Письма в ЖЭТФ, том 122, вып. 3, с. 156 – 161 © 2025 г. 10 августа

Фазовые превращения в гейзенберговских магнетиках, индуцированные одноосной анизотропией: моделирование методами Ванга–Ландау и машинного обучения

Д. А. Друзьев[*], *А. А. Чубарова*[+1)], *П. В. Прудников*[+]

[+]*Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН, 644040 Омск, Россия*

[*]*Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, 644077 Омск, Россия*

Поступила в редакцию 20 мая 2025 г.
После переработки 16 июня 2025 г.
Принята к публикации 24 июня 2025 г.

Впервые представлено моделирование критических свойств трехмерной анизотропной модели Гейзенберга во внешнем поле с использованием метода Ванга–Ландау. Был применен комбинированный подход, объединяющий алгоритм Ванга–Ландау с методами машинного обучения, кластеризацией DBSCAN и PCA анализом. Выявлено пороговое значение параметра Δ_c, разделяющее области определяющего влияния одноосной анизотропии.

DOI: 10.31857/S0370274X25080067, EDN: TSALDV

Трехмерная модель Гейзенберга позволяет эффективно описывать фазовые превращения в реальных магнетиках, учитывая непрерывное распределение спинов в пространстве и их взаимодействие между собой. Применение методов Монте-Карло совместно с методами машинного обучения [1–3] к данной модели дает возможность исследовать критическое поведение системы, определять температуры фазовых переходов и рассчитывать критические характеристики магнетиков с высокой точностью. Гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей в решетке спинов:

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \left[\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \Delta \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y\right)\right] - H \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

где Δ – параметр, определяющий влияние анизотропии, так $\Delta = 0$ соответствует поведению изотропной модели, $\Delta = 1$ – предельный случай одноосной анизотропии [4]. $H_z \equiv H$ – внешнее поле. Особенностью модели Гейзенберга является непрерывная симметрия, из-за чего спектр энергетических и магнитных состояний становится непрерывным и сильно вырожденным, что создает сложности в предсказании поведения системы.

Энтропийное моделирование алгоритмом Ванга–Ландау [5] применяется к широкому спектру задач статистической физики и биофизики. Например, расчет температур кипения жидкостей [6] и моделирование свойств полимеров [7–9]. Алгоритм Ванга–Ландау успешно применяется для изучения фазовых переходов в спиновых системах [10–12], также много внимания уделено изучению свойств самого алгоритма [13–15] и его параллельным реализациям [16, 17]. Применение к сложным моделям с непрерывной симметрией [18, 19], таким как модель Гейзенберга, становится нетривиальной задачей.

В данной работе исследуется влияние одноосной анизотропии на критическое поведение в модели Гейзенберга с использованием алгоритма Ванга–Ландау с введением двупараметрической плотности состояний $g(E, M)$ [20, 21], что позволяет одновременно учесть в статистической сумме вариацию энергии и намагниченности.

$$Z(T, H) = \sum_{E,M} g(E, M) e^{-(E - HM)/k_B T}, \quad (2)$$

где $g(E, M)$ – количество состояний с энергией E и намагниченностью $M_z = \sum_i S_i^z \equiv M$, далее обрабатывая статистические данные, рассчитываются средние значения термодинамических величин для любого набора температур во внешнем поле:

$$\langle f(T, H) \rangle = \frac{\sum_{E,M} f(E, M) g(E, M) e^{-(E - HM)/k_B T}}{\sum_{E,M} g(E, M) e^{-(E - HM)/k_B T}}, \quad (3)$$

где $f(E, M)$ – среднее значение величины с энергией E и намагниченностью M.

В данной работе используется алгоритм Ванга–Ландау с применением модификации $1/t$, которая

[1)]e-mail: alina_chubarova@ihcp.ru

позволяет избежать сатурации ошибки и значительно ускорить сходимость алгоритма [15]. На каждой итерации алгоритма требуется пройти каждое состояние (E_i, M_j) хотя бы единожды, но набор состояний заранее неизвестен, поэтому на первых этапах моделирования выделяется время для посещения всех энергий в диапазоне $E^{\min} \le E \le E^{\max}$ для любых значений M, а на последующих итерациях требуется посетить все пары (E_i, M_j), посещенные ранее.

При переходе к моделированию систем с непрерывной симметрией нами были введены несколько параметров для моделирования:
$\Delta E, \Delta M$ – параметры дискретизации энергетических и магнитных уровней соответственно;
E_{cut} – определяющий ширину энергетического спектра, напрямую влияющий на низкотемпературные значения термодинамических функций.
Для прохождения непрерывного набора состояний был использован метод Marsaglia [22], который позволяет корректно генерировать новое спиновое состояние.

