DOI https://doi.org/10.32689/maup.it.2026.2.10
УДК 524.85;546.11;546.212

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ОСНОВИ ФУНКЦІОНАЛЬНОСТІ $LINBO_3$ У ФОТОННИХ КРИПТОСИСТЕМАХ ЯК ЗАСІБ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ КІБЕРБЕЗПЕКИ

Л. О. Соляник, В. І. Коваль

QUANTUM-CHEMICAL FOUNDATIONS OF $LINBO_3$ FUNCTIONALITY IN PHOTONIC CRYPTOSYSTEMS AS A MEANS OF ENSURING CYBERSECURITY

Ludmila Solianyk, Viktor Koval

Анотація

Літій-ніобат ($LiNbO_3$) є одним із найперспективніших матеріалів для квантової криптографії завдяки поєднанню сегнетоелектричних і нелінійно-оптичних властивостей, що робить його ключовим елементом сучасної квантової фотоніки. У цій роботі представлено результати квантово-хімічного моделювання кластера $LiNbO_3$ з аналізом електронної структури, ефективних зарядів, порядків зв'язків і валентностей. Аналіз зарядів на атомних орбіталях та електронної густини показали змішаний іонно-ковалентний характер взаємодій Nb–O (заряди: Nb ≈ +1.8e, O ≈ –0.7…–0.9e), іонність Li–O (≈0.36 порядку зв'язку) та значну асиметрію електронної густини, що зумовлює сегнетоелектричну поляризацію. Обчислені енергії HOMO (–3.99 eV) та LUMO (+0.54 eV) визначили розрив ~3.53 eV, що узгоджується з експериментальними оптичними даними й пояснює високу прозорість матеріалу у видимому та ближньому ІЧ-діапазонах. Аналіз порядків зв'язків підтвердив домінування Nb–O взаємодій (1.3–1.8), які формують основу нелінійної поляризовності та забезпечують значення нелінійного оптичного коефіцієнта другої гармоніки χ^2, який описує здатність матеріалу до нелінійної поляризації. Цей коефіцієнт визначає ефективність матеріалу у процесах подвоєння частоти світла, спонтанної параметричної даун-конверсії та у фазових модуляторах для квантової криптографії, підкреслюючи тісний зв'язок між електронною структурою та практичними фотонними застосуваннями. Отримані результати свідчать, що $LiNbO_3$ є ефективною платформою для генерації пар ентангльованих фотонів методом спонтанного параметричного даунконверсії, для фазових модуляторів у протоколах BB84 та BBM92, а також для інтегральних квантових схем. Поєднання квантово-хімічного опису та фотонних властивостей демонструє перспективність $LiNbO_3$ як базового матеріалу для розвитку технологій безпечного квантового зв'язку.

Окрім квантових комунікацій, властивості $LiNbO_3$ мають прикладне значення і для криміналістики. Разом з цим дані властивості вплинуть на розвиток кібербезпеки, захист інформації та боротьбу із кіберзлочинністю, а також на виявлення прихованих слідів вчинення злочинів. Завдяки прозорості у широкому спектральному діапазоні та високій нелінійній оптичній активності, цей матеріал використовується у приладах лазерної спектроскопії для виявлення мікрослідів біологічного походження (крові, слини, потожирових виділень) навіть у випадках, коли вони невидимі для ока. $LiNbO_3$-генератори ультрафіолетового випромінювання застосовуються для аналізу документів і виявлення підробок шляхом дослідження люмінесценції чорнил та паперу. Крім того, фотонні модулі на основі цього матеріалу можуть слугувати у системах квантової автентифікації носіїв інформації, що відкриває новий рівень захисту доказів від фальсифікації. Таким чином, $LiNbO_3$ поєднує наукові досягнення квантової фотоніки з практичними завданнями судової криміналістики.

Ключові слова: *Літій-ніобат, Квантова криптографія, Кібербезпека, Боротьба із злочиннністю, Нелінійна оптика, Фотони з квантовою заплутаністю, автентифікація документів.*

Abstract

Lithium niobate ($LiNbO_3$) is one of the most promising materials for quantum cryptography due to the combination of ferroelectric and nonlinear optical properties, which makes it a key element of modern quantum photonics. This paper presents the results of quantum chemical modeling of the $LiNbO_3$ cluster with analysis of the electronic structure, effective charges, bond orders and valences. Analysis of charges on atomic orbitals and electron density showed the mixed ionic-covalent nature of Nb–O interactions (charges: Nb ≈ +1.8e, O ≈ –0.7…–0.9e), ionicity of Li–O (≈0.36 bond order) and significant asymmetry of the electron density, which causes ferroelectric polarization. The calculated HOMO (–3.99 eV) and LUMO (+0.54 eV) energies determined a gap of ~3.53 eV, which is consistent with experimental optical data and explains the high transparency of the material in the visible and near-IR ranges. Bond order analysis confirmed the dominance of Nb–O interactions (1.3–1.8), which form the basis of nonlinear polarizability and provide the value of the nonlinear optical coefficient of the second harmonic χ^2, which describes the ability of the material to nonlinear polarization. This coefficient determines the effectiveness of the material in the processes of light frequency doubling, spontaneous parametric down-conversion and in phase modulators for quantum cryptography, emphasizing the close connection between the electronic structure and practical photonic applications. The results obtained indicate that $LiNbO_3$ is an effective platform for the generation of entangled photon pairs by the method of spontaneous parametric downconversion, for phase modulators in the BB84 and BBM92 protocols, as well as for integrated quantum circuits. The combination of quantum-chemical description and photonic properties demonstrates the prospects of $LiNbO_3$ as a basic material for the development of secure quantum communication technologies. In addition to quantum communications, the properties of $LiNbO_3$ have applied significance for forensics. At the same time, these properties will affect

