

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**  
**HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI**  
**PhD.03/30.12.2019.K.02.05 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**

**NAYIMOVA BAHORA KOMILJONZODA**

**MELISSA O‘SIMLIGIDA EFIR MOYLARINING HOSIL BO‘LISH**  
**KINETIKASINI GX-MS USULIDA O‘RGANISH**

**02.00.04 – Fizik kimyo**

**KIMYO FANLARI BO‘YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD) DISSERTATSIYASI**  
**AVTOREFERATI**

**Samarqand – 2025**

**Falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi avtoreferati mundarijasi**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)**

**Nayimova Bahora Komiljonzoda**

Melissa o‘simligida efir moylarining hosil bo‘lish kinetikasini GX-MS usulida o‘rganish ..... 3

**Найимова Бахора Комилжонзода**

Изучение кинетики образования эфирных масел у растения Мелисса методом GX-МС ..... 21

**Nayimova Bahora Komiljonzoda**

Study of the kinetics of essential oil formation in Melissa plant using the GC-MS method ..... 39

**E‘lon qilingan ishlar ro‘yxati**

Список опубликованных работ  
List of published works ..... 42

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**  
**HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI**  
**PhD.03/30.12.2019.K.02.05 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI**

**NAYIMOVA BAHORA KOMILJONZODA**

**MELISSA O‘SIMLIGIDA EFIR MOYLARINING HOSIL BO‘LISH**  
**KINETIKASINI GX-MS USULIDA O‘RGANISH**

**02.00.04 – Fizik kimyo**

**KIMYO FANLARI BO‘YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD) DISSERTATSIYASI**  
**AVTOREFERATI**

**Samarqand – 2025**

Falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2024.2.PhD/K766 raqam bilan ro'yxatga olingan.

Dissertatsiya Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetida bajarilgan.  
Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengash veb-sahifasida (www.samdu.uz) va «ZiyoNET» axborot-ta'lim portalida (www.ziynet.uz) joylashtirilgan.

**Ilmiy rahbar:** Muxamadiyev Nurali Qurbonaliyevich  
kimyo fanlari doktori, professor

**Rasmiy opponentlar:** Eshmamatova Nodira Baxramovna  
kimyo fanlari doktori, dotsent  
Matchanov Alimjan Davlatbayevich  
kimyo fanlari doktori, professor

**Yetakchi tashkilot:** O'zR FA, akd. S. Yunusov nomidagi O'simlik  
moddalar kimyosi instituti

Dissertatsiya himoyasi Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti huzuridagi ilmiy darajalar beruvchi PhD.03/30.12.2019.K.02.05 Ilmiy kengashning 2025-yil «29» may soat 13:00 dagi yig'ilishida bo'lib o'tadi (Manzil: 140104, Samarqand shahri, Universitet xiyoboni, 15-uy. Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti, Biokimyo instituti, Kimyo binosi. Tel.: (+99866) 239-12-47, faks: (0366) 239-11-40, e-mail: devonxona@samdu.uz.

Dissertatsiya bilan Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (41 -raqam bilan ro'yxatga olingan). (Manzil: 140104, Samarqand shahri, Universitet xiyoboni, 15-uy. Tel.: (+99866) 239-11-51).

Dissertatsiya avtoreferati 2025-yil «19» may kuni tarqatildi.  
(2025-yil «19» may dagi № 3 raqamli reyestr bayonnomasi).



  
A.M. Nasimov  
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy  
kengash raisi, t.f.d., professor

  
J.R. Uzokov  
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy  
kengash kotibi, PhD

  
O.N. Ro'zimuradov  
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy  
kengash qoshidagi ilmiy seminar  
raisi, k.f.d., professor

## KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertasiyasi annotatsiyasi)

**Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati.** Dunyoda ajratish, sifat va miqdoriy analiz hamda tadqiqot usuli sifatida xromatografiya XX asrning buyuk kashfiyoti sifatida e'tirof etilgan. Moddalarni toza holda ajratish va ko'p komponentli murakkab aralashmalar analizida uning o'rnini beqiyos. Bugungi kunda kimyo, neftkimyo, farmatsevtika, ekologiya, tibbiyot sohalaridagi murakkab tarkibli sintetik va tabiiy aralashmalar analizi GC-MS (gaz xromatografiya – mass spektrometriya) usulida bajarilmoqda. Shuningdek, xromatografiya uchun asbob-uskunalar ishlab chiqarish sanoati eng foydali tarmoqlardan biriga aylandi. Xromatografik ajralish jarayonlarining uzluksiz borishi esa avtomatlashtirish imkoniyatini yaratgan. Shu bilan birga, usulni takomillashtirish, uning yangi variantlarini ishlab chiqish va qo'llanilish imkoniyatlarini kengaytirish bo'yicha ishlar o'zining ahamiyati yuqoriligi bilan diqqatga sazovor.

Jahonda xromatografik jarayonlarning nazariy asoslarini ishlab chiqilgan, ularni modellashtirish va maqbullashtirish borasida talaygina yutuqlarga erishilgan. Bu borada olib borilgan tadqiqotlar natijasida xromatografik jarayonlarning aniq va samarali modellari yaratilgan hamda xromatografiya sohasidagi ko'plab muammolar hal etilgan. Jumladan, o'simliklar tarkibidan ajratilgan efir moylari tarkibidagi biologik faol moddalar ilmiy asosda o'rganilib, ularning kimyoviy tarkibi va terapevtik xususiyatlari baholangan. Xromatografik jarayonlarning diffuziyaga asoslangan turli modellari ishlab chiqilgan bo'lsa-da, ularning aksariyati qo'zg'almas faza va aralashma tarkibidagi komponentlar o'zaro ta'sirini hisobga olmaydi. Shu sababli, kross-diffuziya modeli ushbu o'zaro ta'sirlarni inobatga olgan holda aniq modellashtirish imkoniyatini yaratish nuqtai nazaridan tadqiqotchilar e'tiboridadir.

Respublikamizda xromatografik jarayonlarni modellashtirish va maqbullashtirish, murakkab tarkibli sintetik va tabiiy birikmalar analiz usullarini yaratish, tibbiyotda diagnostik me'zonlarni ishlab chiqish, efir moylari tarkibini o'rganish borasida talaygina ishlar qilingan. O'zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo'yicha Harakatlar strategiyasida<sup>1</sup> «mahalliy xomashyo resurslarini chuqur qayta ishlash asosida yuqori qo'shimcha qiymatli tayyor mahsulot ishlab chiqarish, prinsipial jihatdan yangi mahsulot va texnologiya turlarini o'zlashtirish, shu asosda ichki va tashqi bozorlarda milliy tovarlarning raqobatbardoshligini ta'minlash» bo'yicha muhim vazifalar belgilab berilgan. Shuningdek bu borada 2022-2026 yillarga mo'ljallangan Yangi O'zbekiston taraqqiyot strategiyasining yettita ustuvor yo'nalishiga muvofiq aholiga tibbiy xizmat kuratish darajasini yangi bosqichga ko'tarishda «Kimyo va gaz-kimyosi sohalarini rivojlantirish va tabiiy gazni qayta ishlash darajasini 8 foizdan 20 foizga yetkazish.»<sup>2</sup> kabi vazifalar belgilangan. Shu boisdan xromatografik jarayonlarni kross-diffuziya yordamida modellashtirish, ajralish jarayonlarini maqbullashtirish, efir moylari analizi sharoitlarini aniqlashda qo'llash hamda

---

<sup>1</sup> O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017-yil 7-fevraldagi PF4947-son «O'zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo'yicha Harakatlar strategiyasi to'g'risida»gi Farmoni

<sup>2</sup> O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60 son «2022-2026-yillarga mo'ljallangan Yangi O'zbekiston taraqqiyot strategiyasiga to'g'risida»gi Farmoni.

efir moylarining o‘simlik organizmida to‘planish kinetikasini o‘rganish dolzarb muammolardan biridir.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017-yil 7-fevraldagi PF-4947-son “O‘zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo‘yicha Harakatlar strategiyasi to‘g‘risida”gi Farmoni, 2017-yil 29-avgustdagi PQ3246-sonli “Kimyo sanoati tashkilotlarining eksport-import faoliyatini takomillashtirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”gi, 2018-yil 17-yanvardagi PQ-3479-son “Mamlakat iqtisodiyoti tarmoqlarining talab yuqori bo‘lgan mahsulot va xomashyo turlari bilan barqaror ta‘minlash chora-tadbirlari to‘g‘risida”gi va 2019-yil 3-apreldagi PQ-4265-sonli “Kimyo sanoatini yanada isloh qilish va uning investisiyaviy jozibadorligini oshirish choratadbirlari to‘g‘risida” gi hamda 2021-yil noyabrdagi qarorlari hamda boshqa me‘yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishda ushbu dissertatsiya tadqiqoti natijalari muayyan darajada xizmat qiladi.

**Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining asosiy ustuvor yo‘nalishlariga bog‘liqligi.** Mazkur dissertatsiya ishi respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining VII “Kimyo, kimyoviy texnologiyalar va nanotexnologiyalar” ustuvor yo‘nalishlariga muvofiq holda bajarilgan.

**Muammoning o‘rganilganlik darajasi.** Xromatografiya usullarining nazariy asoslari va ularning turli maqsadlarda, jumladan, moddalarni ajratishda, murakkab tarkibli sintetik va tabiiy birikmalar analizida hamda fizik-kimyoviy tadqiqot usuli sifatida qo‘llanilishi bo‘yicha talaygina ishlar amalga oshirilgan. Bu boradagi tadqiqotlarni amalga oshirishda Nobel mukofoti sovrindorlari M. S. Svet, J. Martin va R. Sing, E. N. S. Mur, V. X. Shteyn, E. Klesper, A. X. Korvin, T. B. Gapon, A. V. Kiselev, Ya. I. Yashin, V. A. Davankov, O. A. Shpigun, K. I. Sakodinskiy, V. G. Berezkin, V. N. Lipavskiy va boshqalar katta hissa qo‘shgan. Natijada xromatografik jarayonlarni belgilovchi gidrodinamik, sorbsion, diffuzion va boshqa hodisalar bo‘yicha modellar ishlab chiqilgan hamda ularning adekvatligi baholangan. Xromatografiya usullarining turli tabiatga ega bo‘lgan murakkab tarkibli tabiiy va sintetik birikmalarni analiz qilishda qo‘llanishi, shuningdek, fizik-kimyoviy tadqiqot usuli sifatida sorbentlarning tekstur, termodinamik va boshqa xarakteristikalarini o‘rganish bo‘yicha muhim natijalarga erishilgan.

Bu boradagi ishlarni amalga oshirishda mamlakatimizda olib borilgan ishlar ham diqqatga sazavordir. Jumladan, N. S. Zakirov, E. Oripov, X. Sh. Xusainov, N. Q. Muxamadiev, E. A. Abduraxmonov, X. Shoxidoyatov, Q. M. Murodov, I. Ergashov, N. Mukarramov va boshqa olimlar tomonidan amalga oshirilgan tadqiqotlar natijasida katalitik sintez mahsulotlarini analiz qilish metodikasi ishlab chiqilgan, sian guruhi saqlovchi qo‘zg‘almas fazalarning xromatografik xarakteristikalari o‘rganilgan, xromatografiyada modellar va maqbullashtirishning empirik hamda yarim empirik usullari ishlab chiqilgan, murakkab tarkibli tabiiy va sintetik aralashmalarni ajratishning maqbul sharoitlari aniqlangan, patologik jarayonlarni tashxislash mezonlari ishlab chiqilgan.

Shu bilan birga, “sorbent-sorbent” tizimi komponentlarining o‘zaro ta‘sirini hisobga oluvchi modellar hali yaratilmagan, shuningdek, efir moyli o‘simliklar

organizmda efir moylarining to‘planish kinetikasi yetarli darajada o‘rganilmagan. Shu sababli xromatografik jarayonlarda kross-diffuziya modelidan foydalanish, uni murakkab tarkibli aralashmalar, jumladan, efir moylari komponentlarini ajratish sharoitlarini maqbullashtirishda qo‘llash hamda o‘simliklar organizmda efir moylarining to‘planish kinetikasini o‘rganish dolzarb ilmiy masalalardan biri hisoblanadi.

**Dissertatsiya mavzusining dissertatsiya bajarilayotgan ilmiy tadqiqot muassasasining ilmiy tadqiqot ishlari bilan bog‘liqligi.** Dissertatsiya tadqiqoti Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetining ilmiy tadqiqot ishlar rejasidagi “Tabiiy va sintetik materiallarni sintez qilish, tekshirish va qayta ishlashning yangi usullari” mavzusi doirasida bajarilgan.

**Tadqiqotning maqsadi:** xromatografik jarayonlarda kross-diffuziyani qo‘llab, modellashtirish hamda Melissa o‘simligida efir moylarining hosil bo‘lishi kinetikasini GC-MS usuli yordamida baholashdan iborat.

**Tadqiqotning vazifalari:**

xromatografik ajratish jarayonlarini kross-diffuziyani qo‘llab, modellashtirish va uning adekvatligini baholash;

kross-diffuziya modelini murakkab tarkibli aralashmalar komponentlarini ajratishni maqbullashtirishda qo‘llash imkoniyatini baholash;

Melissa o‘simligi tarkibida efir moylarining hosil bo‘lishi kinetikasi modellarini ishlab chiqish;

Melissa o‘simligida efir moylarining hosil bo‘lishi kinetikasini GC-MS usulida o‘rganish.

**Tadqiqotning obyekti** sifatida xromatografik ajratish jarayonlari va Melissa Officinalis L., Mediasia Macrophylla Pimen, Lavandula Angustifolia o‘simligidan ajratib olingan efir moylari.

**Tadqiqotning predmetini** murakkab tarkibli aralashmalarni ajratishda kross-diffuziya ta‘sirini modellashtirish usullari, kolonkada ajratish jarayonining matematik modeli, shuningdek, Melissa officinalis L., Mediasia macrophylla Pimen, Lavandula angustifolia o‘simliklaridan ajratib olingan efir moylarining kimyoviy tarkibi, ularning hosil bo‘lish kinetikasi va tarkibiy komponentlarining to‘planish dinamikasi hamda efir moylarining tarkibiy qismlarining adsorbsiyasi va ularning termodinamik xususiyatlari o‘rganilgan.

**Tadqiqotning usullari.** Dissertatsiya ishida GC-MS usuli, fizik-kimyoviy tadqiqotlar, kinetik analiz, matematik model yaratish, hamda statistik tadqiqot usullari qo‘llanildi.

**Tadqiqotning ilmiy yangiligi** quyidagilardan iborat:

Xromatografik ajratish jarayonlarini tadqiq qilishda ilk marta kross-diffuziya asosida matematik model ishlab chiqilgan va uning adekvatligi tajriba natijalari bilan muvofiq kelishi isbotlangan;

kross-diffuziya modelining murakkab tarkibli aralashmalar komponentlarini ajratish sharoitlarini maqbullashtirishda qo‘llash imkoniyatlari baholangan va tajriba natijalariga nisbatan chetlanishi 2,5-3,0 % dan oshmasligi tasdiqlangan;

GC-MS usulida Melissa officinalis L., Mediasia macrophylla Pimen va Lavandula angustifolia o‘simliklarining efir moylari tarkibida mos ravishda 20, 25 va 34 ta

kimyoviy komponentlar aniqlangan hamda ularning ba'zilar (lyonalol,  $\alpha$ -pinen,  $\beta$ -kariofillen, sitral va boshqalar) shartli patogen bakteriyalarga nisbatan yuqori darajadagi antibakterial faollikka ega ekanligi ilmiy jihatdan isbotlangan;

Melissa o'simligi tarkibida efir moylari ayrim komponentlarining hosil bo'lishi kinetikasining modellari ishlab chiqilgan, hamda ularning hosil bo'lishi fermentativ reaksiyalar kinetikasiga mos kelishi aniqlangan.

