



Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра загальної хімії
Українське товариство з медичної хімії

Міжнародна internet-конференція

Modern chemistry of medicines

7 листопада 2025 р.
м. Харків, Україна

Посвідчення Державної наукової
установи «Український інститут
науково-технічної експертизи та
інформації» № 850 від 26.12.2024 р.

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра загальної хімії
Українське товариство медичної хімії

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
General chemistry department
Ukrainian Society of Medicinal Chemistry

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
7 листопада 2025 року

Materials
of the International Internet Conference ‘Modern chemistry of medicines’,
November 7, 2025

ХАРКІВ
KHARKIV
2025



УДК 615.3(06)
М 78

Електронне видання мережне

Редакційна колегія: проф. Кухтенко О.С., проф. Георгіянець В.А., проф. Колісник С.В., проф. Северіна Г.І., проф. Перехода Л.О., доц. Михайленко О.О., доц. Криськів О.С., доц. Кобзар Н.П., доц. Смілова Н.М., ас. Маслов О.Ю., Сайфудінова Р.П.

Конференція зареєстрована в УкрІНТЕІ (посвідчення №850 від 26.12.2024)

Modern chemistry of medicines: матеріали Міжнародної Internet-конференції (7 листопада 2025 р., м. Харків) – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2025. – 193 с. – Назва з тит. екрана.

Збірник містить матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (7 листопада 2025 р., м. Харків) присвячені висвітленню сучасних тенденцій створення оригінальних АФІ синтетичного та рослинного походження, фармацевтичної розробки, забезпечення якості лікарських засобів.

Для широкого кола наукових та практичних фахівців у галузі фармації та медицини, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників фармацевтичних підприємств, викладачів закладів вищої освіти.

*Редколегія не завжди поділяє погляди авторів.
Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір,
точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних,
власних імен та інших відомостей.
Матеріали подаються мовою оригіналу.*

УДК 615.3(06)

© НФаУ, 2025



Structural and chemical analysis of selective serotonin reuptake inhibitors in the therapy of post-traumatic stress disorder

Viktoriia Brit, Hanna Severyna

National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine

britvika@gmail.com

Introduction. Post-traumatic stress disorder (PTSD) is a mental disorder that arises as a result of severe stress or traumatic events and is accompanied by anxiety, depression, and insomnia. One of the main treatment approaches is the use of selective serotonin reuptake inhibitors (SSRIs), which normalize serotonergic transmission and reduce manifestations of anxiety and depression. The effectiveness of these agents directly depends on the features of their chemical structure; therefore, the identification of key pharmacophoric fragments is an essential component in understanding their selectivity, activity, and pharmacokinetic properties.

Materials and methods. Information sources: PubMed and Elsevier databases.

Results and discussion. Based on a structural and chemical analysis of active substances from the SSRI group—namely fluoxetine, sertraline, paroxetine, fluvoxamine, and citalopram—a number of patterns have been identified that determine the pharmacological activity and selectivity of these compounds. All studied substances contain a phenyl radical in their structure, which serves as a key structural fragment necessary for ensuring the lipophilicity of the molecule and its interaction with the hydrophobic region of the serotonin transporter. A characteristic feature is the presence of electron-withdrawing substituents on the phenyl ring. Specifically, fluoxetine contains a trifluoromethyl group in the para-position of the phenyl ring; sertraline has two chlorine atoms in the 3,4-positions; paroxetine contains a fluorine atom; fluvoxamine features both trifluoromethyl and methoxy groups; and citalopram possesses a fluorine atom and a cyano group.

Most of the analyzed compounds contain electronegative atoms (fluorine, chlorine, oxygen, or nitrogen), which determine molecular polarity, influence solubility, and contribute to hydrogen-bond formation with the active sites of the serotonin transporter. The presence of such atoms and groups is crucial for forming a stable complex between the drug molecule and its protein target.

An important structural component is the amino group, which participates in hydrogen-bond formation with amino acid residues of the transporter's active site and determines ionization properties that affect intestinal absorption. The type of amino group varies across compounds: fluoxetine contains a secondary amine ($-\text{NHCH}_3$) located at the end of a propyl chain; sertraline possesses a primary amine ($-\text{NH}_2$) attached to a carbon atom in the ring; paroxetine and fluvoxamine both contain secondary amines; and only citalopram features a tertiary amine ($-\text{N}(\text{CH}_3)_2$), which facilitates penetration across the blood-brain barrier.

Conclusions. Common structural features of SSRIs include the presence of a phenyl core with electron-withdrawing substituents, an amino group (primary, secondary, or tertiary depending on the compound), and electronegative atoms. Further optimization of these structural parameters opens prospects for improving the quality of PTSD pharmacotherapy and lays the foundation for developing new antidepressants with enhanced efficacy.

References.

1. Lin, Y.T., Tsai, G.E., & Su, T.P. (2023). *Beyond serotonin: new directions for antidepressant discovery and PTSD treatment*. *International Journal of Molecular Sciences (MDPI)*, 24(6), 5238. <https://www.mdpi.com/1422-0067/24/6/5238>
2. *Structure-based Discovery of Conformationally Selective Inhibitors of the Serotonin Transporter*. *Cell* (2024) May 2;186(10):2160-2175.e17. PMID: 37137306. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/37137306>
3. *Pharmacogenetics of selective serotonin reuptake inhibitors (SSRI): A serotonin reuptake transporter (SERT)-based approach*. (2025). PMID: 38157886. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/38157886>