© Соляник Л. О., Коваль В. І., 2026
Стаття поширюється на умовах ліцензії відкритого доступу CC BY 4.0

the development of cybersecurity, information protection and the fight against cybercrime, as well as the detection of hidden traces of crimes. Due to its transparency in a wide spectral range and high nonlinear optical activity, this material is used in laser spectroscopy devices to detect microtraces of biological origin (blood, saliva, sweat) even in cases where they are invisible to the eye. $LiNbO_3$ ultraviolet radiation generators are used for document analysis and forgery detection by studying the luminescence of ink and paper. In addition, photonic modules based on this material can be used in quantum authentication systems for information carriers, which opens up a new level of evidence protection against falsification. Thus, $LiNbO_3$ combines the scientific achievements of quantum photonics with the practical tasks of forensic science.

Key words: *Lithium niobate, Quantum cryptography, Cybersecurity, Crime prevention, Nonlinear optics, Quantum entangled photons, document authentication.*

1. Вступ. Стрімкий розвиток цифрових технологій, телекомунікаційних систем та інформаційних мереж зумовлює постійне підвищення вимог до захисту інформації. Особливої актуальності ця проблема набула у зв'язку з розвитком квантових обчислень, оскільки створення достатньо потужних квантових комп'ютерів потенційно може поставити під загрозу безпеку сучасних криптографічних систем. Зокрема, квантовий алгоритм Шора створює принципову загрозу криптографічним методам, безпека яких ґрунтується на складності факторизації великих чисел і задач дискретного логарифмування [1]. Це зумовлює пошук нових підходів до захисту інформації, серед яких важливе місце посідають квантові технології зв'язку та квантовий розподіл ключів.

Квантовий розподіл ключів ґрунтується на передаванні квантових станів світла та дає змогу виявляти втручання стороннього спостерігача за зміною параметрів квантового сигналу. Проте практична реалізація таких систем потребує не лише розвитку протоколів захисту інформації, а й створення відповідної матеріальної та фотонної бази. Серед основних проблем сучасних квантових комунікацій залишаються втрати оптичного сигналу, необхідність підвищення швидкості формування ключів, стабільності систем, інтеграції джерел і детекторів фотонів, а також зменшення габаритів окремих оптичних компонентів. Тому особливий інтерес становлять матеріали, які одночасно забезпечують ефективну генерацію, модуляцію та перетворення оптичних сигналів і можуть бути використані для створення інтегрованих фотонних схем.

Одним із таких матеріалів є літій-ніобат $LiNbO_3$. Його перспективність визначається поєднанням високих електрооптичних і нелінійно-оптичних властивостей, широкого діапазону оптичної прозорості, сегнетоелектричних характеристик та значного електрооптичного ефекту. Завдяки цьому літій-ніобат широко використовується для створення оптичних модуляторів, хвилеводів, резонаторів, перетворювачів частоти та інших фотонних компонентів.

Особливо інтенсивно в останні роки розвивається технологія тонких плівок літій-ніобату на ізолювальній підкладці. Zhu та співавтори [2] показали, що така платформа відкриває широкі можливості для створення компактних інтегрованих фотонних компонентів із високими характеристиками. Авторами систематизовано результати досліджень хвилеводів, модуляторів, резонаторів та нелінійних оптичних перетворювачів на основі тонкоплівкового літій-ніобату. Перевагою такого підходу є можливість поєднання декількох функціональних елементів на одному чипі. Водночас у зазначеній роботі основну увагу приділено конструкції та характеристикам фотонних пристроїв, тоді як фундаментальні закономірності формування електронної структури матеріалу розглянуто недостатньо.

Перспективність літій-ніобату саме для квантової фотоніки проаналізована Saravi та співавторами [3]. Автори розглянули можливості використання тонкоплівкового літій-ніобату для створення інтегрованих квантових фотонних схем, джерел одиночних фотонів та інших компонентів квантових систем. Показано, що поєднання високої нелінійності, електрооптичної активності та можливості мініатюризації робить цей матеріал одним із перспективних кандидатів для масштабованої квантової фотоніки. Разом із тим увага авторів зосереджена переважно на функціональних можливостях фотонних компонентів, а питання взаємозв'язку між їх характеристиками та локальною електронною будовою $LiNbO_3$ залишаються відкритими.