**Tadqiqotning amaliy natijalari** quyidagilardan iborat:

kross-diffuziya asosida xromatografik ajratish jarayonlarini modellashtirish metodikasi ishlab chiqilgan;

kross-diffuziya modelini qo'llab, Melissa o'simligi tarkibidagi efir moylarining asosiy komponentlarini ajratish sharoiti maqbullashtirildi hamda xromatogrammani shakllantirishning dasturi yaratilgan;

GC-MS usulida efir moylarni aniqlash va ularning hosil bo'lish jarayonlari kinetikasini nazorat qilish metodikasi ishlab chiqilgan;

Melissa o'simligi tarkibidan ajratib olingan efir moyining foydali komponentlarini to'planishi bo'yicha o'simlikni terish vaqti bo'yicha tavsiyalar ishlab chiqilgan.

**Tadqiqot natijalarining ishonchliligi:** tadqiqot natijalarining ishonchliligi va aniqligi qo'llanilgan zamonaviy metod va usullar bilan ta'minlandi. Dissertatsiya doirasida GC-MS usuli yordamida kimyoviy tarkibni aniqlash, fizik-kimyoviy tadqiqotlar asosida moddalarning xos xususiyatlarini o'rganish, kinetik analiz orqali reaksiya jarayonlarini analiz qilish amalga oshirildi. Shuningdek, matematik modellar jarayonlarni to'g'ri tasvirlash va prognozlashda samarali qo'llanildi, statistik analiz usullari esa natijalarning ishonchliligini tasdiqlashda muhim rol o'ynadi. Bu elementlar birgalikda tadqiqot xulosalarining ilmiy asoslangan va qayta tekshirish mumkinligini ta'minladi.

**Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.**

Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati shundan iboratki, unda kross-diffuziya yondashuvidan foydalanib, xromatografik ajratish jarayonlarining modeli ishlab chiqilgan, uning adekvatligi baholangan, kross-diffuziya modelining murakkab tarkibli aralashmalar komponentlarini ajratish jarayonini maqbullashtirishdagi imkoniyatlari va Melissa o'simligi tarkibida efir moylarining hosil bo'lish kinetikasini modellashtirish asosida ularning to'planish kinetikasi aniqlangan hamda xromatografik jarayonlarning fizik-kimyosi bo'yicha yangi bilimlar bilan boyitilgan.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati shundan iboratki, kross-diffuziya modeli asosida xromatografik ajratish jarayonlarining tezligi va aniqligi yaxshilangan, kross-diffuziya modelidan foydalanib, Melissa o'simligi tarkibidagi efir moylarining asosiy komponentlarini ajratish sharoitlari maqbullashtirildi, xromatogrammani shakllantirish dasturi ishlab chiqilgan, GC-MS usuli yordamida efir moylarni aniqlash va ularning hosil bo'lish jarayonlarini nazorat qilish metodikasi ishlab chiqilgan, shuningdek, Melissa o'simligi tarkibidan ajratib olingan efir moyi foydali komponentlarining to'planishi uchun optimal vaqt bo'yicha tavsiyalar berilgan hamda xromatografiya usullarining turli tabiatga ega bo'lgan murakkab aralashmalarni analiz qilishdagi qo'llash imkoniyatlari kengaytirilgan.

**Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi.** Melissa o‘simligida efir moylarining hosil bo‘lish kinetikasini GC-MS usulida o‘rganish bo‘yicha olingan natijalar asosida: melissa o‘simligidan efir moyini ajratish texnologiyasi O‘zbekiston-Turkiya MCHJ ”Ahmad Isroil Tex” qo‘shma korxonaning “2025-2026 yillarda amaliyotga joriy etish bo‘yicha istiqbolli ishlanmalar ro‘yxati”ga kiritilgan (28/12-01 2024 yil “28” dekabr). Natijada Melissa o‘simligidan efir moyini ajratish texnologiyasi amaliyotga joriy etiladi, eksport o‘rnini qoplaydigan va importga yo‘naltirilgan mahsulot ishlab chiqariladi, hamda mahsulotga bo‘lgan ehtiyoj ma‘lum darajada qondiriladi.

melissa o‘simligidan ajratib olingan efir moyidan antiseptik suv tayyorlash texnologiyasi O‘zbekiston-Turkiya MCHJ “Ahmad Isroil Tex” qo‘shma korxonada amaliyotga joriy etilgan (28/12-02 2024 yil “28” dekabr). Natijada Melissa o‘simligidan ajratib olingan efir moyidan antiseptik suv tayyorlashga erishiladi, eksport o‘rnini qoplaydigan va importga yo‘naltirilgan mahsulot ishlab chiqariladi hamda mamlakatimizda mahsulotga bo‘lgan ehtiyoj ma‘lum darajada qondiriladi.

**Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi.** Mazkur tadqiqot natijalari 13 ta, jumladan 7 ta xalqaro va 6 ta respublika ilmiy-amaliy anjumanlarida ma‘ruza qilingan va muhokamadan o‘tkazilgan.

**Tadqiqot natijalarining e‘lon qilinganligi.** Dissertatsiya mavzusi bo‘yicha jami 7 ta ilmiy ish chop etilgan, shulardan O‘zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasining falsafa doktori (PhD) dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 3 ta maqola respublikada, 4 ta maqola xorijiy jurnallarda nashr etilgan.

**Dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi.** Dissertatsiya tarkibi kirish, to‘rtta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxatidan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 111 betni tashkil etadi.

## DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

**Kirish** qismida o‘tkazilgan tadqiqotlarning dolzarbligi va zarurati asoslab berilgan, tadqiqotning maqsadi va vazifalari, obykti va predmeti tavsiflangan, Respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlariga muvofiqligi ko‘rsatilgan. Shuningdek, tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy natijalari bayon qilingan, olingan natijalarning ilmiy hamda amaliy ahamiyati yoritilgan, natijalarni amaliyotga joriy etish masalalari, nashr etilgan ilmiy ishlar va dissertatsiya tuzilishi to‘g‘risida ma‘lumotlar keltirilgan.

**Dissertatsiyaning “GC-MS YORDAMIDA EFIR MOYLARINING TADQIQOTI”** deb nomlangan **I bobi** adabiyotlar analiziga bag‘ishlangan bo‘lib, unda efir moylarini tadqiq qilishda GC-MS usulining o‘rni, ma‘lumotlarni qayta ishlash va analiz qilish jarayonlari, GC-MS usulida o‘lchash va ma‘lumotlarni yig‘ish, mass-spektr signalini qayta ishlash, ma‘lumotlarni moslashtirish hamda boshlang‘ich ma‘lumotlarni qayta ishlash bosqichlari yoritilgan. Shuningdek, GC-MS natijalarida imzolarni aniqlash, ma‘lumotlarni analiz qilish, tasvirlarni aniqlash va ularni tasniflashning turli statistik usullari, namunani tanib olish algoritmlari, jarayonlarni ehtimoliy modellar asosida bashoratlash texnikasi, ko‘p kanalli ma‘lumotlarni qayta

ishlash usullari hamda xromatografiyada dasturiy ta'minotning asosiy bosqichlariga doir ilmiy ma'lumotlar umumlashtirilgan. Shu bilan birga, dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati asoslab berilgan.

**Dissertatsiyaning II bobi "Tadqiqot obyektlari va usullari"** deb nomlanib, unda efir moylari tarkibi va ularning yig'ilish kinetikasi gaz xromatografiya–mass-spektrometriya (GC-MS) usuli yordamida analiz qilingani bayon etilgan. Efir moylarini ajratish uchun gidrodistillatsiya usuli qo'llanilgan. Olingan natijalar GC-MS orqali analiz qilinib, asosiy tarkibiy qismlar identifikatsiya qilingan va ularning fenologik bosqichlarga bog'liq o'zgarishlari aniqlangan. Ajratish jarayonlarini optimallashtirish uchun ushlanish vaqti, gaz tezligi, nazariy tavaqchalar soni, selektivlik va ajratish samaradorligi kabi parametrlar baholangan. Bundan tashqari, termodinamik kattaliklar, xromatografik ushlanish parametrlari hamda efir moylarining tarkibiy va dinamik xususiyatlari tadqiq qilingan.

**Dissertatsiyaning "Kross-diffuziya modeli yordamida xromatografik ajratish jarayonini modellashtirish"** deb nomlangan **III bobida** efir moyi tarkibiy qismlarini gaz xromatografiyasi yordamida ajratish jarayonini modellashtirish uchun kross-diffuziya modeli ishlab chiqilgani bayon etilgan. Tadqiqotda harorat dasturlash, komponentlarning o'zaro ta'siri va ajratish samaradorligiga ta'sir etuvchi omillar, jumladan, kolonka uzunligi, gaz tashuvchi tezligi hamda harorat oshish rejimi analiz qilingan. Modellashtirish natijalari real xromatografik tajribalar bilan solishtirilib, asosiy komponentlarning kontsentratsiya profillari va ushlanish vaqtlari aniqlangan. Kross-diffuziyaning komponentlarning xromatografik ajralishiga sezilarli ta'sir ko'rsatishi tasdiqlanib, modellashtirish asosida ajratish jarayoni optimallashtirilgan.

**Kolonkada ajratish jarayonini modellashtirish uchun kross-diffuziya modeli.** Kolonkada ajratish jarayonini modellashtirish uchun kross-diffuziya tenglamalariga asoslangan matematik model ishlab chiqildi. Ushbu model kross-diffuziya o'zaro ta'sirlarini hisobga oladi va aralashma har bir komponentning vaqt va haroratga bog'liq harakatini tavsiflaydi.

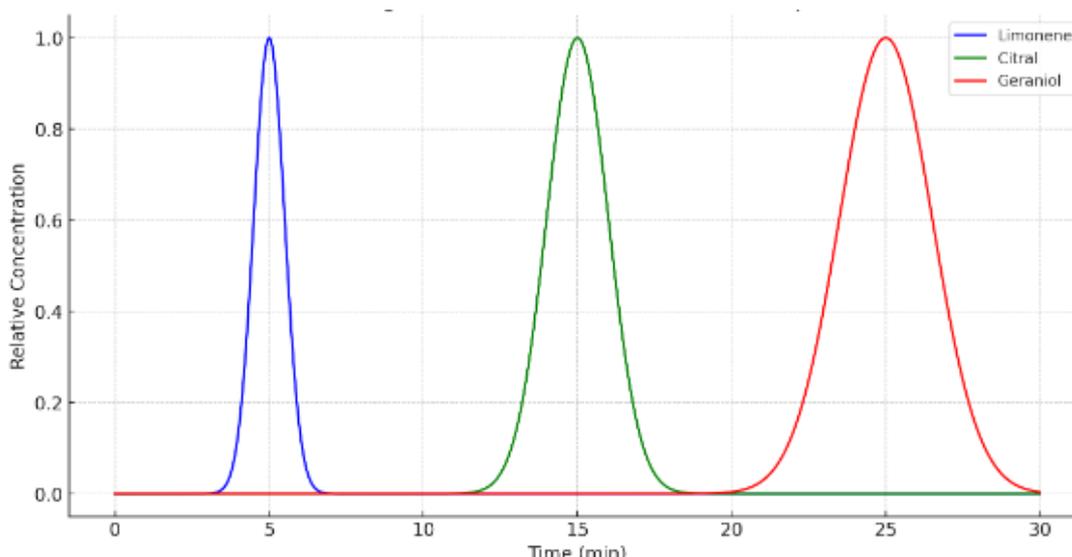
Kross-diffuziya tenglamasi:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + v \frac{\partial C_i}{\partial x} = D_{ii} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \sum_{j \neq i} D_{ij} \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} - k_i(T(t))C_i, \quad (1)$$

bunda:  $C_i(x, t)$  - kolonkadagi  $i$  komponentning  $t$  vaqtdagi konsentratsiyasi;  $v$  - gaz tashuvchining tezligi;  $D_{ii}$  -  $i$  komponentning o'z-o'zini diffuziyalash koeffitsienti;  $D_{ij}$  -  $i$  va  $j$ - komponentlar orasidagi kross-diffuziya koeffitsienti;  $k_i(T(t))$  -  $T(t)$  haroratga bog'liq bo'lgan  $i$ -komponentning desorbsiya koeffitsienti.

Ushbu model gaz tashuvchi ta'sirida har bir komponentning kolonkadagi harakatini hamda diffuziya jarayonlari orqali komponentlarning bir-biriga o'zaro ta'sirini hisobga oladi.

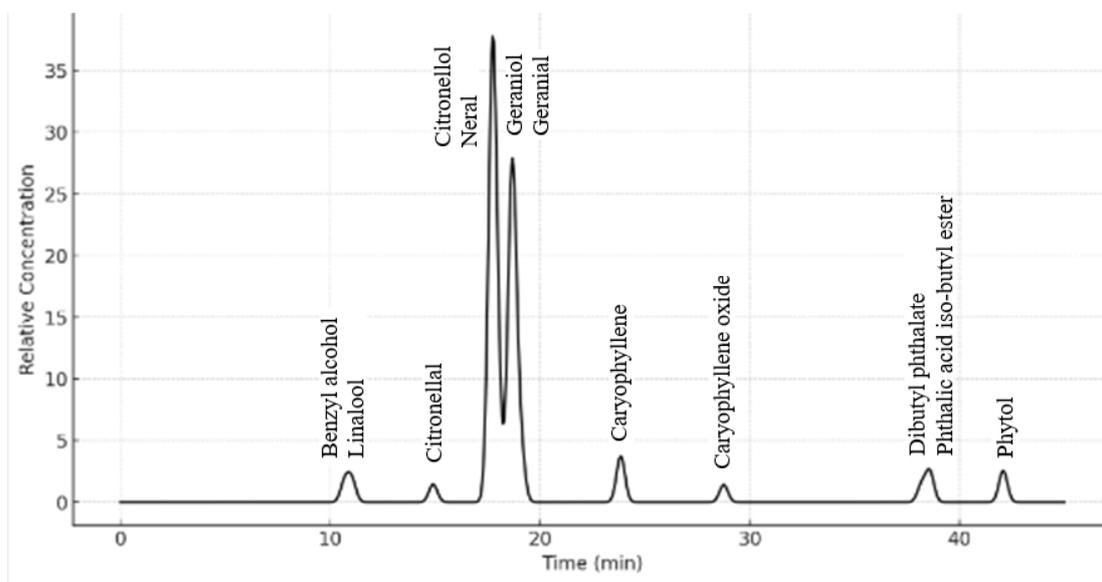
Sonli modellashtirish asosida Melissa efir moyining asosiy komponentlari - limonen, sitral va geraniol uchun kapillyar kolonkasi bo'ylab kontsentratsiya profillari (xromatogrammalar) qurildi (1-rasm).



