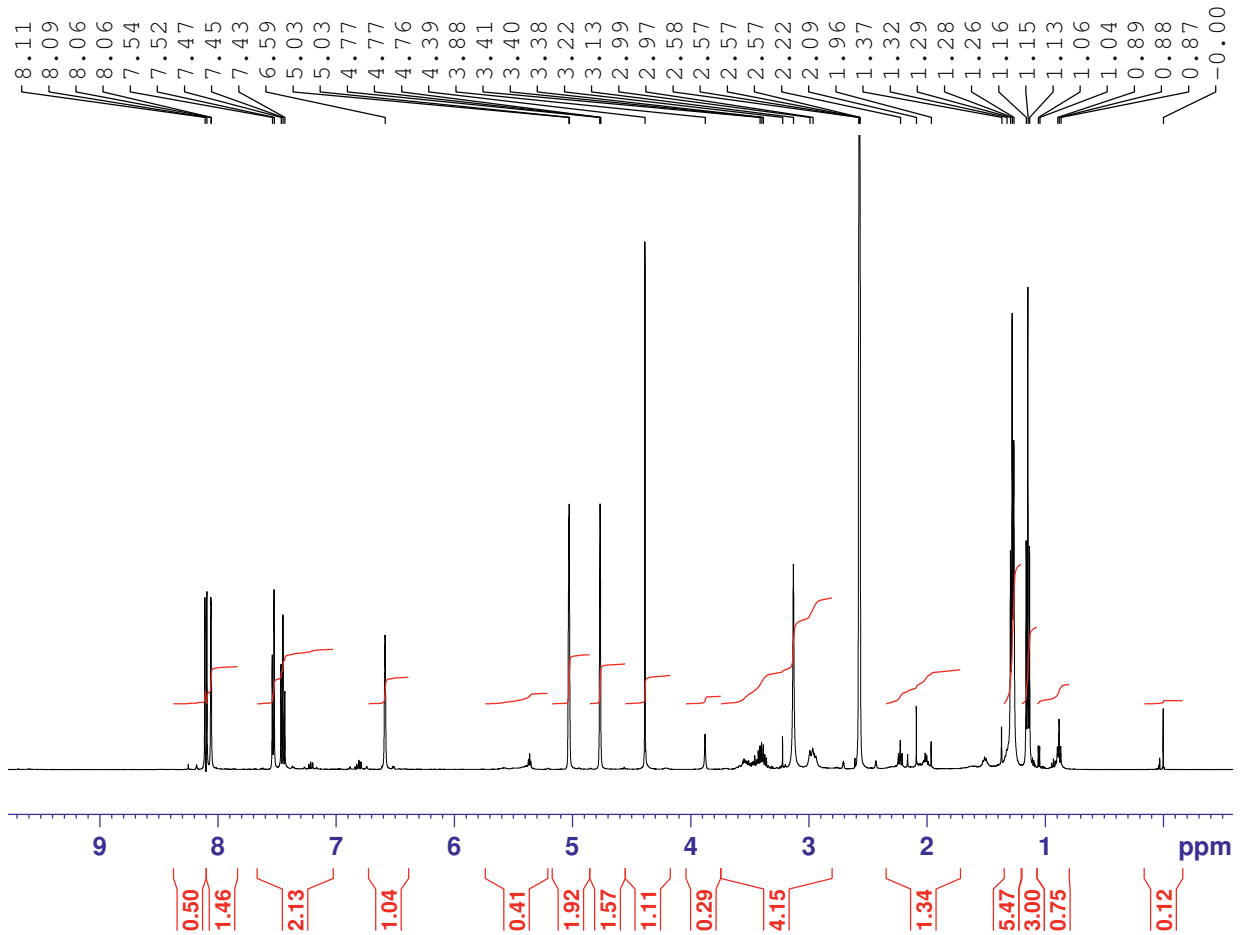
Die Probe entspricht der Struktur eines 1-Ferrocenylcarbonyl -LSD-Derivats. Aufgrund des Eisenatoms im NMR ist eine klare und eindeutige Zuordnung und Integration nicht möglich. Die Probe wurde bei 500MHz gemessen und das Spektrum mit einem Referenzspektrum verglichen.

Das erhaltene 1H-Spektrum ist deutlich besser aufgelöst als alle Referenzspektren und die daraus abzuleitenden Befunde sind sehr ähnlich.