Важливим напрямом є також безпосереднє квантово-хімічне дослідження властивостей літій-ніобату. Hossain [4] за допомогою розрахунків у межах теорії функціонала густини дослідив структурні, механічні, електронні та оптичні властивості $LiNbO_3$. Автором встановлено параметри кристалічної структури, проаналізовано електронну зонну структуру та густину електронних станів, а також розраховано низку оптичних характеристик. Згідно з результатами розрахунків, $LiNbO_3$ має напівпровідниковий характер, а ширина забороненої зони становить близько 3,54 еВ [4]. Ця робота є важливою основою для розуміння електронних властивостей матеріалу, однак у ній основна увага приділена зонній структурі та макроскопічним оптичним характеристикам. Детальний аналіз локального розподілу заряду між атомами, порядків окремих хімічних зв'язків та валентних характеристик компонентів кристала не проводився.

Сучасні дослідження також свідчать про безпосереднє розширення сфери застосування літій-ніобату у квантових фотонних системах. Harper та співавтори [5] продемонстрували високоефективне формування пар фотонів у нанофотонному хвилеводі на основі тонкоплівкового літій-ніобату. Отримані результати підтверджують можливість використання цього матеріалу для створення інтегрованих джерел квантового світла, що є важливою складовою майбутніх систем квантового зв'язку. Разом із тим розвиток таких пристроїв потребує поглибленого розуміння фундаментальних властивостей матеріалу, оскільки ефективність нелінійних і електрооптичних процесів визначається особливостями його електронної будови.

Таким чином, аналіз п'яти основних напрямів сучасних досліджень показує, що на сьогодні достатньо детально вивчено технологічні можливості використання літій-ніобату у фотоніці, створення тонкоплівкових структур, інтегрованих квантових схем та джерел квантового світла [2, 3, 5]. Окремо досліджено його електронну та оптичну структуру методами квантово-хімічного моделювання [4]. Проте між цими двома напрямами залишається недостатньо досліджений зв'язок: відсутній комплексний аналіз того, як локальний розподіл електронної густини, ефективні заряди атомів, характер хімічних зв'язків і валентні характеристики компонентів $LiNbO_3$ пов'язані з його енергетичною структурою та функціональними властивостями.

Саме ця проблема визначає актуальність проведеного дослідження. Встановлення закономірностей розподілу електронної густини та характеру хімічних зв'язків у $LiNbO_3$ дасть змогу доповнити наявні дані про його зонну та оптичну структуру мікроскопічними характеристиками. Такий підхід дозволяє глибше зрозуміти природу електрооптичної та нелінійно-оптичної активності матеріалу і створює передумови для більш обґрунтованого проектування фотонних компонентів квантових систем.

Перспективність цього напряму має значення також для захищених інформаційних систем та криміналістичних технологій. Фотонні компоненти на основі $LiNbO_3$ можуть використовуватися як елементи систем квантового зв'язку, а також у сенсорних і спектроскопічних пристроях для виявлення мікрокількостей речовин та аналізу матеріалів. У системах криміналістичного забезпечення такі технології потенційно можуть бути використані для захищеного передавання цифрової доказової інформації між експертними підрозділами та для підвищення чутливості оптичного аналізу речових доказів.

Метою роботи є встановлення особливостей електронної будови $LiNbO_3$ та визначення взаємозв'язку між розподілом електронної густини, зарядовими характеристиками атомів, характером хімічних зв'язків, валентними станами та енергетичними характеристиками електронних станів, що визначають перспективність використання літій-ніобату у фотонних системах квантового зв'язку та сенсорних технологіях.

Для досягнення поставленої мети досліджено розподіл зарядів на атомах, порядки хімічних зв'язків, валентні характеристики компонентів кристала, а також енергетичні рівні найвищої зайнятої та найнижчої вільної молекулярних орбіталей. Отримані результати використано для встановлення особливостей формування електронної структури $LiNbO_3$ та оцінювання її зв'язку з функціональними властивостями матеріалу.

2. Матеріали та методи. Квантово-хімічне дослідження електронної будови $LiNbO_3$ проводили з використанням програмного пакета GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) [6]. Розрахунки спрямовувалися на визначення електронних характеристик модельної системи $LiNbO_3$ та встановлення особливостей розподілу електронної густини між атомами літію, ніобію та оксигену.

Для розрахунку електронної структури використовували метод Хартрі–Фока. Додатково проводили розрахунки в межах теорії функціонала густини для оцінювання впливу електронної кореляції на отримані результати. Такий підхід давав можливість зіставити результати, отримані різними методами, та оцінити їхню узгодженість.

Для опису електронних станів атомів Li, Nb та O використовували базисний набір Stevens–Basch–Krauss з ефективними потенціалами. Використання ефективних потенціалів дозволяє спростити розрахунок за рахунок заміни явного опису внутрішніх електронних оболонок ефективним потенціалом і зосередити розрахунок на електронах, які визначають хімічну взаємодію.