**1-rasm. Sonli modellashtirish natijasida olingan limonen, sitral va geraniol aralashmasi xromatogrammasi**

Modellashtirish xromatografik analiz parametrlarining Melissa efir moyi komponentlarini ajratishga ta'sirini baholash imkonini berdi. Harorat ko'tarilish tezligini 5°C/min dan 3°C/min gacha pasaytirish sitral va geraniolni ajratishni yaxshiladi, chunki ushlanish vaqti oshdi. Bu kross-diffuziya tufayli yuzaga kelgan piklarning birlashishini kamaytirishga imkon berdi. Geliy oqimi tezligini 1 ml/min dan 0,5 ml/min gacha kamaytirish limonen va sitral orasidagi ajratish sifatini yaxshiladi. Bu ushlanish vaqtining oshishi hisobiga yuz berdi.

Shuningdek, Melissa efir moyining asosiy komponentlari aralashmasini ajratish modellashtirildi va xromatogramma olindi (2-rasm).



**2-rasm. Melissa o'simligi efir moyining asosiy komponentlari xromatogrammasi**

Tadqiqot natijalari shuni ko'rsatdiki, kross-diffuziya o'zaro ta'sirlarini hisobga olgan holda ishlab chiqilgan matematik model xromatografik ajratish jarayonini yuqori aniqlik bilan modellashtirish imkonini berdi. Eksperimental va sonli modellashtirish natijalari taqqoslanib, komponentlarning ushlanish vaqtlari hamda

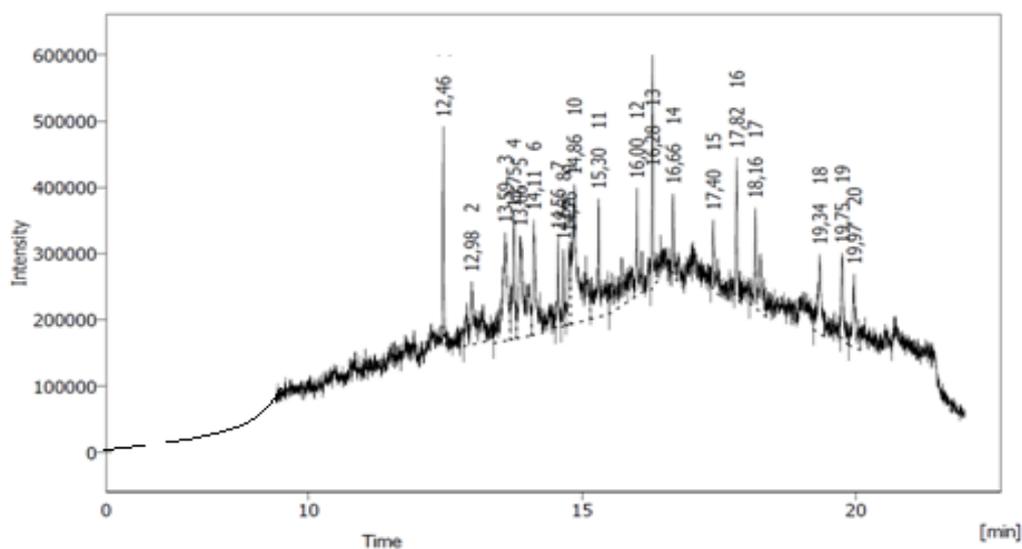
xromatogrammadagi cho‘qqi shakllari muvaffaqiyatli hisobga olindi. Harorat dasturlash va gaz tashuvchi oqim tezligini optimallashtirish komponentlarni samarali ajratishga yordam berdi, ayniqsa qaynash harorati bir-biriga yaqin bo‘lgan birikmalar uchun.

Shunday qilib, kross-diffuziya o‘zaro ta’sirlarini hisobga olgan holda ishlab chiqilgan matematik model xromatografik ajratish jarayonini tasvirlashda yuqori aniqlikni ko‘rsatdi. Melissa efir moyi komponentlarining o‘zaro ta’siri modellashtirishda ularning ushlanish vaqtlari va xromatogrammadagi cho‘qqi shakllarida muvaffaqiyatli hisobga olindi. Komponentlar orasidagi kross-diffuziya ajratish sifatiga, ayniqsa, qaynash harorati bir-biriga yaqin bo‘lgan komponentlar uchun sezilarli ta’sir ko‘rsatdi. Xromatografiya jarayonida qo‘llanilgan harorat dasturlash turli qaynash haroratlariga ega bo‘lgan komponentlarni samarali ajratishga imkon berdi. Harorat gradiyenti sekinroq bo‘lganda ( $3^{\circ}\text{C}/\text{min}$ ), komponentlar ushlanish vaqti ortib, piklarning bir-biriga yaqinligi kamaydi va ajratish sifati yaxshilandi. Kross-diffuziya modeli murakkab ko‘p komponentli aralashmalarni, jumladan, Melissa efir moyini analiz qilishda o‘z samaradorligini ko‘rsatdi.

Dissertatsiyaning **“Efir moylarining kimyoviy tarkibi, hosil bo‘lish kinetikasi va ularning adsorbsiya termodinamikasi”** deb nomlangan IV bobida Melissa officinalis L., Mediasia Macrophylla Pimen va Lavandula angustifolia o‘simliklaridan ajratilgan efir moylarining GC-MS analizi natijalari, ularning kimyoviy tarkibi, hosil bo‘lish kinetikasi va adsorbsiyasi termodinamikasi keltirilgan. Tadqiqotda Melissa officinalis L. efir moyining asosiy komponentlari sitral, geraniol va linalool bo‘lib, ularning o‘shish bosqichlariga bog‘liq ravishda to‘planish dinamikasi o‘rganilgan. Mediasia Macrophylla Pimen efir moyida metileugenol va trans-ligustilid yuqori konsentratsiyada ekani aniqlangan. Lavandula angustifolia efir moyi tarkibida esa L-kamfora va linalool dominant ekani qayd etilgan bo‘lib, bu moyning antibakterial va yallig‘lanishga qarshi xususiyatlariga sabab bo‘ladi. Tadqiqot natijalari efir moylarining fizik-kimyoviy xususiyatlarini, ularning optimal ajratish sharoitlarini va farmatsevtika, kosmetika hamda oziq-ovqat sanoatidagi qo‘llanilish imkoniyatlarini aniqlashga qaratilgan.

**Melissa Officinalis L. o‘simlikining yer ustki qismi gidrodistillatining kimyoviy tarkibini GC-MS analizi.** Melissa officinalis L. o‘simligining yer ustki qismlari distillatsiya uskunasi joylashtirilib, bug‘ distillatsiya jarayoni amalga oshirildi. Bu jarayonda o‘simlik orqali o‘tuvchi bug‘ uchuvchan komponentlarni ajratib, keyinchalik kondensatsiyalanib, gidrodistillat sifatida yig‘ildi. Olingan gidrodistillatning kimyoviy tarkibini analiz qilish uchun GC-MS usulidan foydalanildi. Namuna tayyorlash jarayonida gidrodistillat geksan yordamida ekstraksiya qilindi, bu esa analiz uchun optimal sharoitlarni ta’minladi.

Melissa o‘simligining yer ustki qismi gidrodistillatining xromatogrammasi 3-rasmda keltirilgan.

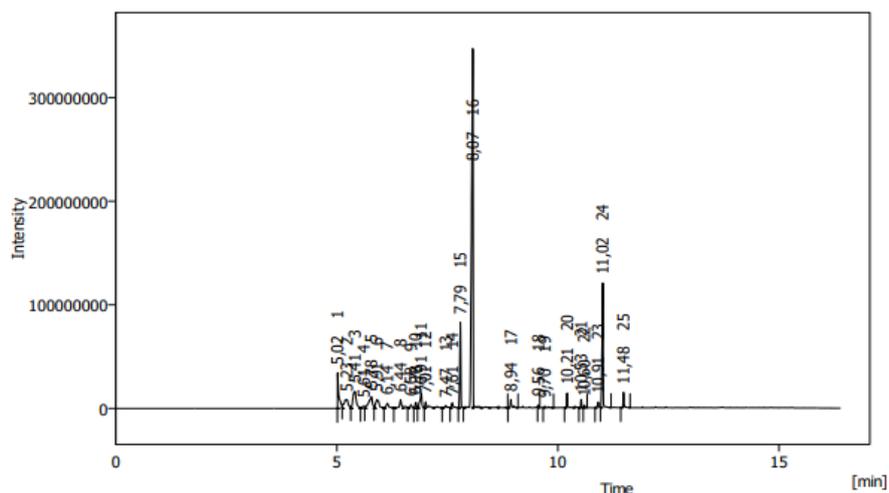


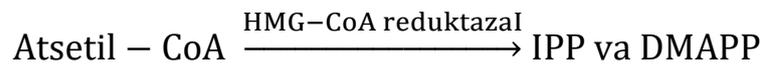
### 3-rasm. *Melissa officinalis* L. o‘simligi gidrodistillatining xromatogrammasi

GC-MS analizi natijasida *Melissa* efir moyining kimyoviy tarkibi aniqlanib, 20 ta asosiy komponentlar, jumladan, 1,4-Dioksaspiro[4,5]dekan-7-butanoik kislota, 6-metil-, 2-(metilsulfoniloksi)etil ester va efir moyining muhim qismini tashkil etuvchi 2-oktadeka-9,12-dienoksietanol kabi birikmalar mavjudligi qayd etildi. Ushbu ma’lumotlar *Melissa* efir moyining potentsial terapevtik xususiyatlari va uning tibbiyot, farmatsevtika hamda kosmetologiya sohalaridagi qo‘llanilish imkoniyatlarini chuqurroq o‘rganish uchun muhim asos yaratadi.

**Mediasia *Macrophylla* Pimen o‘simlaridan olingan efir moyi GC-MS analizi.** *Mediasia macrophylla* Pimen o‘simligidan ajratilgan efir moyining kimyoviy tarkibi YL6900 GC-MS uskunasi yordamida analiz qilindi. Tadqiqotda HP-5 kapillyar kolonka (30 m × 0,25 mm × 0,25 mkm) ishlatildi. Dastlabki harorat 60 °C da 2 daqiqa davomida ushlab turilib, keyin 10 °C/min tezlikda 280 °C ga ko‘tarildi va 5 daqiqa davomida izotermik sharoitda saqlandi. Injektor harorati 250 °C, in’ektsiya hajmi 1 µl bo‘lib, namuna geksan bilan 1:100 nisbatda suyultirildi. Tashuvchi gaz sifatida geliy qo‘llanilib, oqim tezligi 1,0 ml/min ni tashkil etdi. Analiz skanerlash diapazoni 40–500 amu bo‘lib, ionlanish manbai sifatida 70 eV energiyali elektron ta’siri usuli qo‘llanildi. Ion manbai harorati 230 °C edi. Massa spektrlari NIST va AMDIS kutubxonalari bilan taqqoslanib, sifat tarkibi alkan standartlari (C<sub>8</sub>–C<sub>20</sub>) yordamida hisoblangan ushlanish indeksleri (Kovacs) asosida tasdiqlandi. *Mediasia macrophylla* Pimen efir moyining olingan xromatogrammasi 4-rasmda keltirilgan.

*Mediasia macrophylla* Pimen efir moyi murakkab kimyoviy tarkibga ega bo‘lib, 25 ta asosiy birikma aniqlangan. Dominant komponentlari metileugenol (46,28%), trans-ligustilid (11,66%) va geranil asetat (7,45%) bo‘lib, ularning yuqori miqdori moyning biologik faolligi va aromatik xususiyatlarini belgilaydi. Tarkibidagi fenilpropanoidlar, terpenlar va fenollar moyning antibakterial, yallig‘lanishga qarshi va antioksidant xususiyatlarini ta’minlaydi, bu esa uni farmatsevtika, kosmetologiya va aromaterapiyada istiqbolli qiladi. Geranil asetat, bornilatsetat va fenchilasetat kabi birikmalarning xiral markazlarga egaligi aniqlanib, ularning optik izomerlari moyning biologik ta’siri va aromatik xususiyatlariga sezilarli ta’sir ko‘rsatishi mumkinligi ta’kidlanadi.



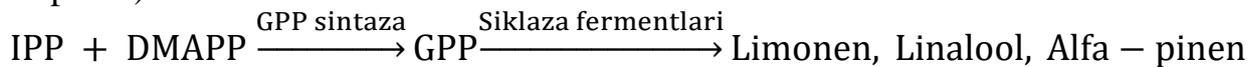


Reaksiya HMG – CoA reduktazaI fermenti ishtirokida amalga oshib, uning kinetik tenglamasi (Mixaelis-Menten tenglamasi) quyidagicha ifodalanadi:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [S]}{K_m + [S]}, \quad (2)$$

bunda  $\vartheta$  - reaksiya tezligi,  $\vartheta_{\max}$  - maksimal tezlik,  $[S]$ -substrat konsentratsiyasi,  $K_m$  – Mixaelis-Minten doimiysi.

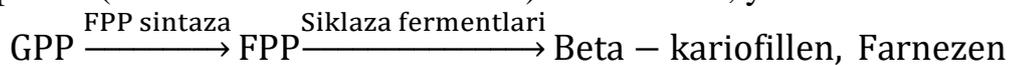
Terpenlarning hosil bo‘lishi. Linalool, limonen, va alfa-pinen kabi moddalar monoterpenlar ( $C_{10}H_{16}$ ) sinfiga kiradi. Ularning hosil bo‘lishi tezkor va odatda ilk bosqichda amalga oshadi, ya’ni IPP va DMAPP birlashib, geranil pirofosfat (GPP) hosil qiladi. O‘z navbatida geranil pirofosfatdan monoterpenlar (limonen, linalool, va alfa-pinen) sintezlanadi:



Reaksiyani amalga oshirishning birinchi bosqichida GPP sintaza fermenti, ikkinchi bosqichida esa Siklaza fermentlari katalizatorlik qiladi. Reaksiyaning birinchi bosqichining kinetik tenglama quyidagicha:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [GPP]}{K_m + [GPP]}, \quad (3)$$

Seskviterpenlar ( $C_{15}H_{24}$ ) sintezida  $\beta$ -kariofillen va farnezen kabi moddalar keyingi bosqichda sintezlanadi, chunki ular ko‘proq izopren birliklarini talab qiladi. Bunda geranil pirofosfat (GPP)dan farnezil pirofosfat (FPP) hosil bo‘ladi. FPPdan seskviterpenlar (beta-kariofillen va farnezen) sintezlanadi, ya’ni:



Reaksiya ikki bosqichda amalga oshadigan fermentativ reaksiyadir. Uning birinchi bosqich bo‘yicha kinetik tenglamasi:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [FPP]}{K_m + [FPP]}, \quad (4)$$

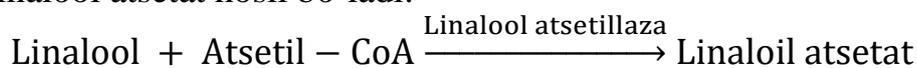
Spirtlar va aldegidlar, jumladan geraniol va sitral kabi birikmalar monoterpenlarning oksidlanish yoki qayta guruhlanishi natijasida hosil bo‘ladi. Bunda geranil pirofosfatning (GPP) oksidlanishi orqali geraniol va sitral hosil bo‘ladi.