На рисунке 1 хорошо видно быстрое спадание фактора сходимости f для классического алгоритма, в то время как в $1/t$ алгоритме кривые выходят на вторую стадию алгоритма и медленно спадают к финальному значению $f_{\min}$.

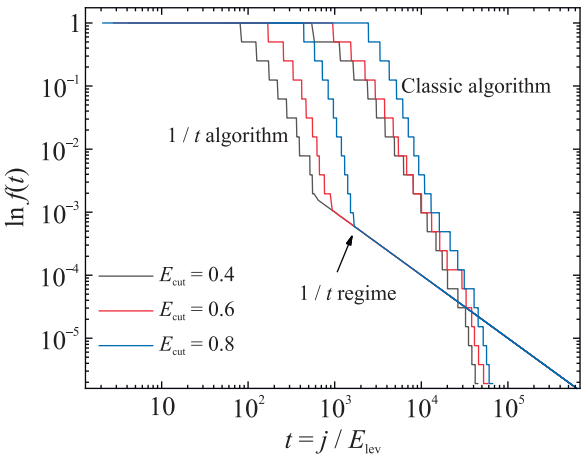

Рис. 1. (Цветной онлайн) Временная зависимость параметра сходимости $f(t)$ для классического и модифицированного $1/t$ алгоритма Ванга–Ландау анизотропной модели Гейзенберга с линейным размером $L = 4$ для различных обрезаний энергии. $E_{\text{cut}} = 0.4, 0.6, 0.8$

В результате моделирования получается диаграмма состояний, представленная на рис. 2, как заметно, на диаграмме анизотропной модели есть пустая область, которая для изотропной модели заполнена, это связано с тем, что анизотропия делает на-

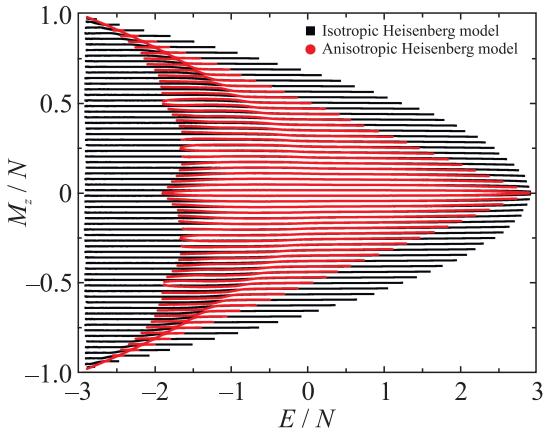

Рис. 2. (Цветной онлайн) Диаграмма состояний изотропной и анизотропной модели Гейзенбера с линейными размерами $L = 4$, дискретизацией энергетического и магнитного спектра $\Delta E = 0.5, \Delta M = 2$ и коэффициента обрезания $E_{\text{cut}} = 0.96$. Символами отмечены посещенные состояния

правление по оси z превалирующим, вследствие чего не все состояния становятся достижимыми.

Для проверки качества полученных результатов вводится функция "достоверности":

$$R(T) = \frac{\sum_{E,M} g(E,M) e^{-E/k_B T}}{g(E^{\min}, M^{\min}) e^{-E^{\min}/k_B T}}, \qquad (4)$$

анализируя поведение которой (рис. 3), можно оценить вклад слагаемого с минимальной учитываемой энергией $E_{\min}$ в общую статистическую сумму, результаты предложено считать достоверными при $R(T) > 10^3$ [23].

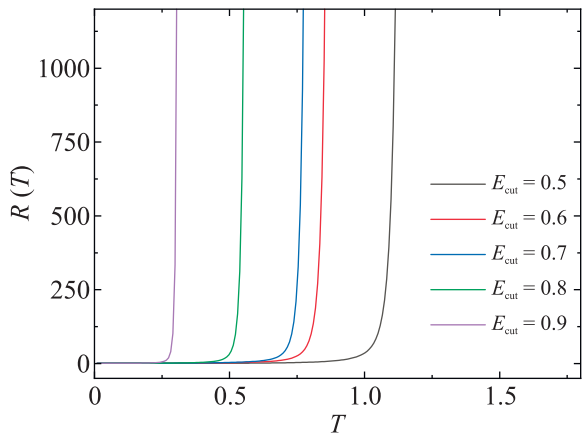

Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурная зависимость "функции достоверности" $R(T)$ анизотропной модели Гейзенберга $L = 8$, $E_{\text{cut}} = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$

После выбора оптимальных условий моделирования было произведено моделирование двумерной