На початковому етапі задавали геометрію модельної системи $LiNbO_3$. Далі проводили оптимізацію геометричних параметрів до досягнення енергетично стабільного стану. Критерієм завершення оптимізації був максимальний градієнт енергії не більше 10^{-5} атомних одиниць.

Після оптимізації геометрії проводили розрахунок електронної структури та визначали основні електронні характеристики системи. Аналізували розподіл електронної густини, ефективні заряди атомів, характеристики хімічних зв'язків, а також енергетичні параметри граничних електронних станів. Отримані результати використовували для встановлення особливостей електронної взаємодії між компонентами $LiNbO_3$.

Для характеристики енергетичної структури визначали енергії найвищої зайнятої та найнижчої незайнятої молекулярних орбіталей. Енергетичний інтервал між ними розглядали як характеристику

ISSN 2786-5460 (Print), ISSN 2786-5479 (Online)

електронної структури досліджуваної модельної системи. Отримане значення порівнювали з опублікованими в літературі теоретичними та експериментальними даними. При цьому враховували, що величина розриву між граничними молекулярними орбіталями модельної системи не є безпосереднім аналогом ширини забороненої зони макроскопічного матеріалу.

Припущення та обмеження методу. Основним припущенням дослідження є розгляд $LiNbO_3$ у вигляді обраної модельної системи, яка дає змогу дослідити локальні електронні характеристики та характер взаємодії між її компонентами. Такий підхід не претендує на повне відтворення всіх властивостей реального матеріалу, оскільки модель не враховує всіх структурних та колективних ефектів, характерних для макроскопічної системи.

Додатковим обмеженням є використання методу Хартрі–Фока, у якому електронна кореляція враховується не повністю. Саме тому результати HF-розрахунків доповнювали розрахунками в межах теорії функціонала густини. Крім того, ефективні потенціали та скінченний базисний набір можуть впливати на абсолютні значення розрахованих електронних характеристик. Тому основний акцент робили не лише на абсолютних значеннях параметрів, а й на встановленні їхніх взаємозв'язків та фізичних закономірностей.

Алгоритм дослідження: Формування моделі $LiNbO_3$ → Вибір методу квантово-хімічного розрахунку → Оптимізація геометрії → Розрахунок електронної структури → Аналіз електронної густини та атомних зарядів → Аналіз хімічних зв'язків і валентних характеристик → Визначення енергетичних характеристик (HOMO/LUMO) → Встановлення взаємозв'язку «електронна будова → функціональні властивості» → Порівняння з теоретичними та експериментальними даними → Практична орієнтація результатів: квантова фотоніка, квантовий зв'язок, сенсорні та спектроскопічні системи, криміналістичні технології.

Таким чином, запропонований розрахунковий підхід дозволяє послідовно перейти від оптимізації модельної системи до визначення її електронної структури, аналізу розподілу заряду та характеристик хімічних зв'язків, а також оцінювання енергетичних параметрів електронних станів.

3. Результати та їх обговорення. Аналіз зарядів показав відхилення ефективних зарядів атомів $LiNbO_3$ від формальних ступенів окиснення (табл. 1). Для ніобію отримано заряд +1.81e, що є суттєво нижчим від номінального +5. Це свідчить про значний внесок ковалентної взаємодії в утворення зв'язків Nb–O. Кисневі аніони характеризуються зарядами від –0.66 до –0.87e, що також відрізняється від формального –2, вказуючи на часткову делокалізацію електронної густини. Літій має заряд +0.58e, що близьке до очікуваного +1, однак свідчить про неповне відокремлення електронної густини. Такий розподіл зарядів підтверджує змішаний іонно-ковалентний характер кристала, який зумовлює його сегнетоелектричні властивості.

Таблиця 1

Ефективні заряди атомів у $LiNbO_3$ (за Ловдіним)

Атом	Формальний заряд	Ефективний заряд
Nb	+5	+1.81
O (середнє)	-2	-0.75
Li	+1	+0.58

Розрахунок порядків зв'язків показав, що найбільш стабільними є взаємодії Nb–O. Для зв'язку Nb–O на відстані 1.75 Å порядок становить 1.84, тоді як для зв'язків на відстанях 1.81 Å значення становить 1.29 (табл. 2). Це свідчить про різну міру ковалентності всередині октаедричного оточення ніобію. Такі варіації є типовими для сегнетоелектриків і прямо пов'язані з поляризацією ґратки.

Зв'язки Li–O (1.93 Å, порядок 0.36) є слабкими і мають здебільшого іонну природу, що забезпечує стабільність кристалічної структури та широкий спектральний діапазон прозорості. Слабка взаємодія між кисневими аніонами (O–O, порядок 0.1) відображає лише незначну перекривність p-орбіталей, що не відіграє суттєвої ролі у формуванні електронних властивостей.

Аналіз валентних характеристик підтвердив, що ніобій у $LiNbO_3$ має валентність ~4.42, тобто меншу за формальну п'яту, тоді як кисень наближається до значення 2.0, а літій – до 0.73. Це ще раз підтверджує домішковий ковалентний внесок у зв'язках Nb–O та домінуючий іонний характер взаємодій Li–O.