Oksidlanish mahsulotlari geraniol va sitral bo‘lib, reaksiyaning geranil pirofosfat bo‘yicha kinetik tenglama:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [GPP]}{K_m + [GPP]}, \quad (5)$$

Efirlar, spirtlarni atsetillanishdan, jumladan linalool atsetillaza fermenti yordamida linalool atsetat hosil bo‘ladi:

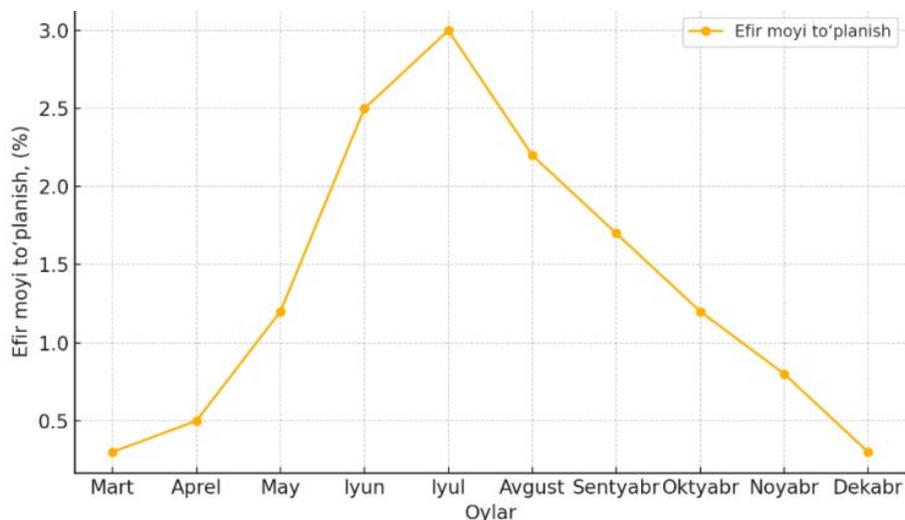


Reaksiyaning linalool bo‘yicha kinetik tenglama:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [\text{Linalool}]}{K_m + [\text{Linalool}]}, \quad (6)$$

Shunday qilib, har bir moddaning hosil bo'lishi fermentativ reaksiya bo'lib, ularning kinetikasi Mixaelis-Menten tenglamasi bilan ifodalanadi.

Melissa officinalis L. da efir moyining ulushi vegetatsiya davrida sezilarli darajada farqlanadi. Oylar bo'yicha Melissa officinalis L. tarkibida efir moyining to'planishi, % 6-rasmda keltirilgan.



### 6-rasm. Melissa officinalis L. o'simligida efir moyi oylar bo'yicha to'planishi

6-rasmda keltirilgan ma'lumotlardan ko'rinib turibdiki, bahorda, o'simlikning uyg'onishi bilan uning darajasi minimal va 0,5% dan kam bo'lib, may oyiga qadar asta-sekin 1,5% gacha ko'tariladi. Iyun oyida gullash boshlanishi bilan efir moy miqdori 1,5-3% ga yetadi va gullashning eng yuqori cho'qqisida, iyul oyida u maksimal 2-3,5% ga yetishi mumkin. Keyin avgust oyidan boshlab konsentratsiya asta-sekin 1,5-2,5% gacha, sentyabrda - 1-2% gacha, oktyabr va noyabr oylarida esa 0,5-1% gacha kamayadi. Qish mavsumida, o'simlik harakatsiz bo'lganda, efir moy darajasi minimal bo'ladi - 0,5% dan kam. Ushbu mavsumiy dinamika o'sish fazalari, atrof-muhit sharoitlari va o'simlikning ichki biokimyoviy jarayonlari o'rtasidagi yaqin aloqani aks ettiradi.

Efir moyining komponentlar bo'yicha sifat va miqdoriy tarkibi GC-MS usulida o'rganildi. Olingan natijalar asosida efir moyi tarkibidagi asosiy 9 ta komponentlar bo'yicha ularning to'planishi oylar bo'yicha o'rganildi. Bunda miqdoriy ko'rsatgich sifatida komponentlarning efir moy tarkibidagi ulushi olindi. Olingan natijalar 1-jadval keltirilgan.

1-jadval ma'lumotlariga ko'ra, Melissa officinalis L. efir moyining asosiy komponentlari sitral (geranial va neral), geraniol, linalool, linaloil asetat, beta-karyofilin, farnesen, terpineol va limonen mavsumiy dinamikaga ega. Efir moyi hidini aniqlaydigan sitral o'simlikning faol gullash davrida (iyun-iyul) maksimal konsentratsiyaga yetadi. Geraniol barqaror bo'lib, gullashdan keyin asta-sekin kamayadi. Linalool may-iyun oylarida eng yuqori darajaga chiqib, avgustdan pasayadi. Linaloil asetat faol o'sish davrida ortadi, beta-karyofilin va farnesen esa yozda ko'p sintezlanib, kuzda kamayadi. Terpineol va limonen ham yozda eng yuqori miqdorga yetib, alfa-pinen va boshqa terpenlar kabi keyinchalik pasayadi. Natijada, efir moyi

komponentlarining eng yuqori miqdori iyun-iyul oylarida kuzatilib, kuzda esa ularning konsentratsiyasi kamayadi.

### 1-jadval

#### Melissa officinalis L. efir moyi komponentlari oylar bo'yicha tarkibidagi o'zgarishlar (efir moyiga nisbatan %)

Komponent	Mart	Aprel	May	Iyun	Iyul	Avqust	Sentyabr	Oktyabr	Noyabr	Dekabr
Sitral (geranial + neral)	10	15	20	35	40	30	20	15	12	8
Geraniol	5	6	8	10	8	6	5	4	3	2
Linalool	6	7	10	8	6	7	8	7	5	4
Linaloil asetat	2	3	4	4	3	3	2	2	1	1
Beta-karyofilin	1	2	2	3	3	2	2	2	2	1
Farnezen	0,5	1	1,5	2	2	1,5	1	1	0,8	0,5
Terpineol	0,5	1	1	1	1	0,8	0,8	0,7	0,6	0,4
Limonen	1	1	1,5	2	2	1,5	1	0,8	0,6	0,5
Terpenlar (shu jumladan alfa-pinen)	0,8	1	1	1	1	1	0,8	0,7	0,5	0,3

Efir moyi komponentlarining to'planish dinamikasi ikkinchi darajali polinom modeliga mos keladi. Shu sababli, 1-jadvaldagi natijalar asosida komponentlar to'planishining matematik modellari polinom shaklida hisoblandi. Modellar komponent miqdorining oylarga bog'liqligi ko'rinishida tuzilib, bog'liqlik darajasini baholash uchun korrelyatsiya koeffitsientining kvadrat qiymati ( $r^2$ ) hisoblandi. Olingan natijalar 2-jadvalda keltirilgan.

### 2-jadval

#### Melissa officinalis L. efir moyi asosiy komponentlarining oylar bo'yicha to'planish dinamikasining matematik modellari

Komponent	$y = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$			Korrelyatsiya koeffitsiyenti ( $r^2$ )
	$a$	$b$	$c$	
Sitral (geranial + neral)	-1,20	12,53	-2,03	0,987
Geraniol	-0,20	1,69	4,12	0,942
Linalool	-0,12	1,10	5,58	0,953
Linalil asetat	-0,08	0,68	1,97	0,930
Beta-kariofillen	-0,05	0,51	2,03	0,928
Farnesen	-0,04	0,42	1,61	0,921
Terpineol	-0,04	0,34	1,25	0,915
Limonen	-0,03	0,31	1,04	0,910
Terpenlar (shu jumladan alfa-pinen)	-0,02	0,23	0,85	0,905

2-jadval ma'lumotlariga ko'ra, efir moyi tarkibidagi asosiy komponentlar bo'yicha olingan matematik modellar yuqori korrelyatsiya koeffitsientiga ega bo'lib, adekvat hisoblanadi. Ushbu modellardan komponentlarning oylar bo'yicha to'planishini bashoratlashda foydalanish mumkin. Berilgan moddalarning o'simlik organizmida hosil bo'lish ketma-ketligini aniqlash uchun ularning biosintez jarayoniga e'tibor qaratish zarur. Efir moylarini tashkil etuvchi moddalar izopren birliklaridan

hosil bo‘lib, terpenlar biosintezi asosiy mexanizm hisoblanadi. Shu sababli, efir moyi tarkibiga kiruvchi moddalarning hosil bo‘lish mexanizmini bosqichma-bosqich o‘rganish va o‘simlik organizmidagi jarayonlarni, jumladan, efir moyi sintezini chuqurroq analiz qilish muhimdir.

**Melissa Officinalis L. efir moyi ayrim komponentlarining adsorpsiyasi termodinamikasi.** Melissa Officinalis L. efir moyining uchta komponenti adsorbsiyasining termodinamik parametrlari 3-jadvalda keltirilgan.

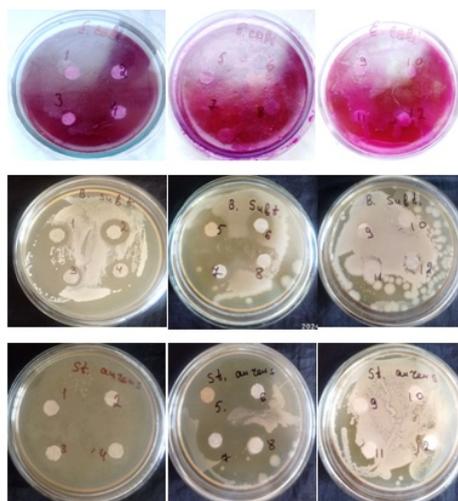
**3-jadval**

**HP-5 statsionar fazasida ba’zi efir moylari komponentlari uchun adsorbsion entalpiya ( $\Delta H$ ), entropiya ( $\Delta S$ ) va Gibbs energiyasi ( $\Delta G$ ) qiymatlari**

Komponent	$\Delta H_{298}$ , kJ/mol	$\Delta S_{298}$ , j/(K·mol)	$\Delta G_{298}$ , kJ/mol
Sitronellal	-3,64	15,66	-8,31
Geraniol	-3,60	13,78	-7,71
Neral	-3,62	16,41	-8,51

Uch komponent uchun adsorbsiya entalpiyasining manfiy qiymatlari (-3,60 dan -3,64 kJ/mol gacha) jarayonning ekzotermik xususiyatini va HP-5 statsionar fazasi bilan o‘zaro ta’sir davomida issiqlik ajralishini tasdiqlaydi. Adsorbsion entalpiya qiymatlaridagi kichik farqlar esa komponentlarning statsionar faza bilan o‘zaro ta’siridagi o‘xshashlikni ko‘rsatadi. Barcha komponentlar uchun musbat entropiya qiymatlari (13,78 dan 16,41 J/(K·mol) gacha) adsorbsiya jarayonida tizim tartibsizligining oshishini va molekulalarning yanada xaotik taqsimlanishini ifodalaydi. Yuqori entropiya qiymatlari (masalan, neral) statsionar faza bilan kuchli o‘zaro ta’sirni bildiradi. Gibbs energiya qiymatlarining manfiyligi ( $\Delta G$ ) esa 298 K haroratda adsorbsiya jarayonining o‘z-o‘zidan sodir bo‘lishini tasdiqlaydi. Eng spontan jarayon neralga tegishli ( $\Delta G = -8,51$  kJ/mol), geraniol esa eng past ( $\Delta G = -7,71$  kJ/mol) qiymatiga ega bo‘lib, nisbatan kamroq spontan jarayonni ifodalaydi. Shu sababli, ba’zi komponentlarning adsorbsiya jarayoni ekzotermik bo‘lib, tizim tartibsizligining ortishi va jarayonning o‘z-o‘zidan sodir bo‘lishi bilan xarakterlanadi.

**Efir moylarining mikrobiologik faolligini baholash.** Tadqiqot uchun 12 ta namuna olindi: 1–7-namunalar Achillea filipendula, 8-namuna Mentha spicata, 9–11-namunalar turli muddatlarda (17.05.2024, 18.06.2024, 25.07.2024) Melissa officinalis L., 12-namuna esa ferula sumbul o‘simligidan ajratilgan efir moylari. Escherichia coli, Bacillus subtilis va Staphylococcus aureus shartli patogen bakteriyalariga nisbatan antagonistik xususiyatlar disk-diffuziya usuli yordamida o‘rganildi. Olingan natijalar 7-rasmda keltirilgan.



**7-rasm. Ba'zi efir moylarining *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* va *Staphylococcus aureus* shartli patogen bakteriya shtammlariga nisbatan antibakterial xususiyati**

Tadqiqot natijalariga ko'ra: *Escherichia coli* ga nisbatan 2,3,4,6,7,8 va 11-namunalarning antibakterial faolligi aniqlandi. *Bacillus subtilis* ga nisbatan 1,2,3,4,5,6 va 7-namunalar antibakterial ta'sir ko'rsatdi. *Staphylococcus aureus* ga qarshi 1,3,4,5,6,7 va 8-namunalar antibakterial xususiyatga ega ekanligi kuzatildi. 8–12-namunalarda *Bacillus subtilis* ga, 2,9,10,11 va 12-namunalarda *Staphylococcus aureus* ga nisbatan antibakterial faollik qayd etilmadi. 9- va 10-namunalarning *Escherichia coli* va *Staphylococcus aureus* ga qarshi ta'siri aniqlanmagani, ularning ushbu bakteriyalarga nisbatan samarador emasligini ko'rsatdi. 11-namunaning *Escherichia coli* ga nisbatan antibakterial faolligi qayd etilgan bo'lsa-da, *Bacillus subtilis* va *Staphylococcus aureus* ga qarshi ta'sir ko'rsatmagani uning ta'sir spektrining cheklanganligini bildiradi.

Umuman olganda, *Melissa officinalis* dan olingan 9-, 10- va 11-namunalar antibakterial faollik bo'yicha farqli natijalar ko'rsatib, ularning ta'siri ma'lum bakteriyalarga nisbatan spetsifik ekanligini tasdiqladi. Ayniqsa, 11-namunaning *Escherichia coli* ga qarshi ta'siri kelgusida chuqur o'rganishni talab qiladi. Antibakterial xususiyatga ega efir moy namunalari oziq-ovqat xavfsizligi, tibbiy antiseptiklar, sanitar-gigienik vositalar va biotexnologik jarayonlarda amaliy qo'llash uchun tavsiya etiladi.

**Shunday qilib**, GC-MS usuli orqali *Melissa officinalis* L. o'simligining yer ustki qismidan olingan gidrodistillatning kimyoviy tarkibi analiz qilindi. Natijada, asosiy komponentlar sifatida sitral,  $\beta$ -kariofillen va germakren D aniqlandi. Ushbu moddalarning mavjudligi *Melissa officinalis* L. o'simligining potensial farmakologik xususiyatlarini ko'rsatadi. *Mediasia macrophyla* Pimen o'simligidan olingan efir moyi GC-MS usulida analiz qilindi. Analiz natijalari efir moyining asosiy komponentlari sifatida  $\alpha$ -pinen, limonen va  $\beta$ -pinenni ko'rsatdi. Bu moddalar efir moyining antibakterial va antioksidant xususiyatlariga hissa qo'shishi mumkin. GC-MS usuli orqali *Lavandula angustifolia* o'simligidan olingan efir moyining kimyoviy tarkibi o'rganildi. Natijada, asosiy komponentlar sifatida linalol, linalilatsetat va kamfor aniqlandi. Bu moddalar efir moyining tinchlantiruvchi va stressni kamaytiruvchi

ta'sirlarini tushuntirishi mumkin. *Melissa officinalis* L. o'simligida efir moyining to'planish jarayoni o'rganildi. Tadqiqot natijalariga ko'ra, efir moyining maksimal konsentratsiyasi o'simlikning gullash davrida kuzatildi. Bu ma'lumotlar efir moyini yig'ish uchun eng maqbul vaqtni belgilashda muhim ahamiyatga ega. *Melissa officinalis* L. efir moyining ayrim komponentlarining adsorbsiya jarayonining termodinamik parametrlari o'rganildi. Natijalarga ko'ra, adsorbsiya jarayoni spontan va ekzotermik xususiyatga ega bo'lib, bu komponentlarning turli yuzalarda adsorbsiyalanish qobiliyatini ko'rsatadi. Turli o'simliklardan olingan efir moylarining mikrobiologik faolligi baholandi. Natijalar efir moylarining ayrim bakteriya va zamburug' shtammlariga qarshi samarali ingibitsiya ta'siriga ega ekanligini ko'rsatdi. Bu ularning potensial antimikrob vosita sifatida qo'llanish imkoniyatini tasdiqlaydi.