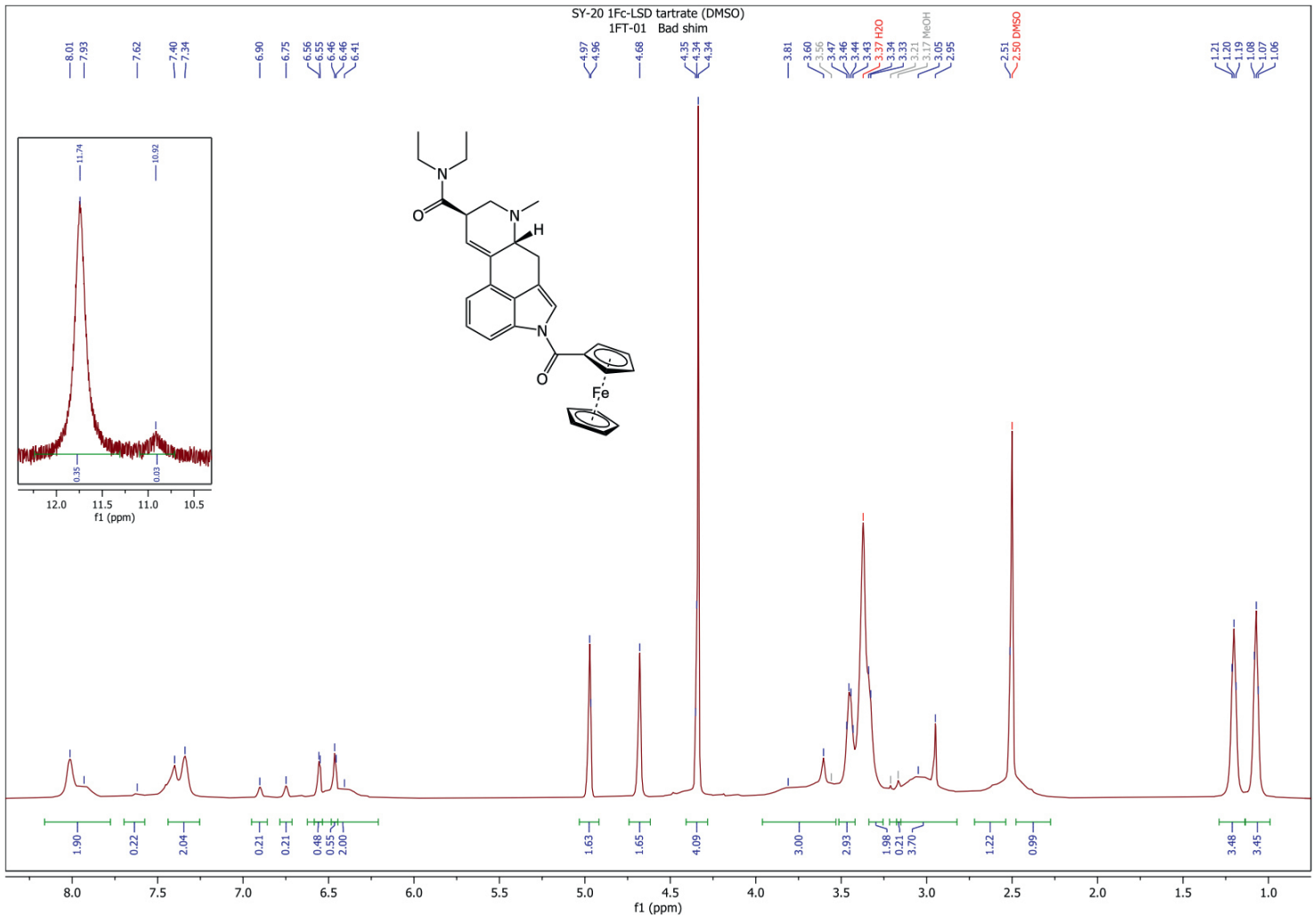
1FE-LSD (1-Ferrocenylcarbonyl-LSD)

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 1: 1-FE-LSD 1H-NMR (500 MHz, DMSO-d6)**

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.



3

Abbildung 2: Mitgeliefertes Vergleichsspektrum: 1H-NMR (600 MHz, DMSO-d6)

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.

**ERGEBNISSE:**

Auch wenn eine eindeutige Zuordnung und Strukturaufklärung aufgrund des Eisenatoms per NMR nicht möglich ist, lassen sich wichtige Struktureinheiten identifizieren und die Identität ergänzend zu einer Masse bestätigen.

Entscheidend für die Identität des FE-LSD ist seine Farbe, sein Absorptionsmaximum, sowie die Tatsache, dass bei einem <sup>1</sup>H-NMR verbreitete Signale mit ungeraden Integrationszahlen auftreten. Trotzdem lassen sich folgende Befunde aus dem NMR-Spektrum ableiten:

Die drei Singulets bei 4,4, 4,7 und 5,1 ppm bei denen das Singulett bei 4,4 etwa doppelt so hoch ist wie die beiden anderen bei 4,7 und 5,1 ppm sind die beiden Cyclopentadienyl-Ringe des Ferrocens. Es ist nicht möglich, aus dem Spektrum Tartrat-Ionen zu identifizieren. Insofern ist es möglich, dass es sich um ein anderes Salz oder um die freie Base handelt.

Die N-Methylgruppe bei etwa 2,5 ppm liegt unter dem Lösungsmittelsignal von DMSO. Im Aromatenbereich zwischen 6,5 und 8,2 ppm sind 5 Signale identifizierbar, die in Summe auch 5 Protonen entsprechen, was auch der erwarteten Signanzahl des Ergolin Grundkörpers entspricht.

Zwischen 1,1 und 1,3 ppm sind zwei charakteristische Triplett zu erkennen, die zur Diethylamid-Struktur gehören.

Eine Aussage zur genauen Stereochemie an den Positionen 6, 6a, 7 und 8 (R-/S-Konfiguration) ist anhand der vorliegenden NMR-Daten nicht möglich. Da allerdings im <sup>1</sup>H-Spektrum bei 6,16 ppm kein zweites Signal auftaucht, sollte es sich nur um eine Spezies handeln.

**Die Identität der Verbindung kann damit in Kombination mit einer Masse (aus GCMS oder LC-MS) als gesichert angesehen werden. Zur Salz-Struktur kann keine Aussage getroffen werden. Da keine Signale einen Hinweis auf die Anwesenheit von Tartrat zu finden sind, handelt es sich entweder um ein anorganisches Salz oder um die freie Base.**

**Dr. Felix Blei**  
**Geschäftsführer LeadiX GmbH**