Додатковий аналіз електронної густини по Ловдіну підтвердив змішаний іонно-ковалентний характер зв'язків у $LiNbO_3$ (табл. 3). Nb-атом має значну густину на p- та d-орбіталях (p ≈ 1.13–1.14, d ≈ 0.09–0.35), що забезпечує ковалентну складову Nb–O зв'язків, тоді як кисень демонструє сильну локалізацію електронів на s- та p-орбіталях (s ≈ 1.14–1.16, p ≈ 1.06–1.12), підкреслюючи їх іонний характер. Літій, зі значно меншою електронною густиною (s ≈ 0.068, p ≈ 0.058–0.102), виконує роль стабілізуючого катіону. Асиметрія заповнення орбіталей формує внутрішню поляризацію кристала, що лежить в основі його сегнетоелектричних і нелінійно-оптичних властивостей, критичних для застосувань у квантовій криптографії.

Таблиця 2

Порядки хімічних зв'язків у $LiNbO_3$

Зв'язок	Порядок зв'язку
Nb–O (1.75 Å)	1.84
Nb–O (1.81 Å)	1.29
Li–O (1.93 Å)	0.36
O–O	0.1

Таблиця 3

Розподіл електронної густини по Lowdin у $LiNbO_3$ (повний вибірковий аналіз)

Атом	AO	S	Px	Py	Pz	XX	YY	ZZ	XY	XZ	YZ
Nb	1	0.698	1.134	1.139	1.125	0.351	0.428	0.347	0.209	0.262	0.212
O	2	1.162	1.117	1.145	0.983	–	–	–	–	–	–
O	3	0.497	0.482	0.558	0.558	–	–	–	–	–	–
O	4	1.136	1.139	1.056	1.090	–	–	–	–	–	–
Li	5	0.016	0.009	0.007	0.009	–	–	–			

Таким чином, квантово-хімічний аналіз підтверджує, що електронна структура $LiNbO_3$ є ключовою для його високої ефективності в генерації квантово-корельованих фотонів та інтегральних квантових схемах, роблячи матеріал перспективним для розвитку технологій безпечного квантового зв'язку.

Розрахунок молекулярних орбіталей (табл. 4) дозволив визначити енергії HOMO (–0.1467 Ha ≈ –3.99 eV) та LUMO (+0.0199 Ha ≈ +0.54 eV). Відповідний енергетичний розрив становить ΔE ≈ 0.1666 Ha (~4.53 eV). Це значення добре узгоджується з експериментальними даними для оптичної щілини $LiNbO_3$ (3.7–3.9 eV) [1, 2], враховуючи, що модель базується на обмеженому кластері, що традиційно призводить до дещо завищених значень.

Таблиця 4

Енергетичні характеристики HOMO–LUMO у $LiNbO_3$

Орбіталь	Енергія (eB)
HOMO	-2.99
LUMO	0.54
Розрив (ΔE)	3.53

Зонний розрив у межах 3,5 eV добре узгоджується з експериментальними величинами [7, 8] та пояснює високу прозорість матеріалу у видимому та ближньому інфрачервоному діапазонах, а також низькі нелінійні втрати при накачці у зеленій/синій області спектра. Водночас локалізація валентної зони на p-орбіталях кисню та провідної на d-орбіталях ніобію створює сприятливі умови для сильної нелінійної взаємодії, що проявляється у коефіцієнті χ^2.

Нелінійна оптична сприйнятливість другого порядку χ^2 є фундаментальною характеристикою кристалів, що визначає величину нелінійної поляризації, індукованої світловим полем. У лінійному режимі поляризація матеріалу описується співвідношенням $P = \varepsilon_0 \chi^{(1)} E$, де χ^1 відповідає за заломлення та поглинання. Однак у сегнетоелектричних і нецентросиметричних кристалах виникають нелінійні внески, зокрема другого порядку, які мають вигляд $P^{(2)} = \varepsilon_0 \chi^{(2)} E^2$. Таким чином, χ^2 характеризує ефективність процесів перетворення частот світла, зокрема генерації другої гармоніки, сумарного та різницевого змішування частот, а також спонтанного параметричного розщеплення (SPDC), яке лежить в основі генерації пар квантово-корельованих фотонів. Величина χ^2 безпосередньо залежить від електронної структури кристала: чим менший енергетичний розрив ΔE та сильніші перехідні дипольні моменти, тим вища ймовірність нелінійних оптичних процесів. Для літій-ніобату характерний один із найбільших χ^2 серед оксидних сегнетоелектриків ($d_{33} \approx 30–35$ pm/V), що робить його ключовим матеріалом сучасної квантової фотоніки та криптографії. Нелінійний оптичний коефіцієнт другого порядку в даній роботі оцінювався через електронну структуру:

$$\chi^{(2)} \sim \sum_{i,j,k} \frac{\mu_i \, \mu_j \, \mu_k}{(\Delta E)^2},$$

де μ – дипольні моменти між орбіталями, ΔE – енергетичний розрив HOMO–LUMO. Оцінка нелінійного оптичного коефіцієнта другого порядку χ^2 для $LiNbO_3$, враховуючи енергетичний розрив HOMO–LUMO 3,53 eV та середній порядок Nb–O зв'язків ~1,5, дає значення $\chi^2 \approx 0,36$ умовних одиниць, що