## XULOSALAR

1. Ilk bora kross-diffuziya qo'llanilib, xromatografik ajralish jarayonlarining matematik modeli ishlab chiqildi, uning adekvatligi baholandi.

2. Komponentlarning qaynash temperaturalari yaqin bo'lgan holatlarda ajralish jarayoniga kross-diffuziyaning sezilarli ta'sir ko'rsatishi va ajratish sifatini oshirishga olib kelishi hamda aralashma xromatogrammasini shakllantirishga imkon berishi isbotlandi. Bu esa murakkab tarkibli aralashmalar, jumladan efir moylarini tashkil etuvchi komponentlarga ajratish va aniqlah sharoitlarini maqbullashtirishga olib keldi.

3. GC-MS usuluda *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophyla* Pimen va *Lavandula angustifolia* o'simliklaridan ajratilgan efir moylarining kimyoviy tarkibi mos ravishda 20, 25 va 34 ta komponentlardan iboratligi aniqlandi. Aniqlangan komponentlardan ba'zilarining (sital,  $\beta$ -kariofillen,  $\alpha$ -pinen, linalol va boshqalar) *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* va *Staphylococcus aureus* shartli patogen bakteriya shtammlariga nisbatan antibakterial xossalari baholandi.

4. Efir moylarining asosiy biofaol komponentlarining fermentativ jarayonlar natijasida hosil bo'lishi va ularning, jumladan, sitral, linalol va  $\alpha$ -pinen moddalarining ko'p miqdorda o'simlikning muayyan rivojlanish fazasida to'planishi parabola tenglamasiga mos kelishi ( $r^2 > 0,9$ ), ya'ni gullash davrida to'planishning maksimal darajasi kuzatilishi isbotlandi.

5. HP-5 turg'un fazadagi efir moyi tarkibidagi ayrim komponentlari sorbsiyasining termodinamik funrtsiyalari ( $\Delta H < 0$ ,  $\Delta S > 0$ ,  $\Delta G < 0$ ) kichik qiymatlarida o'zgarishi bilan borishi aniqlandi.

6. *Melissa* efir moyining ajratilishi va undan antiseptik suv tayyorlash texnologiyasi O'zbekiston-Turkiya MCHJ "Ahmad Isroil Tex" qo'shma korxonada amaliyotga joriy etildi. Natijada, bu import o'rnini qoplovchi mahalliy mahsulotlar ishlab chiqarishga, eksport salohiyatini oshirishga va mahalliy ehtiyojni qondirishga zamin yaratadi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.12.2019.K.02.05 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ  
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ САМАРКАНДСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ  
УНИВЕРСИТЕТЕ ИМЕНИ Ш. РАШИДОВА**

---

**САМАРКАНДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ ШАРОФА РАШИДОВА**

**НАЙИМОВА БАХОРА КОМИЛЖОНЗОДА**

**ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ ОБРАЗОВАНИЯ ЭФИРНЫХ МАСЕЛ У  
РАСТЕНИЯ МЕЛИССА МЕТОДОМ GX-МС**

**02.00.04 – Физическая химия**

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ  
ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD) ПО ХИМИЧЕСКИМ НАУКАМ**

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером B2024.2.PhD/K766.

Диссертация выполнена в Самаркандском государственном университете имени Ш.Рашидова.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекском, русском, английском (резюме)) размещен на веб-странице Ученого совета по адресу [www.samdu.uz](http://www.samdu.uz) и информационно-образовательном портале «ZiyoNet» ([www.ziyo.net.uz](http://www.ziyo.net.uz)).

Научный руководитель:

Мухамадиев Нурали Курбаналиевич  
доктор химических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Эшмаматова Нодири Бахрамовна  
доктор химических наук, доцент

Матчанов Алимжан Давлатбаевич  
доктор химических наук, профессор

Ведущая организация:

Институт химии растительных веществ  
им. акад. С.Ю. Юнусова АН РУ

Защита диссертации состоится «29» мая 2025 года в 13<sup>00</sup> часов на заседании Научного совета PhD.03/30.12.2019.K.02.05 при Самаркандском государственном университете имени Шарофа Рашидова. По адресу: 140104, г. Самарканд, Университетский бульвар, дом 15, Института Биохимии, Химический корпус, 220 кабинет. Тел.: (99866)239-11-40; Факс: (99866) 239-11-40. E-mail: [devonxona@samdu.uz](mailto:devonxona@samdu.uz).

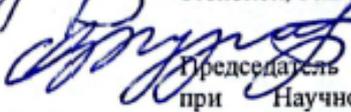
Диссертация зарегистрирована в Информационно-ресурсном центре Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова (зарегистрировано за № 44. Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский бульвар дом 15, ИРЦ (Фундаментальная библиотека СамГУ) Тел.: (99866)239-11-51.

Автореферат диссертации разослан «19» мая 2025 года.  
(реестр протокола рассылки № 3 от «19» мая 2025 г).



  
А.М.Насимов  
Председатель научного совета по  
присуждению учёных степеней,  
д.т.н., профессор

  
Ж.Р.Узоков  
Ученый секретарь научного  
совета по присуждению учёных  
степеней, PhD

  
О.Н.Рузимурадов  
Председатель научного семинара  
при Научном совете по  
присуждению учёных степеней

## **ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))**

**Актуальность и необходимость темы диссертации.** Хроматография как метод разделения, качественного и количественного анализа и исследования признана одним из величайших открытий XX века. Её значение в разделении веществ в чистом виде и анализе многокомпонентных сложных смесей является непревзойдённым. В настоящее время анализ сложных по составу синтетических и природных смесей в таких областях, как химия, нефтехимия, фармацевтика, экология и медицина, осуществляется с использованием метода ГХ-МС (газовая хроматография – масс-спектрометрия). Кроме того, производство оборудования для хроматографии стало одной из самых прибыльных отраслей. Непрерывность хроматографических процессов создала возможности для автоматизации. Вместе с тем, совершенствование метода, разработка его новых вариантов и расширение возможностей применения остаются актуальными и важными задачами.

В мире достигнуты значительные успехи в разработке теоретических основ хроматографических процессов, их моделировании и оптимизации. В результате проведённых исследований были созданы точные и эффективные модели хроматографических процессов и решены многие проблемы в области хроматографии. В частности, на научной основе изучен состав биологически активных веществ, входящих в состав эфирных масел, выделенных из растений, и дана оценка их химического состава и терапевтических свойств. Несмотря на то, что разработано множество моделей хроматографических процессов, основанных на диффузии, большинство из них не учитывают взаимное влияние компонентов смеси и неподвижной фазы. В связи с этим модель кросс-диффузии, учитывающая такие взаимодействия, представляет особый интерес для исследователей с точки зрения возможности точного моделирования.

В Республике проведён значительный объем работ по моделированию и оптимизации хроматографических процессов, разработке методов анализа сложных по составу синтетических и природных соединений, созданию диагностических критериев в медицине, а также по изучению состава эфирных масел. В стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан<sup>3</sup> определены важные задачи по «производству готовой продукции с высокой добавленной стоимостью на основе глубокой переработки местного сырья, освоению принципиально новых видов продукции и технологий, на этой основе обеспечение конкурентоспособности национальных товаров на внутреннем и внешнем рынках». Также в этой связи, в соответствии с семью приоритетами Стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы, поднятие уровня медицинского обслуживания населения на новый уровень, «Развитие химической и газохимической промышленности и повышение уровня переработки природного газа с 8% до 20% определены такие задачи<sup>4</sup>. Поэтому моделирование хроматографических процессов с использованием кросс-

---

<sup>3</sup> Указ Президента Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года № ПФ4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан»

<sup>4</sup>Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № ПФ-60 «О Новой Стратегии развития Узбекистана на 2022-2026 годы» .

диффузии, оптимизация процессов разделения, определение с его помощью условий анализа эфирных масел, изучение кинетики накопления эфирных масел в растительных организмах являются актуальными проблемами.

Указы Президента Республики Узбекистан №ПФ-4947 от 7 февраля 2017 года «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан», № ПК-3246 от 29 августа 2017 года «О мерах по совершенствованию экспортно-импортной деятельности» организаций химической промышленности», ПК-3479 от 17 января 2018 года «О мерах по обеспечению отраслей экономики страны продукцией и сырьем, пользующимися повышенным спросом» и ПК-4265 от 3 апреля 2019 года «Дальнейшее реформирование химической промышленности». «Результаты данного диссертационного исследования служат в определенной степени реализации задач, определенных в решениях от ноября 2021 года, и мерах по повышению его инвестиционной привлекательности.

**Соответствие исследований приоритетам развития науки и техники республики.** Данная диссертационная работа выполнена в соответствии с VII приоритетным направлением развития науки и технологий Республики — «Химия, химические технологии и нанотехнологии».

**Уровень изученности проблемы.** Хроматографических методов теоретические основы, а также их применение в различных целях, включая разделение веществ, анализ сложных по составу синтетических и природных соединений, и в качестве физико-химического метода исследования, стали объектом многочисленных научных работ. Существенный вклад в развитие данного направления внесли лауреаты Нобелевской премии М. С. Свет, Дж. Мартин и Р. Синг, Э. Н. С. Мур, В. Х. Штейн, Э. Клеспер, А. Х. Корвин, Т. Б. Гапона, А. В. Киселёв, Я. И. Яшин, В. А. Даванков, О. А. Шпигун, К. И. Сакодинский, В. Г. Березкин, В. Н. Липавский и другие. В результате разработаны модели, описывающие гидродинамические, сорбционные, диффузионные и иные процессы, определяющие хроматографические явления, и проведена оценка их адекватности. Достигнуты значимые результаты в применении хроматографических методов для анализа сложных по природе синтетических и природных соединений, а также при использовании хроматографии как физико-химического метода для изучения текстурных, термодинамических и других характеристик сорбентов.

В этом направлении заслуживают внимания также исследования, проведённые в нашей стране. В частности, благодаря научным работам Н. С. Закирова, Э. Орипова, Х. Ш. Хусаинова, Н. К. Мухамадиева, Е. А. Абдурахманова, Х. Шохидоятова, К. М. Муродова, И. Эргашова, Н. Мукаррамова и других учёных были разработаны методики анализа продуктов каталитического синтеза, изучены хроматографические характеристики неподвижных фаз, содержащих цианогруппы, предложены эмпирические и полуэмпирические методы моделирования и оптимизации в хроматографии, а также определены оптимальные условия разделения сложных по составу природных и синтетических смесей и разработаны диагностические критерии для выявления патологических процессов.

Тем не менее, до настоящего времени не созданы модели, учитывающие взаимное влияние компонентов системы «сорбат–сорбент», а также недостаточно изучена кинетика накопления эфирных масел в организме эфиромасличных растений. В связи с этим использование модели перекрёстной диффузии в хроматографических процессах, её применение для оптимизации условий разделения сложных смесей, в том числе компонентов эфирных масел, а также изучение кинетики накопления эфирных масел в организме растений остаются актуальными научными задачами.

**Связь диссертационного исследования с планами научных исследований вуза, в котором выполнена диссертация.** Диссертационное исследование выполнено в рамках темы «Новые методы синтеза, исследования и переработки природных и синтетических материалов», предусмотренной планом научно-исследовательских работ Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова.

**Цель исследования** - применение кросс-диффузии для моделирования хроматографических процессов и в оценке кинетики образования эфирных масел в растении мелисса с использованием метода газовой хроматографии–масс-спектрометрии (GC-MS).

**Задачи исследования:**

моделировать процессы хроматографического разделения с применением кросс-диффузии и оценить адекватность полученной модели;

определить возможность применения модели кросс-диффузии для оптимизации условий разделения компонентов сложных по составу смесей;

разработать модели кинетики образования эфирных масел в составе растения мелисса;

изучить кинетику образования эфирных масел в растении мелисса с использованием метода газовой хроматографии–масс-спектрометрии (GC-MS).

**Объектом исследования** являются процессы хроматографического разделения и эфирные масла, выделенные из растений *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophylla* Pimen и *Lavandula angustifolia*.

**Предметом исследования** являются методы моделирования влияния кросс-диффузии при разделении сложных по составу смесей, математическая модель процесса разделения в хроматографической колонке, а также химический состав эфирных масел, выделенных из растений *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophylla* Pimen и *Lavandula angustifolia*, их кинетика образования, динамика накопления компонентного состава, адсорбция составных частей эфирных масел и их термодинамические характеристики.

**Методы исследования.** В диссертационной работе использованы метод ГХ-МС, физико-химические методы, кинетический анализ, математическое моделирование и статистические методы.

**Научная новизна исследования заключается в следующем:**

при изучении процессов хроматографического разделения впервые была разработана математическая модель на основе кросс-диффузии, и доказана её адекватность посредством соответствия с экспериментальными результатами;

оценены возможности применения модели кросс-диффузии для оптимизации условий разделения компонентов сложных смесей, при этом отклонение от экспериментальных данных не превышает 2,5–3,0%;

с использованием метода ГХ-МС в эфирных маслах растений *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophyla* Pimen и *Lavandula angustifolia* было идентифицировано соответственно 20, 25 и 34 химических компонента, при этом установлено, что некоторые из них (линалол,  $\alpha$ -пинен,  $\beta$ -кариофиллен, цитраль и др.) обладают высокой степенью антибактериальной активности по отношению к условно-патогенным бактериям — что подтверждено научно;

разработаны модели кинетики образования отдельных компонентов эфирных масел в составе растения *Melissa*, и установлено, что процесс их формирования соответствует кинетике ферментативных реакций.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем:

разработана методика моделирования процессов хроматографического разделения на основе кросс-диффузии;

с применением модели кросс-диффузии оптимизированы условия разделения основных компонентов эфирных масел растения *Melissa*, а также создана программа для формирования хроматограммы;

разработана методика идентификации эфирных масел методом ГХ-МС и контроля кинетики процессов их образования;

сформированы практические рекомендации по оптимальному времени сбора растения *Melissa* на основе изучения накопления ценных компонентов эфирного масла, выделенного из его состава.

**Достоверность результатов исследования.** Достоверность результатов обеспечены применением современных методов и подходов. В рамках диссертационной работы химический состав был определен методом ГХ-МС, специфические свойства веществ изучены с использованием физико-химических методов, а реакционные процессы проанализированы с помощью кинетического анализа. Математические модели эффективно использовались для точного описания и прогнозирования процессов, а методы статистического анализа сыграли ключевую роль в подтверждении достоверности полученных данных. В совокупности эти подходы обеспечивают научную обоснованность и воспроизводимость результатов исследования.