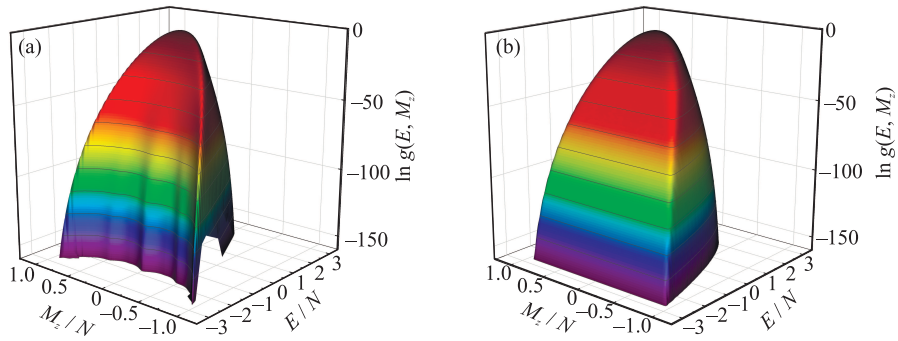

Рис. 4. (Цветной онлайн) Двумерная плотность состояний $g(E, M)$ анизотропной (a) и изотропной (b) модели Гейзенберга с $L = 4$, $\Delta E = 0.5, \Delta M = 2$, $E_{\text{cut}} = 0.96$

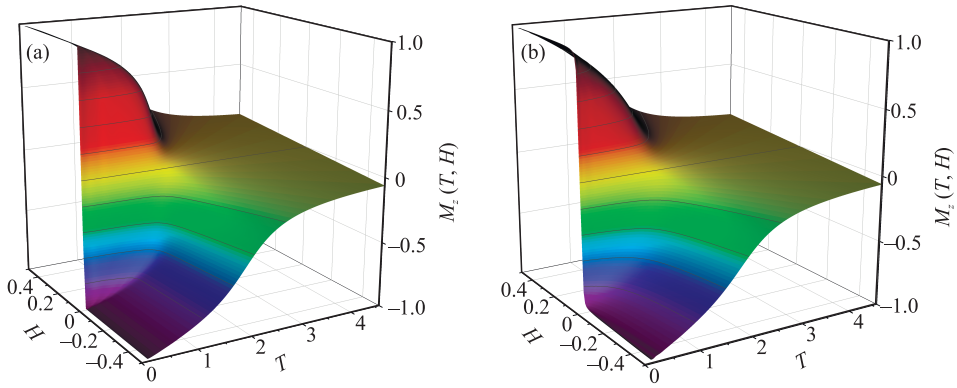

Рис. 5. (Цветной онлайн) Двупараметрические зависимости намагниченности $M_z(T, H)$ анизотропной (a) и изотропной (b) модели Гейзенберга с $L = 4$, $\Delta E = 0.5, \Delta M = 2$, $E_{\text{cut}} = 0.96$

плотности состояний для анизотропной и изотропной трехмерной модели Гейзенберга на кубической решетке, результаты моделирования представлены на рис. 4. На трехмерных графиках явно видны свойства анизотропной модели, обсужденные ранее, а также что низкотемпературные состояния системы гораздо менее вырождены – характеризуются меньшими значениями плотности состояний $g(E, M)$.

Произведен расчет намагниченности $M_z(T, H)$ для модели во внешнем поле H (рис. 5), который демонстрирует переворот намагниченности со сменой направления поля, также проведено сравнение результатов для анизотропной модели с известным алгоритмом Метрополиса (рис. 6), результаты находятся в хорошем согласии для различных величин внешнего поля H.

Для исследования влияния анизотропии на критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга был проведен расчет полной намагниченности и восприимчивости системы:

$$M(T) = \left| \sum_i \mathbf{S}_i \right|, \chi(T) = \frac{\langle M^2(T) \rangle - \langle M(T) \rangle^2}{k_B T}, \quad (5)$$

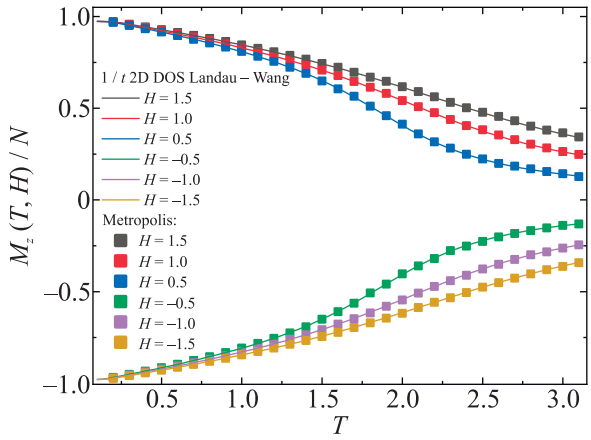

Рис. 6. (Цветной онлайн) Температурные зависимости намагниченности $M_z(T, H)$ в поле H вдоль оси z с использованием алгоритма Метрополиса и модифицированного $1/t$ алгоритма Ванга–Ландау с введением двумерной плотности состояний $g(E, M)$ для анизотропной модели Гейзенберга с $L = 4$, $\Delta E = 0.5, \Delta M = 2$, $E_{\text{cut}} = 0.96$

для различных линейных размеров L анизотропной и изотропной модели (рис. 7), данные демонстрируют

классическое смещение пика восприимчивости вправо с введением анизотропии, а также смещение пика влево с ростом линейного размера.