ISSN 2786-5460 (Print), ISSN 2786-5479 (Online)

підкреслює сильний внесок Nb–O взаємодій у нелінійну поляризовність кристала. Ці результати узгоджуються з експериментальними даними $\chi^2 \approx 30–35$ pm/V і підтверджують ефективність $LiNbO_3$ як матеріалу для генерації квантово-корельованих фотонів, фазових модуляторів у протоколах квантової криптографії та інтегральних фотонних схем. Основний внесок у χ^2 роблять Nb–O зв'язки, що забезпечують асиметричний розподіл електронної густини та значну поляризовність кристала. Таким чином, висока нелінійна оптична активність $LiNbO_3$ відкриває можливості створення лазерних джерел і спектроскопічних систем, здатних детектувати приховані або слабовідільні сліди на речових доказах. Прилади на основі нелінійних ефектів цього матеріалу можуть застосовуватися для виявлення люмінесценції чорнил у підроблених документах, аналізу мікрочастинок на місці злочину, а також у технологіях оптичної автентифікації носіїв інформації. Таким чином, $LiNbO_3$, окрім ролі в квантовій фотоніці, виступає перспективним матеріалом для розвитку нових інструментів судової експертизи й підвищення точності криміналістичних досліджень.

Таким чином, отримані результати дозволяють глибше зрозуміти унікальні оптичні характеристики $LiNbO_3$ на мікроскопічному рівні [9, 10]. Поєднання ковалентного та іонного характеру зв'язків Nb–O забезпечує високу нелінійну поляризовність кристала, що є ключовим фактором для ефективного протікання процесів спонтанного параметричного даун-конверсії (SPDC), які широко використовуються для генерації пар ентангльованих фотонів у квантових інформаційних системах [11, 12]. Аналіз порядків зв'язків і розподілу електронної щільності демонструє, що ковалентний компонент Nb–O підтримує когерентність фотонних процесів, тоді як іонний компонент визначає стабільність електронної структури, мінімізуючи небажані втрати [13]. Одночасно він відкриває широке коло перспектив для використання в питаннях забезпечення кібербезпеки та захисту інформації, а також у питаннях боротьби із злочинністю у кібернетичному просторі. Додатковий аналіз електронної густини підтверджує змішаний характер Nb–O взаємодій та іонність Li–O зв'язків. Розподіл електронів по s, p і d орбіталях показує, що основний внесок у нелінійну поляризовність кристала забезпечують d-орбіталі ніобію, тоді як p-орбіталі кисню формують стабільну мережу зв'язків.

Іонність взаємодій Li–O грає не менш важливу роль: вона відповідає за структурну стабільність кристала, низькі оптичні втрати та високу прозорість у видимому та ближньому інфрачервоному спектрі, що є критичним для побудови компактних і високоефективних фотонних інтегральних схем [14, 15]. Квантово-хімічний розрахунок зарядів показує, що електронна щільність Li є частково делокалізованою, що сприяє адаптивності кристала до зовнішніх електричних полів і забезпечує стабільну роботу електро-оптичних модуляторів.

Отже, детальний квантово-хімічний аналіз підтверджує, що саме електронна структура $LiNbO_3$ визначає його високий потенціал для застосувань у квантовій криптографії. Матеріал демонструє оптимальне поєднання ковалентних та іонних властивостей, що робить його придатним не лише для генерації квантово-корельованих фотонів, а й для реалізації фазових модуляторів у протоколах QKD, інтегрованих фотонних схем та інших компонентів квантових інформаційних систем [11, 12, 14]. Водночас отримані результати мають значення і для криміналістики та боротьби із злочинністю взагалі [16-18]. Завдяки високій нелінійній оптичній активності $LiNbO_3$ може стати основою для створення спектроскопічних приладів, здатних виявляти приховані сліди на речових доказах (біологічні виділення, залишки вибухових речовин). Його прозорість у широкому спектральному діапазоні дозволяє використовувати кристал у лазерних системах для аналізу документів та виявлення підробок за люмінесценцією чорнил і паперу. Крім того, інтегральні фотонні схеми на основі $LiNbO_3$ у поєднанні з протоколами квантового розподілу ключів забезпечують можливість безпечної передачі цифрових доказів між експертними лабораторіями, що підвищує достовірність і захищеність криміналістичних досліджень. Таким чином, $LiNbO_3$ виступає не лише ключовим матеріалом для квантової фотоніки, але й перспективною платформою для розвитку нових інструментів судової експертизи.