**Научная и практическая значимость результатов исследования:**

Научная значимость результатов исследования заключается в том, что на основе подхода кросс-диффузии разработана модель процессов хроматографического разделения, оценена её адекватность, обоснованы возможности модели кросс-диффузии для оптимизации условий разделения компонентов сложных смесей, а также смоделированы процессы кинетики образования эфирных масел в растении *Melissa*. Это позволило установить закономерности их накопления и обогатить научные знания в области физико-химии хроматографических процессов.

Практическая значимость результатов исследования состоит в том, что на основе модели кросс-диффузии улучшены скорость и точность процессов хроматографического разделения; оптимизированы условия выделения

основных компонентов эфирных масел из растения *Melissa*; разработана программа формирования хроматограммы; создана методика идентификации эфирных масел и контроля их образования с помощью ГХ-МС; предложены рекомендации по оптимальному времени сбора растения *Melissa* для максимального содержания полезных компонентов эфирного масла. Кроме того, расширены возможности применения хроматографических методов для анализа сложных смесей различной природы.

#### **Внедрение результатов исследований:**

На основе полученных результатов по изучению кинетики образования эфирных масел в растении *Melissa* методом ГХ-МС:

технология извлечения эфирного масла из растения *Melissa* включена в «Перечень перспективных разработок для внедрения в практику на 2025–2026 годы» совместного предприятия ООО «Ahmad Isroil Tex» (Узбекистан–Турция) (№ 28/12-01 от «28» декабря 2024 года). В результате данная технология будет внедрена в производственную практику, что позволит наладить выпуск продукции, ориентированной на импортозамещение и экспорт, а также в определенной степени удовлетворить внутреннюю потребность в эфирном масле *Melissa*.

технология производства антисептической воды на основе эфирного масла *Melissa*, выделенного из растения, внедрена в практику на совместном предприятии ООО «Ahmad Isroil Tex» (Узбекистан–Турция) (№ 28/12-02 от «28» декабря 2024 года). В результате достигнуто производство антисептической воды, основанной на натуральных компонентах *Melissa*, что обеспечивает выпуск импортозамещающей и экспортно-ориентированной продукции и частично покрывает внутреннюю потребность страны в данном виде продукции.

**Апробация результатов исследования.** Результаты исследований были представлены и обсуждены на 13 научно-практических конференциях, в том числе 7 международных и 6 национальных.

**Публикация результатов исследования.** По теме диссертации опубликовано 7 научных работ, из которых 3 статьи размещены в республиканских, а 4 в зарубежных научных изданиях, включенных в перечень Высшей аттестационной комиссии Республики Узбекистан, рекомендованных для публикации основных научных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора философии (PhD).

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 111 страниц.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ**

Во **введении** обосновывается актуальность и необходимость исследования, формулируются цели и задачи работы, определяются объект и предмет исследования, а также подчеркивается его соответствие приоритетным направлениям развития науки и техники в республике. Описаны научная новизна и практическая значимость исследования, приведены сведения о внедрении

полученных результатов в практику, опубликованных научных работах и структуре диссертации.

**Глава I** диссертации под названием «**Исследование эфирных масел методом ГХ-МС**» посвящена обзору литературы, в котором рассматривается роль метода ГХ-МС в изучении эфирных масел, а также процессы обработки и анализа данных. Описаны методы измерения и сбора данных с помощью ГХ-МС, масс-спектральная обработка сигналов, сопоставление данных, этапы первичной обработки. Также обобщены научные сведения о ключевых этапах обнаружения сигнатур ГХ-МС, методах анализа данных, статистических подходах к распознаванию и классификации изображений, алгоритмах распознавания образов, методах прогнозирования процессов на основе вероятностных моделей, многоканальной обработке данных и программном обеспечении в хроматографии. В главе обоснована актуальность и значимость темы диссертации.

**Глава II** диссертации, «**Объекты и методы исследования**», содержит описание анализа состава эфирных масел и кинетики их накопления с использованием метода газовой хроматографии–масс-спектрометрии (ГХ-МС). Для разделения эфирных масел применялся метод гидродистилляции, а результаты анализировались методом ГХ-МС для выявления основных компонентов и их изменений в зависимости от фенологических фаз. Оптимизация процессов разделения проводилась с учетом параметров, таких как время удерживания, скорость газа, количество теоретических тарелок, селективность и эффективность разделения. Дополнительно исследованы термодинамические параметры, характеристики хроматографического удерживания, а также структурные и динамические свойства эфирных масел.

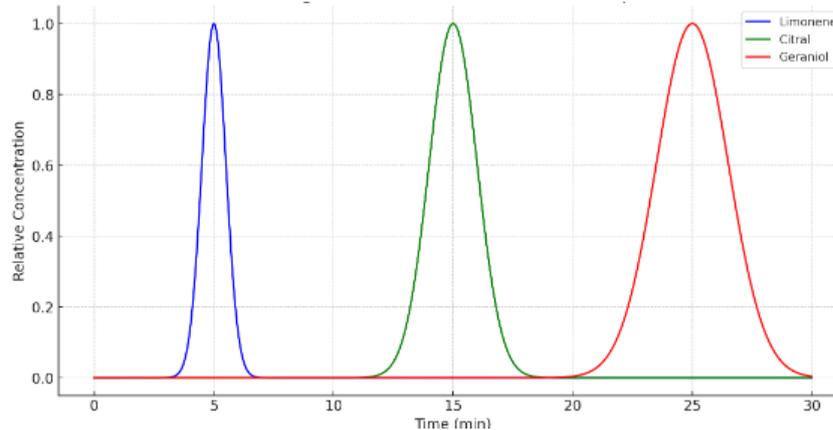
**Глава III**, «**Моделирование процесса хроматографического разделения с использованием модели кросс-диффузии**», посвящена разработке модели кросс-диффузии для моделирования процесса разделения компонентов эфирных масел с применением газовой хроматографии. В исследовании анализировались факторы, влияющие на программирование температуры, взаимодействие компонентов и эффективность разделения, включая длину колонки, скорость газа-носителя и режим изменения температуры. Результаты моделирования сопоставлялись с экспериментальными данными хроматографических исследований, определялись профили концентрации и времена удерживания основных компонентов. Подтверждено, что кросс-диффузия оказывает значительное влияние на хроматографическое разделение компонентов, а моделирование позволило оптимизировать процесс разделения.

**Модель кросс-диффузии для моделирования процесса разделения в колонне.** Для моделирования процесса разделения в колонне разработана математическая модель, основанная на уравнениях кросс-диффузии. Данная модель учитывает перекрестные диффузионные взаимодействия и описывает поведение каждого компонента смеси во времени с учетом изменения температуры.

Уравнение кросс-диффузии:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + v \frac{\partial C_i}{\partial x} = D_{ii} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \sum_{j \neq i} D_{ij} \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} - k_i(T(t)) C_i, \quad (1)$$

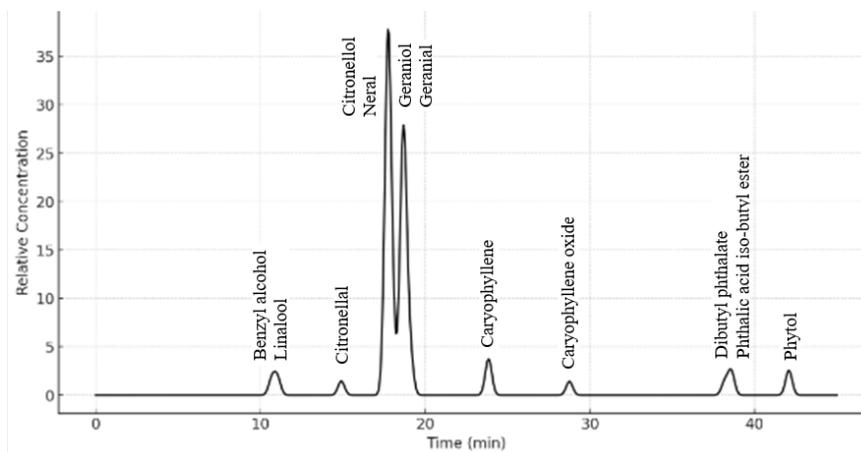
где:  $C_i(x, t)$  - концентрация компонента  $i$  в колонке в момент времени  $t$ ;  $v$  - скорость движения газа-носителя;  $D_{ii}$  - коэффициент самодиффузии компонента  $i$ ;  $D_{ij}$  - коэффициент кросс-диффузии между компонентами  $i$  и  $j$ ;  $k_i(T(t))$  - коэффициент десорбции  $i$ -го компонента, зависящий от температуры  $T(t)$ .



**Рис. 1. Хроматограмма смеси лимонена, цитраля и гераниола, полученная в результате численного моделирования**

Разработанная модель кросс-диффузии учитывает перемещение компонентов в колонке под воздействием газа-носителя и их взаимодействие через диффузионные процессы. На основе численного моделирования построены хроматограммы (рис. 1) для лимонена, цитраля и гераниола – основных компонентов эфирного масла мелиссы.

Оценка параметров хроматографического анализа показала, что снижение скорости нагрева с  $5^{\circ}\text{C}/\text{мин}$  до  $3^{\circ}\text{C}/\text{мин}$  улучшает разделение цитраля и гераниола за счёт увеличения времени удерживания и уменьшения слияния пиков. Снижение скорости потока гелия с  $1 \text{ мл}/\text{мин}$  до  $0,5 \text{ мл}/\text{мин}$  повысило качество разделения лимонена и цитраля. Разделение смеси основных компонентов эфирного масла мелиссы также было смоделировано (рис. 2).



**Рис. 2. Хроматограмма основных компонентов эфирного масла мелиссы**

Разработанная математическая модель с учетом кросс-диффузионных взаимодействий позволила точно моделировать хроматографическое разделение. Сопоставление результатов экспериментального и численного моделирования показало успешное прогнозирование времени удерживания и формы пиков. Оптимизация температуры и расхода газа-носителя обеспечила эффективное разделение соединений с близкими температурами кипения.

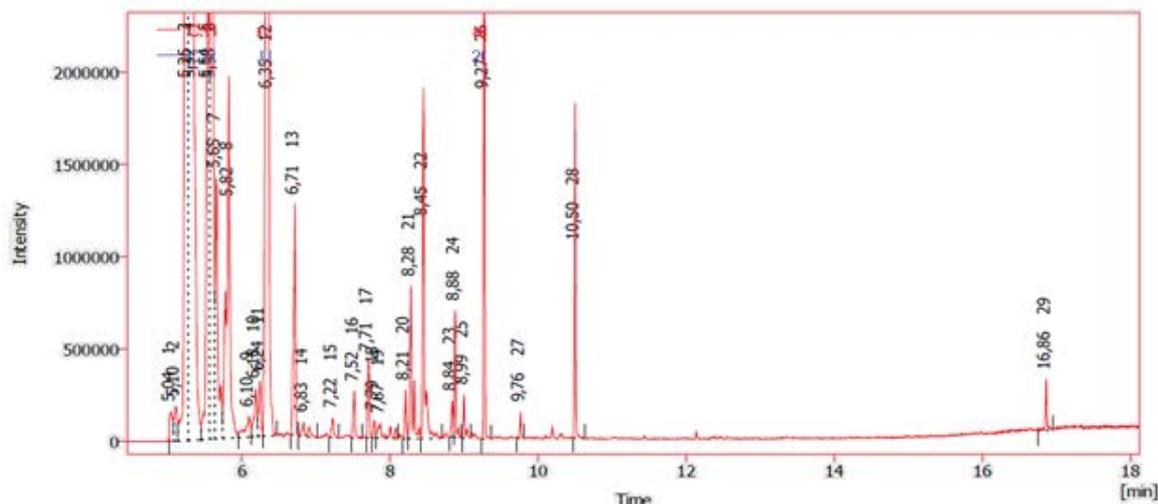
Таким образом, модель кросс-диффузии продемонстрировала высокую точность при анализе сложных многокомпонентных смесей, особенно для соединений с близкими температурами кипения. Программирование температуры (градиент 3°C/мин) увеличивало время удерживания, улучшая разделение компонентов. Модель подтвердила свою эффективность для оптимизации хроматографического анализа и контроля качества эфирных масел.

**Глава IV «Химический состав эфирных масел, кинетика образования и термодинамика их адсорбции»** посвящена ГХ-МС анализу эфирных масел *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophylla* Pimen и *Lavandula angustifolia*, их химическому составу, кинетике образования и термодинамике адсорбции. В эфирном масле *Melissa officinalis* L. выявлены цитраль, гераниол и линалоол, а также изучена динамика их накопления на разных стадиях роста. Эфирное масло *Mediasia macrophylla* Pimen содержит высокие концентрации метилэвгенола и транслигустилида, а в *Lavandula angustifolia* преобладают L-камфора и линалоол, обуславливающие его антибактериальные и противовоспалительные свойства. Результаты исследования важны для определения физико-химических свойств эфирных масел, оптимизации их разделения и оценки перспектив их применения в фармацевтике, косметологии и пищевой промышленности.

**ГХ-МС анализ химического состава гидродистиллята надземной части *Melissa officinalis* L.** ГХ-МС анализ химического состава гидродистиллята надземной части *Melissa officinalis* L. проведён после паровой дистилляции, в ходе которой летучие компоненты отделялись паром, конденсировались и собирались в виде гидродистиллята. Для анализа химического состава использовали метод ГХ-МС, а подготовку проб осуществляли экстракцией гидродистиллята гексаном, что обеспечивало оптимальные условия исследования. Хроматографический анализ выявил 20 основных компонентов, включая 1,4-диоксаспиро[4,5]декан-7-бутановую кислоту, 6-метил-, 2-(метилсульфонилокси)этиловый эфир и 2-октадека-9,12-диеноксиэтанол, составляющих значительную часть эфирного масла. Полученные данные важны для дальнейшего изучения терапевтических свойств эфирного масла Melissa и его применения в медицине, фармацевтике и косметологии (рис.3.).



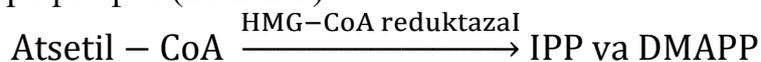
**Анализ эфирного масла *Lavandula Angustifolia* методом ГХ-МС.** Полученная хроматограмма эфирного масла, выделенного из растения *Lavandula Angustifolia*, представлена на рис. 5.



**Рис. 5. Хроматограмма эфирного масла, выделенного из *Lavandula angustifolia***

Газохроматографический анализ выявил 34 соединения с разными временами удерживания. Основные компоненты – L-камфора (48,32%) и линалоол (9,34%), определяющие антибактериальную и противовоспалительную активность масла. Терпеноиды ( $\alpha$ -терпинеол, (R)-лавандулол) обеспечивают приятный аромат, что делает масло востребованным в парфюмерии. Гумулен (1,82%) и  $\alpha$ -бисаболол (1,05%), несмотря на низкое содержание, могут усиливать биологическую активность масла за счет синергического эффекта.

**Кинетика накопления эфирного масла в *Melissa Officinalis* L.** Основные этапы образования веществ, входящих в состав эфирных масел. Образование изопреновых звеньев происходит следующим образом. Все терпены и их производные образованы из изопреновых звеньев ( $C_5H_8$ ). Эти единицы синтезируются либо через рибулозомонофосфатный, либо через мевалонатный путь. В результате образуется изопентенилпирофосфат (IPP) и диметилаллилпирофосфат (DMAPP).



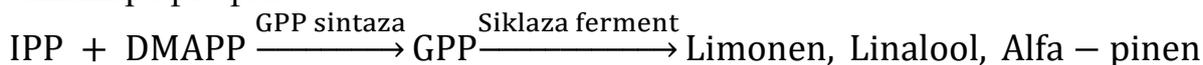
Реакция протекает с участием фермента HMG – CoA reduktazaI, и ее кинетическое уравнение (уравнение Михаэлиса-Ментен) выражается следующим образом:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [S]}{K_m + [S]}, \quad (2)$$

где  $\vartheta$  - скорость реакции,  $\vartheta_{\max}$  - максимальная скорость,  $[S]$  - концентрация субстрата,  $K_m$  - константа Михаэлиса-Минтена.

Образование терпенов. Такие вещества, как линалоол, лимонен и альфа-пинен, относятся к классу монотерпенов ( $C_{10}H_{16}$ ). Их образование происходит быстро и обычно происходит на первом этапе, то есть IPP и DMAPP объединяются, образуя геранилпирофосфат (GPP). В свою очередь,

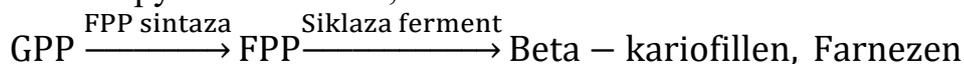
монотерпены (лимонен, линалоол и альфа-пинен) синтезируются из геранилпирофосфата:



Первая стадия реакции катализируется ферментом GPP sintaza, а вторая стадия катализируется ферментом циклазой. Кинетическое уравнение для первой стадии реакции выглядит следующим образом:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [\text{GPP}]}{K_m + [\text{GPP}]}, \quad (3)$$

При синтезе сесквитерпенов (C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>) такие вещества, как β-кариофиллен и фарнезен, синтезируются на более поздней стадии, поскольку для них требуется больше изопреновых единиц. При этом из геранилпирофосфата (GPP) получается фарнезилпирофосфат (FPP). Сесквитерпены (бета-кариофиллен и фарнезен) синтезируются из ФПП, а именно:



Реакция представляет собой ферментативную реакцию, которая происходит в два этапа. Его кинетическое уравнение для первой стадии имеет вид:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [\text{FPP}]}{K_m + [\text{FPP}]}, \quad (4)$$

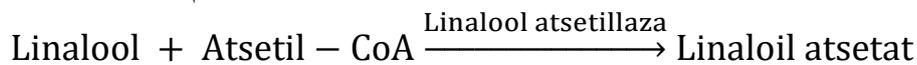
Спирты и альдегиды, включая такие соединения, как гераниол и цитраль, образуются путем окисления или перегруппировки монотерпенов. При этом в результате окисления геранилпирофосфата (GPP) образуются гераниол и цитраль.



Продуктами окисления являются гераниол и цитраль, а кинетическое уравнение реакции относительно геранилпирофосфата имеет вид:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [\text{GPP}]}{K_m + [\text{GPP}]}, \quad (5)$$

Ацетат линалоола образуется в результате ацетилирования эфиров и спиртов, в том числе ацетилазы линалоола:

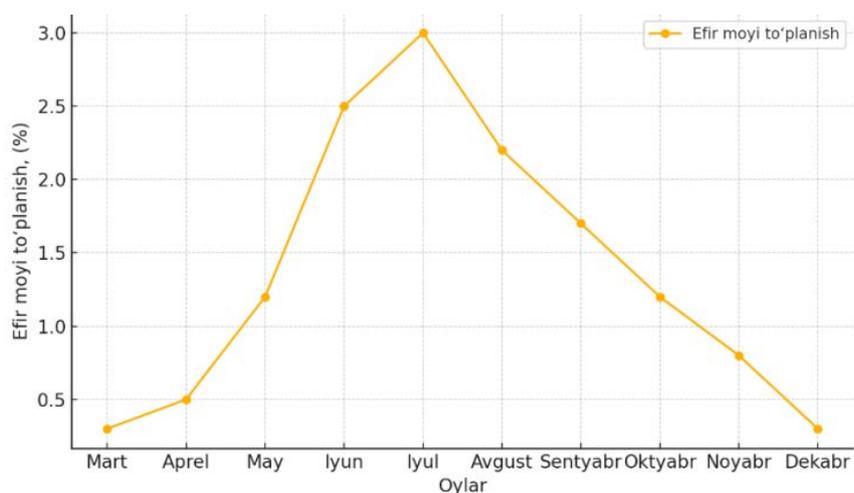


Кинетическое уравнение реакции с линалоолом имеет вид:

$$\vartheta = \frac{\vartheta_{\max} [\text{Linalool}]}{K_m + [\text{Linalool}]}, \quad (6)$$

Таким образом, накопление эфирного масла в *Melissa Officinalis* L. происходит через последовательность ферментативных реакций, регулируемых кинетикой Михаэлиса-Ментен. Основные этапы включают синтез изопреновых звеньев, образование монотерпенов и сесквитерпенов, а также превращение их в спирты, альдегиды и эфиры. Эти процессы определяют состав и свойства эфирного масла.

Процентное содержание эфирного масла в *Melissa officinalis* L. значительно варьируется в течение вегетационного периода. Динамика накопления эфирного масла в мелиссе лекарственной по месяцам (%) представлена на рис. 6.



**Рис. 6. Ежемесячная динамика накопления эфирного масла в *Melissa officinalis* L.**

Как видно из рис. 6, весной, при пробуждении растений, уровень эфирного масла минимален (<0,5%), затем к маю увеличивается до 1,5%. В период цветения (июнь) содержание масла достигает 1,5–3%, а на пике (июль) – 2–3,5%. С августа концентрация постепенно снижается: в сентябре – до 1–2%, в октябре–ноябре – до 0,5–1%, а зимой остается минимальной (<0,5%). Такая сезонная динамика отражает взаимосвязь фаз роста, условий окружающей среды и биохимических процессов. Качественный и количественный состав эфирного масла исследовали методом ГХ-МС, анализируя накопление 9 основных компонентов по месяцам.

В качестве количественного показателя использовали процентное содержание компонентов в эфирном масле. Полученные результаты представлены в таблице 1.

На основании таблицы 1 можно отметить, что основные компоненты эфирного масла *Melissa officinalis* L. (цитраль, гераниол, линалоол, линалил ацетат,  $\beta$ -кариофиллен, фарнезен, терпинеол, лимонен и другие терпены) демонстрируют характерную сезонную динамику. Цитраль, определяющий аромат масла, достигает максимума в июне-июле, в период цветения. Гераниол остается относительно стабильным, но постепенно снижается после цветения. Линалоол, пик которого наблюдается в мае-июне, начинает снижаться с августа. Линалил ацетат увеличивается в период активного роста, а  $\beta$ -кариофиллен и фарнезен, синтезируемые летом, уменьшаются осенью. Терпинеол, лимонен и  $\alpha$ -пинен также достигают максимальной концентрации летом, после чего их уровень снижается.

**Таблица 1**  
**Изменения в составе компонентов эфирного масла *Melissa officinalis* L. по месяцам (% по отношению к эфирному маслу)**

Компонент	Март	Апрель	Май	Июнь	Июль	Август	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь
Цитраль (гераниаль + нераль)	10	15	20	35	40	30	20	15	12	8

Гераниол	5	6	8	10	8	6	5	4	3	2
Линалоол	6	7	10	8	6	7	8	7	5	4
Линалоилацетат	2	3	4	4	3	3	2	2	1	1
Бета-кариофиллен	1	2	2	3	3	2	2	2	2	1
Фарнезен	0,5	1	1,5	2	2	1,5	1	1	0,8	0,5
Терпинеол	0,5	1	1	1	1	0,8	0,8	0,7	0,6	0,4
Лимонен	1	1	1,5	2	2	1,5	1	0,8	0,6	0,5
Терпены (включая альфа-пинен)	0,8	1	1	1	1	1	0,8	0,7	0,5	0,3

Таким образом, наибольшая концентрация компонентов наблюдается в июне—июле, а к осени снижается. Динамика накопления компонентов эфирного масла соответствует полиномиальной модели второго порядка. На основании данных таблицы 1 были рассчитаны математические модели накопления компонентов, выраженные в виде полиномов второго порядка, описывающих зависимость количества компонента от месяца. Оценку точности моделей проводили с использованием квадрата коэффициента корреляции ( $r^2$ ). Результаты приведены в таблице 2.

**Таблица 2**

**Математические модели динамики накопления основных компонентов эфирного масла Melissa officinalis L. по месяцам**

Компонент	$y = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$			Коэффициент корреляции ( $r^2$ )
	$a$	$b$	$c$	
Цитраль (гераниаль + нераль)	-1,20	12,53	-2,03	0,987
Гераниол	-0,20	1,69	4,12	0,942
Линалоол	-0,12	1,10	5,58	0,953
Линалоилацетат	-0,08	0,68	1,97	0,930
Бета-кариофиллен	-0,05	0,51	2,03	0,928
Фарнезен	-0,04	0,42	1,61	0,921
Терпинеол	-0,04	0,34	1,25	0,915
Лимонен	-0,03	0,31	1,04	0,910
Терпены (включая альфа-пинен)	-0,02	0,23	0,85	0,905

На основании таблицы 2 установлено, что математические модели для основных компонентов эфирных масел имеют высокий коэффициент корреляции, что подтверждает их адекватность. Эти модели можно использовать для прогнозирования ежемесячного накопления компонентов. Для определения последовательности образования веществ в растении важно учитывать процессы их биосинтеза. Компоненты эфирных масел синтезируются из изопреновых единиц и формируются в результате биосинтеза терпенов. Поэтому изучение механизма их образования в контексте биохимических процессов в растении, включая биосинтез эфирных масел, имеет ключевое значение.

**Термодинамика адсорбции некоторых компонентов эфирного масла Melissa officinalis L.** Термодинамические параметры адсорбции трех компонентов эфирного масла Melissa officinalis L. представлены в таблице 3.

**Таблица 3**

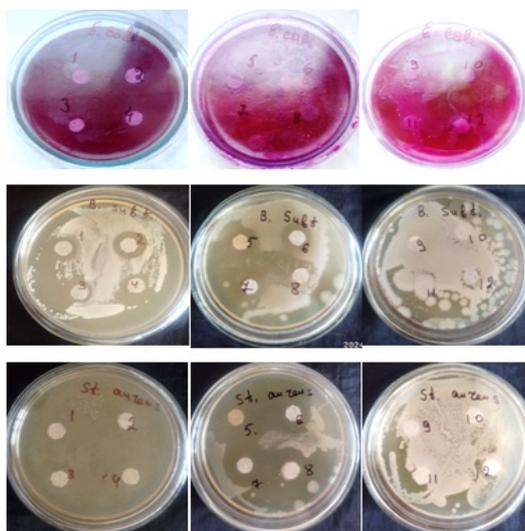
**Значения энтальпии адсорбции ( $\Delta H$ ), энтропии ( $\Delta S$ ) и энергии Гиббса ( $\Delta G$ ) для некоторых компонентов эфирных масел в неподвижной фазе HP-5**

Компонент	$\Delta H_{298}$ , кДж/моль	$\Delta S_{298}$ , Дж/(К·моль)	$\Delta G_{298}$ , кДж/моль
Цитронеллаль	-3,64	15,66	-8,31
Гераниол	-3,60	13,78	-7,71
Нерал	-3,62	16,41	-8,51

Отрицательные значения энтальпии адсорбции ( $-3,60 \dots -3,64$  кДж/моль) подтверждают экзотермический характер процесса и выделение тепла при взаимодействии компонентов с неподвижной фазой НР-5. Незначительные различия в энтальпии указывают на сходство взаимодействий. Положительные значения энтропии ( $13,78 \dots 16,41$  Дж/(К·моль)) отражают увеличение неупорядоченности системы и хаотичное распределение молекул, особенно выраженное у нерела, что свидетельствует о его сильном взаимодействии с фазой. Отрицательные значения энергии Гиббса ( $\Delta G$ ) подтверждают спонтанность адсорбции при 298 К, наиболее выраженную у нерела ( $\Delta G = -8,51$  кДж/моль), тогда как у гераниола  $\Delta G$  минимально, что указывает на менее спонтанный процесс.

Таким образом, адсорбция является экзотермической, сопровождается увеличением неупорядоченности системы и протекает спонтанно.

**Оценка микробиологической активности эфирных масел.** Исследованы антагонистические свойства 12 образцов эфирных масел различных растений в отношении *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* и *Staphylococcus aureus*. Метод диско-диффузии позволил определить зоны подавления роста бактерий, подтверждающие антибактериальную активность образцов (рис. 7). Анализ показал, что масла тысячелистника (образцы 1–7), мяты колосистой (образец 8) и Melissa лекарственной (образцы 9–11) проявили различную антимикробную активность. Наибольший эффект против *E. coli* продемонстрировали образцы 2, 3, 4, 6, 7, 8 и 11, тогда как образцы 9 и 10 не проявили активности, что свидетельствует об их низкой эффективности. Против *B. subtilis* активными оказались образцы 1, 2, 3, 4, 5, 6 и 7, что подтверждает их широкий спектр действия. Однако масла мяты колосистой и Melissa лекарственной (образцы 8–12) эффекта не оказали, вероятно, из-за особенностей их химического состава. Против *S. aureus* эффективными оказались образцы 1, 3, 4, 5, 6, 7 и 8, тогда как образцы 2, 9, 10, 11 и 12 активности не проявили. Образец 11 был активен против *E. coli*, но неэффективен против *B. subtilis* и *S. aureus*, что свидетельствует о его узкоспециализированном действии.



**Рис. 7. Антибактериальные свойства некоторых эфирных масел в отношении условно-патогенных штаммов бактерий *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* и *Staphylococcus aureus*.**

В целом образцы 9, 10 и 11 эфирного масла *Melissa officinalis* продемонстрировали различную антибактериальную активность, что подтверждает их селективное действие в отношении определенных бактерий. В частности, влияние образца 11 на *Escherichia coli* требует дальнейшего углубленного исследования. Образцы эфирных масел с выраженными антибактериальными свойствами рекомендованы для практического применения в пищевой промышленности, медицинской антисептике, производстве санитарно-гигиенических изделий и биотехнологических процессах.

Таким образом, химический состав гидродистиллята надземной части *Melissa officinalis* L. был проанализирован методом ГХ-МС, в результате чего основными компонентами идентифицированы цитраль,  $\beta$ -кариофиллен и гермакрен D, свидетельствующие о потенциальных фармакологических свойствах растения. Эфирное масло *Mediasia macrophylla* Pimen также исследовали методом ГХ-МС. Установлено, что основные компоненты масла –  $\alpha$ -пинен, лимонен и  $\beta$ -пинен, обеспечивающие антибактериальные и антиоксидантные свойства. Анализ эфирного масла *Lavandula angustifolia* выявил линалоол, линалилацетат и камфору, вероятно, определяющие успокаивающее и стрессоснижающее действие масла. Изучена динамика накопления эфирного масла в *Melissa officinalis* L., показав, что его максимальная концентрация наблюдается в период цветения, что важно для оптимального времени сбора растения. Дополнительно исследованы термодинамические параметры адсорбции компонентов эфирного масла Melissa. Установлено, что процесс адсорбции является самопроизвольным и экзотермическим, что подтверждает способность данных соединений адсорбироваться на различных поверхностях. Оценена микробиологическая активность эфирных масел различных растений. Установлено, что они оказывают эффективное ингибирующее действие на определенные штаммы

бактерий и грибков, что подтверждает их потенциальное применение в качестве природного антимикробного средства.