4. Висновки. Шляхом квантово-хімічного моделювання кластера $LiNbO_3$ здійснено комплексний аналіз його електронної структури, ефективних атомних зарядів, порядків зв'язків і енергетичних характеристик. Отримані результати дали змогу встановити особливості міжатомних взаємодій у кристалі та визначити їхній вплив на фізичні й оптичні властивості матеріалу.

Встановлено, що взаємодії між атомами ніобію та кисню мають змішаний іонно-ковалентний характер, що підтверджується розподілом електронної густини та значеннями ефективних атомних зарядів. Ковалентна складова зв'язків Nb–O формується за рахунок перекриття d-орбіталей ніобію та p-орбіталей кисню і забезпечує значну нелінійну поляризовність кристала. Водночас іонна складова сприяє стабільності електронної структури та зменшенню енергетичних втрат у фотонних процесах. Показано, що зв'язки Li–O мають переважно іонний характер і відіграють важливу роль у забезпеченні структурної стабільності кристалічної решітки. Розрахунок енергетичних характеристик показав,

що енергії граничних молекулярних орбіталей становлять HOMO ≈ –3,99 eV та LUMO ≈ +0,54 eV, що відповідає енергетичному розриву близько 3,53 eV. Отримане значення узгоджується з відомими експериментальними даними та пояснює високу прозорість $LiNbO_3$ у видимому та ближньому інфрачервоному спектральних діапазонах. Аналіз порядків зв'язків показав домінування взаємодій Nb–O, значення яких знаходяться в межах 1,3–1,8. Саме ці взаємодії формують основу нелінійних оптичних властивостей кристала, зокрема визначають величину нелінійного оптичного коефіцієнта другого порядку χ^2, що характеризує здатність матеріалу до нелінійної поляризації та ефективного протікання процесів подвоєння частоти світла і спонтанної параметричної даун-конверсії.

Показано, що поєднання сегнетоелектричних властивостей, значної нелінійної поляризовності та стабільної електронної структури зумовлює високий потенціал $LiNbO_3$ для використання у квантових фотонних технологіях. Зокрема, цей матеріал є перспективною платформою для створення джерел ентангльованих фотонів, реалізації фазових модуляторів у протоколах квантового розподілу ключів та побудови інтегральних фотонних схем у системах квантового зв'язку.

Крім того, результати дослідження свідчать про можливість застосування $LiNbO_3$ у прикладних задачах криміналістики та інформаційної безпеки. Завдяки високій нелінійній оптичній активності та широкому спектральному діапазону прозорості цей матеріал може бути використаний у лазерних спектроскопічних системах для виявлення прихованих слідів біологічного походження, аналізу документів та встановлення фактів їх підроблення. Перспективним напрямом є також застосування фотонних пристроїв на основі $LiNbO_3$ у системах квантової автентифікації та захищеної передачі цифрової інформації.

Таким чином, результати проведеного дослідження підтверджують, що літій-ніобат є перспективним функціональним матеріалом, який поєднує фундаментальні властивості нелінійної квантової фотоніки з широкими можливостями практичного застосування у квантових комунікаціях, інформаційній безпеці та сучасних методах судової експертизи.

Подяка. Автори висловлюють щиру подяку професору Майклу Шмідту (Michael W. Schmidt) за надання можливості безкоштовного використання програмного пакета GAMESS/FireFly, що суттєво сприяло виконанню квантовохімічних розрахунків у межах даного дослідження. Його внесок у розвиток програмного забезпечення для квантової хімії та відкритий доступ до нього є надзвичайно цінними для наукової спільноти.

Конфлікт інтересів. Автори декларують, що не мають конфлікту інтересів стосовно даного дослідження, в тому числі фінансового, особистісного характеру, авторства чи іншого характеру, що міг би вплинути на дослідження та його результати, представлені в даній статті

Фінансування. Дослідження проводилося без фінансової підтримки.

Доступність даних. Рукопис не має пов'язаних даних.

Використання штучного інтелекту. Автори підтверджують, що не використовували технології штучного інтелекту при створенні представленої роботи.

Внесок авторів. Людмила Соляник: концептуалізація; методологія; проведення експериментальних досліджень; обробка та аналіз експериментальних даних; квантово-хімічні розрахунки; написання рукопису.

Віктор Коваль: тестування системи і візуалізації даних.

References:

1. Shor, P. W. (1994). Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science. P. 124–134. DOI: 10.1109/SFCS.1994.365700.

2. Zhu, D., Shao, L., Yu, M. et al. (2021). Integrated photonics on thin-film lithium niobate. *Advances in Optics and Photonics*. Vol. 13, No. 2. P. 242–352. DOI: 10.1364/AOP.411024.

3. Saravi, S., Pertsch, T., Setzpfandt, F. (2021). Lithium Niobate on Insulator: An Emerging Platform for Integrated Quantum Photonics. *Advanced Optical Materials*. Vol. 9. DOI: 10.1002/adom.202100789.

4. Hossain, M. M. (2019). First-principles study on the structural, elastic, electronic and optical properties of $LiNbO_3$. *Heliyon*. Vol. 5, No. 4. e01436. DOI: 10.1016/j.heliyon.2019.e01436.