## ВЫВОДЫ

1. Впервые с применением кросс-диффузии разработана математическая модель процессов хроматографического разделения, и проведена оценка её адекватности.

2. Доказано, что кросс-диффузия оказывает существенное влияние на процесс разделения в случаях, когда температуры кипения компонентов близки, что способствует повышению качества разделения и формированию хроматограммы смеси. Это позволило эффективно разделять сложные смеси, включая эфирные масла, на их составные компоненты и оптимизировать условия очистки.

3. С использованием метода ГХ-МС определен химический состав эфирных масел, выделенных из растений *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophylla* Pimen и *Lavandula angustifolia*, включающий 20, 25 и 34 компонента соответственно. Оценены антибактериальные свойства некоторых из идентифицированных компонентов (цитраль,  $\beta$ -кариофиллен,  $\alpha$ -пинен, линалоол и др.) в отношении условно-патогенных штаммов бактерий *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis* и *Staphylococcus aureus*.

4. Доказано, что образование основных биологически активных компонентов эфирных масел в результате ферментативных процессов, а также их накопление в значительных количествах (включая цитраль, линалоол и  $\alpha$ -пинен) на определенной стадии развития растений подчиняется параболическому уравнению ( $r^2 > 0,9$ ), при этом максимальный уровень накопления наблюдается в период цветения.

5. Установлено, что сорбция некоторых компонентов эфирного масла ГП-5 в неподвижной фазе сопровождается изменением термодинамических функций ( $\Delta H < 0$ ,  $\Delta S > 0$ ,  $\Delta G < 0$ ) при малых значениях.

6. Технология выделения эфирного масла Melissa и производства на его основе антисептической воды внедрена в практику на узбекско-турецком совместном предприятии ООО «Ахмад Исроил Текс». В результате создана база для производства местной продукции, замещающей импорт, увеличивающей экспортный потенциал и удовлетворяющей внутренние потребности.

**SCIENTIFIC COUNCIL AWARDING SCIENTIFIC DEGREES  
PhD.03/30.12.2019.K.02.05 AT SAMARKAND STATE UNIVERSITY NAMED  
AFTER SHAROF RASHIDOV**

---

**SAMARKAND STATE UNIVERSITY NAMED AFTER SH. RASHIDOV**

**NAYIMOVA BAHORA KOMILJONZODA**

**STUDY OF THE KINETICS OF ESSENTIAL OIL FORMATION IN  
MELISSA PLANT USING THE GC-MS METHOD**

**02.00.04 – Physical chemistry**

**DISSERTATION ABSTRACT  
OF DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD) IN CHEMICAL SCIENCES**

**Samarkand – 2025**

The theme of dissertation for doctor of philosophy (PhD) has been registered in the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2024.2.PhD/K766.

The dissertation research has been carried out at the Samarkand state university named after Sh.Rashidov.

The abstract of the dissertation in three languages (uzbek, russian, english (resume)) is available online at [www.samdu.uz](http://www.samdu.uz) Scientific Council and on website of «ZiyoNet» information-education portal ([www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz)).

**Scientific supervisor:** Mukhamadiev Nurali Kurbanalievich  
Doctor of Chemical sciences, professor

**Official opponents:** Eshmamatova Nodira Baxramovna  
Doctor of Chemical sciences, professor

Matchanov Alimjan Davlatbayevich  
Doctor of Chemical sciences, professor

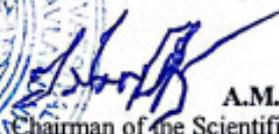
**Leading organization:** Institute of Chemistry of Plant Substances

The defense of the dissertation will take place on «29» may 2025 at «13<sup>00</sup>» o'clock at the meeting of the Scientific Council awarding scientific degrees PHD.03/30.12.2019.K.02.05 at Samarkand state university (address: 140104, Samarkand city, university Blvd., 15, Institute of Biochemistry, Building of the Chemistry department, room 220.Ph: (99866) 239-11-40, fax; (99866) 239-11-40. e-mail: [devorxona@samdu.uz](mailto:devorxona@samdu.uz)).

The dissertation has been registered at the Information resource centre of Samarkand state university № 41. (Address; 140104, Samarkand city, university Blvd., 15, IRC, Ph: (99866) 239-11-51.

The abstract of the dissertation has been distributed on «19» may 2025 y.  
Protocol at the register № 3 dated «19» may 2025 y.



  
A.M. Nasimov  
Chairman of the Scientific Council  
awarding scientific degrees, doctor  
of technical sciences, professor

  
J.R. Uzokov  
Scientific Secretary of the  
Scientific Council awarding  
scientific degrees, PhD

  
O.N. Ruzimuradov  
Chairman of the Scientific  
Seminar under Scientific Council  
awarding scientific degrees, doctor  
of chemical sciences, professor

## INTRODUCTION (abstract of (PhD) dissertation)

**The aim of the research work** is to model chromatographic processes using cross-diffusion and to evaluate the kinetics of essential oil formation in *Melissa officinalis* L. using the GC-MS method.

**The objects of the research work:** chromatographic separation processes and essential oils extracted from *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophylla* Pimen, and *Lavandula angustifolia*.

**The scientific novelty of the research work is as follows:**

For the first time, a mathematical model based on cross-diffusion was developed in the study of chromatographic separation processes, and its adequacy was proven to be consistent with experimental results;

the possibilities of using the cross-diffusion model to optimize the separation conditions of components in complex mixtures were evaluated, and it was confirmed that the deviation from the experimental results does not exceed 2.5–3.0%;

using the GC-MS method, 20, 25, and 34 chemical components were identified in the essential oils of *Melissa officinalis* L., *Mediasia macrophylla* Pimen, and *Lavandula angustifolia*, respectively, and it was scientifically proven that some of them (linalool,  $\alpha$ -pinene,  $\beta$ -caryophyllene, citral, etc.) have a high degree of antibacterial activity against conditionally pathogenic bacteria;

models of the formation kinetics of certain components of essential oils in the composition of *Melissa* were developed, and it was found that their formation corresponds to the kinetics of enzymatic reactions.

**Implementation of the research results.** Based on the results obtained from the study of the formation kinetics of essential oils in the *Melissa* plant using the GC-MS method:

The technology for extracting essential oil from *Melissa* has been included in the “List of promising developments for implementation in practice for 2025–2026” of the Uzbekistan–Turkey joint venture LLC “Ahmad Isroil Tex” (28/12-01, December 28, 2024). As a result, the essential oil extraction technology will be implemented in practice, enabling the production of goods aimed at import substitution and export, and partially meeting the demand for the product.

The technology for producing antiseptic water from the essential oil extracted from *Melissa* has been implemented in practice at the Uzbekistan–Turkey joint venture LLC “Ahmad Isroil Tex” (28/12-02, December 28, 2024). As a result, the production of antiseptic water from *Melissa* essential oil has been achieved, contributing to the production of import-substituting and export-oriented products, and helping to partially meet the domestic demand for such products.

**The structure and volume of the thesis.** The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, a list of references and appendices. The volume of the dissertation is 111 pages.

**E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I bo'lim (I часть; part I)**

1. Nayimova B.K., Mukhamadiev A.N., Mukhamadiev N.K. GC-MS analysis of the chemical composition of the hydrodistillate of the above-ground part of *Melissa Officinalis* L. // Central Asian journal of medical and natural science. - 2024. - V.5. - P. 1025-1031. <https://doi.org/10.17605/cajmns.v5i4.2654>

2. Nayimova B.K., Mukhamadiev A.N., Mukhamadiev N.K. Modeling the process of chromatographic separation of melissa essential oil components on a capillary column using a cross-diffusion model // Central Asian journal of medical and natural science. - 2024. - V.5. - P.1119-1125. <https://doi.org/10.17605/cajmns.v5i4.2669>

3. Muxamadiev A.N., Nayimova B.K., Muxamadiev N.K. “Pimpinella anisum L.”dan efir moylarini ajratish texnologik jarayonini maqbullashtirish // SamDU. Ilmiy axborotnoma: Aniq va tabiiy fanlar seriyasi.-2016. –P.131-134. (02.00.00, № 09)

4. Nayimova B.K., Muhamadiyev A.N., Muhamadiyev N.Q. Tajribalarni ko'pomilli rejalashtirish usulida Pimpinella anisum L.dan efir moyini ajratish sharoitini maqbullash // SamDU. Ilmiy axborotnoma: Aniq va tabiiy fanlar seriyasi. - 2017. –P.76-79. (02.00.00, № 09)

5. Mukhamadiyev A.N., Khalilov K.F., Nayimova B.K., Muhamadiyev N.Q. GC-MS Investigation of Composition of Essential Oils, Extracted from *Mentha Piperita* and *Pelargonium Roseum* // SSRG International Journal of Applied Chemistry (SSRG-IJAC)–2019. – V. 6. – №. 2. – P. 31-34. <https://doi.org/10.14445/23939133/IJAC-V6I2P105>

6. Karabaev H.E., Mamatova Sh.R., Muhamadiev N.K., Nayimova B.K. Determination of microorganisms markers by the method GC-MS and efficacy evaluation of rhinosinusitis // Central Asian Journal of medical and natural Science. - 2022.-V.3.-№.4.-P.384-393.

<https://doi.org/10.17605/cajmns.v3i4.729>.

7. Найимова Б.К., Мухамадиев А.Н., Мухамадиев Н.К. Кинетика накопления компонентов эфирного масла Мелисса // SamDU. Ilmiy axborotnoma: Aniq va tabiiy fanlar seriyasi.-2024. – V.5. – P.158-162. (02.00.00, № 09)

**II bo'lim (II часть, part II)**

1. Nayimova B.K., Mukhamadiev A.N., Mukhamadiev N.K. GC-MS analysis of chemical composition melissa officinalis essential oil // XXII Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry, October 7-12, 2024, Federal Territory “Sirius”, Russia. - V. 7.- P.165. <https://mendeleevcongress.ru/en/home/>

2. Найимова Б.К., Мухамадиев А.Н., Мухамадиев Н.К. ГХ-МС анализ химического состава эфирного масла *Melissa Officinalis* // XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 7-12 октября, 2024, Федеральная территория «Сириус», Россия. - Т. 7.- С.165. <https://mendeleevcongress.ru/>

3. Muxamadiev A.N., Nayimova B.K., Muxamadiev N.K., Saidov A.Sh. *Pimpinella anisum L.* ўсимлигидан олинган эфир мойи сифатини унинг кимёвий таркибига кўра баҳолаш // Материалы республиканской научно-технической конференции “Горно-металлургический комплекс: достижения, проблемы и перспективы инновационного разветия”. -2016. – P.354.

4. Мухамадиев А. Н., Найимова Б. К. Оптимизация технологического процесса выделения эфирного масла из *Pimpinella anisum L.* с микроволновым нагревом // Материалы 54-й Международной научной студенческой конференции МНСК-2016: Химия. – 2016. – С. 50. <https://elibrary.ru/item.asp?id=28169443>

5. Мухамадиев А.Н., Мухамадиев Н.Қ., Халилов Қ.Ф., Найимова Б.К. Турли қиздириш усулларида “*Pimpinella Anisum L.*” дан ажратиб олинган эфир мойларининг таркибини солиштирма ўрганиш // “Кимё фанининг долзарб муаммолари ва уни ўқитишда инновацион технологиялар” Республика илмий-амалий анжумани материаллари (чет эл олимлари иштирокида).- 2016. –P.51.

6. Nayimova B.K., Muhammadiyev A.N., Muhammadiyev N.Q., Fazliyeva N.T. *Arpabodiyon o‘simligidan efir moylarini ultratovush yordamida ajratish* // Термиз давлат университети академик А.Ф. Фаниевнинг 85 йиллигига бағишланган -аналитик кимё фанининг долзарб муаммолари V республика илмий-амалий анжумани. -2017. -P.212-213.

7. Muhammadiyev N.Q., Muhammadiyev A.N., Nayimova B.K, Fazliyeva N.T., Saidov A.Sh. *Pimpinella anisum L. o‘simligi efir moyining fizik-kimyoviy xarakteristikalarini va GX-MS usullaridagi analizi* // Навоийский государственный горный институт достижения, проблемы и современные тенденции развития горно-металлургического комплекса. -2017. –P.395.

8. Nayimova B.K., Fazliyeva N.T., Muhammadiyev A.N., Muhammadiyev N.Q. *Melissa officinalis o‘simlikidan ajratilgan efir moyining tarkibini GC-MS analizi* // Товарлар кимёси ҳамда халқ табобати муаммолари ва истиқболлари. -2023. – P.237-239.

9. Найимова Б.К., Фазлиева Н.Т., Эргашова Ш.И., Мухамадиев А.Н., Мухамадиев Н.К. Газо-хромато-масс-спектрометрический анализ метанольного экстракта *Ферула сумбула* // Proceedings of the IV-international conference on integrated innovative development of Zarafshan region: Achievements, challenges and prospects dedicated to the 65th Anniversary of Navoi Mining and Metallurgical Company. -2023. –P.305-306.

10. Найимова Б.К., Мухамадиев А.Н., Мухамадиев Н.К. Кинетика накопления эфирного масла в растениях *Милиссы* // Proceedings of the IV-international conference on integrated innovative development of Zarafshan region: Achievements, challenges and prospects dedicated to the 65th Anniversary of Navoi Mining and Metallurgical Company. -2023. – P. 337-338.

11. Nayimova B.K., Muxmadiyev A.N., Muhhamadiyev N.Q. *Melissa o‘simlik gidrodistillatining kimyoviy tarkibini o‘rganish* // Zahiriddin Muhammad Bobur nomidagi Andijon davlat universiteti “Tovarlar kimyosi hamda xalq tabobati muammolari va istiqbollari” mavzusidagi XI Xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya (Andijon, 2024, 11-12 sentabr) .-P.126-128.

12. Найимова Б.К., Мухамадиев А.Н., Мухамадиев Н.К. Кинетика накопления компонентов эфирного масла мелиссы // XIX Нумановские чтения «Развитие фундаментальной и прикладной химии и её вклад в индустриализацию страны» (Душанбе, 16 октября 2024). - Душанбе, 2024. - С.266-269.

13. Найимова Б.К., Мухамадиев А.Н., Мухамадиев Н.К. Термодинамика адсорбции некоторых компонентов эфирного масела мелисса // «Bioorganik kimyo fani muammolari» XI Respublika yosh kimyogarlari ilmiy-amaliy konferensiya materiallari to'plami. Namangan, 2024, 2-qism. – 2024. –P.129-131.

Avtoreferat Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetining  
“Ilmiy axborotnoma” jurnali tahririyatida tahrirdan o‘tkazilidi (27.02.2025-yil).

Bosmaxona tasdiqnomasi:



4268

2025-yil 13-mayda bosishga ruxsat etildi:  
Ofset bosma qog‘ozi. Qog‘oz bichimi 60x84<sub>1/16</sub>.  
“Times new roman” garniturasini. Ofset bosma usuli.  
Hisob-nashriyot t.: 4,1. Shartli b.t. 4,2.  
Adadi 100 nusxa. Buyurtma №13/05.

---

SamDCHTI tahrir-nashriyot bo‘limida chop etildi.  
Manzil: 140104, Samarqand sh., Bo‘stonsaroy ko‘chasi, 93.