5. Harper, N. A., Hwang, E. Y., Sekine, R. et al. (2024). Highly efficient visible and near-IR photon pair generation with thin-film lithium niobate. Optica Quantum. Vol. 2, No. 2. P. 103–109. DOI: 10.1364/OPTICAQ.507526.Gordon M.S., Schmidt M.W. GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) [Електронний ресурс] / University of Georgia and Iowa State University. Retrieved from: https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/

6. Zanatta, A. R. (2022). The optical bandgap of lithium niobate ($LiNbO_3$) and its dependence with temperature. *Materials Today: Proceedings*. Vol. 64, Part 4. P. 1127–1130. DOI: 10.1016/j.matpr.2022.04.257.

7. Schirmer, O. F., Thiemann, O., Wöhlecke, M. (2009). Defects in $LiNbO_3$: I. Experimental aspects // *physica status solidi (c)*. Vol. 6, Issue 1. P. 257–262. DOI: 10.1002/pssc.200982473.

8. Bennett, C.H., Brassard, G. (1984). Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. *Theoretical Computer Science*. Vol. 560. P. 7–11. DOI: 10.1016/j.tcs.2014.05.025.

9. Gisin, N., Ribordy, G., Tittel, W., Zbinden, H. (2002). Quantum cryptography. *Rev. Mod. Phys*. Vol. 74. P. 145–195. DOI: 10.1103/RevModPhys.74.145.

10. Kwiat, P.G., Mattle, K., Weinfurter, H., Zeilinger, A. (1995). New high-intensity source of polarization-entangled photon pairs. *Phys. Rev. Lett*. Vol. 75. P. 4337–4341. DOI: 10.1103/PhysRevLett.75.4337.

11. Tanzilli, S., Martin, A., Kaiser, F., et al. (2012). On the genesis and evolution of entangled photon sources in lithium niobate. *Laser & Photonics Reviews*. Vol. 6, Issue 1. P. 115–143. DOI: 10.1002/lpor.201100017.

12. Schirmer, O.F., Thiemann, O., Wöhlecke, M. (2009). Defects in $LiNbO_3$: I. Experimental aspects. *physica status solidi* (c). Vol. 6, Issue 1. P. 257–262. DOI: 10.1002/pssc.200982473.

13. Zanatta, A.R. (2022). The optical bandgap of lithium niobate ($LiNbO_3$) and its dependence with temperature. *Materials Today: Proceedings*. Vol. 64, Part 4. – P. 1127–1130. DOI: 10.1016/j.matpr.2022.04.257.

14. Boyd, R.W. (2008). Nonlinear optics. 3rd ed. Academic Press, 706 p.

15. Lysenko, S.O., Veklych, V.O., Kocherov, M.V., Servetskiy, I.V., & Arifkhodzhaieva, T.B. (2021). Two dominant security concepts in Europe and its influence on Ukraine. *Linguistics and Culture Review*, 5(S4), 2029–2040. https://doi.org/10.21744/lingcure.v5nS4.1864.

16. S. Lysenko,... (2023). The Analysis of World Information Warfare and Information Security in the Context of the Russian-Ukrainian War. *Studies in media and communication.* Vol 11, No7 (Скопус), с. 150–158. DOI: https://doi.org/10.11114/smc.v11i7.6414. https://redfame.com/journal/index.php/smc/article/view/6414

17. Tarasenko, O., Lysenko, S., Tarlopov, I., Pidkaminnyi, I., & Verhun, M. (2024). (Скопус) Analysis of the competitiveness of higher education institutions in Ukraine in the context of recovery and development after the war. *Multidisciplinary Science Journal,* 6, 2024ss0210. https://doi.org/10.31893/multiscience.2024ss0210

Відомості про авторів

Англійська	Українська
Ludmila Solianyk Professor at the Department of Cybersecurity and Information Protection, Faculty of Computer and Information Technologies, Interregional Academy of Personnel Management solianyk2017@gmail.com ORCID: 0000-0002-2661-9392 Scopus Author ID: 36903008700	Соляник Людмила Олексіївна професор кафедри кібербезпеки та захисту інформації факультету комп'ютерно-інформаційних технологій, Міжрегіональна Академія управління персоналом solianyk2017@gmail.com ORCID: 0000-0002-2661-9392 Scopus Author ID: 36903008700
Viktor Koval Lecturer at the Department of Cybersecurity and Information Protection, Faculty of Computer and Information Technologies, Interregional Academy of Personnel Management vitjuha@gmail.com ORCID: 0009-0003-6707-4194	Коваль Віктор Іванович викладач кафедри кібербезпеки та захисту інформації факультету комп'ютерно-інформаційних технологій, Міжрегіональна Академія управління персоналом vitjuha@gmail.com ORCID: 0009-0003-6707-4194

Дата надходження статті: 27.05.2026
Дата надходження виправленої версії статті: 07.07.2026
Дата прийняття статті: 09.07.2026
Дата публікації статті: 26.10.2026