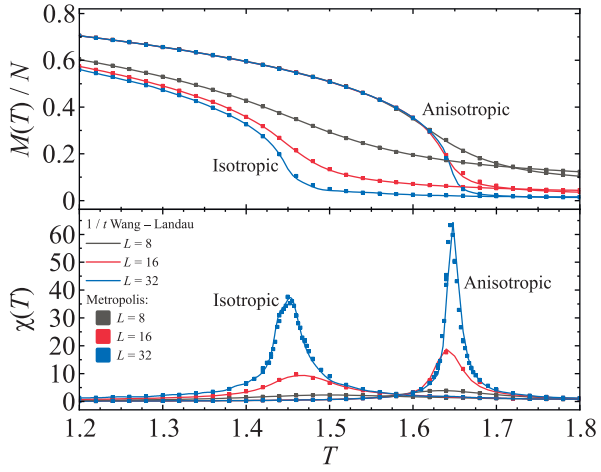

Рис. 7. (Цветной онлайн) Температурные зависимости намагниченности изотропной и анизотропной модели Гейзенберга для различных $L = 4, 8, 16, 32$ для алгоритма Метрополиса и модифицированного $1/t$ алгоритма Ванга–Ландау с $\Delta E = 0.1$, $E_{\text{cut}} = 0.9$

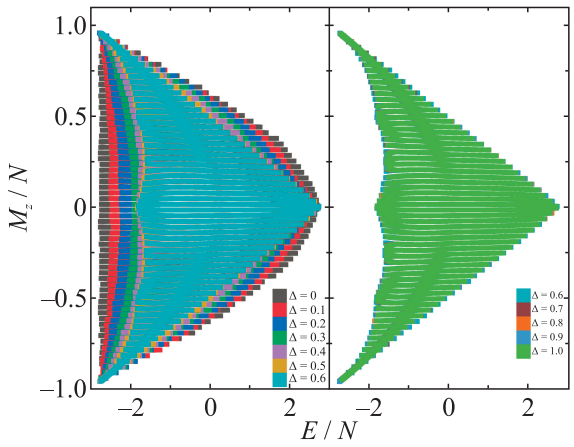

Рис. 8. (Цветной онлайн) Диаграммы состояний классической модели Гейзенберга для различных параметров анизотропии $\Delta = [0.0{-}1.0]$, $\Delta E = 0.5, \Delta M = 2$, $E_{\text{cut}} = 0.8$, $L = 4$. Символами отмечены посещенные состояния

При исследовании влияния параметра анизотропии на диаграмму состояний системы с линейным размером $L = 4$ было обнаружено, что при $\Delta > 0.6$ структура диаграммы практически не изменяется (рис. 8). Для анализа поведения системы были применены методы машинного обучения – кластеризация и регрессионная модель. В качестве входных данных для этих методов были взяты, рассчитанные в процессе работы алгоритма Ванга–Ландау, энергетические зависимости полной намагниченности $M(E)$ и ее компонент $M_x(E)$ и $M_z(E)$. Входные данные были нормированы и преобразованы с помощью метода главных компонент PCA (Principal Component Analysis) [24] до двумерного пространства, максимально сохраняющего дисперсию исходных данных. Для кластеризации применен алгоритм DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise) [25], который не требует предварительного задания числа кластеров и эффективно идентифицирует как плотные области, соответствующие фазовым состояниям, так и шум – переходным конфигурациям. Результаты кластеризации позволяют выделить типичные группы состояний, характерные для различных режимов анизотропии, а также локализовать область перехода.

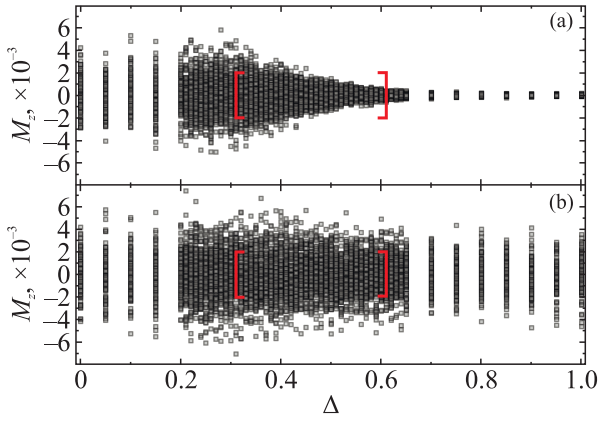

Рис. 9. (Цветной онлайн) Зависимость компоненты намагниченности M_x(a), M_z(b) от величины параметра анизотропии Δ

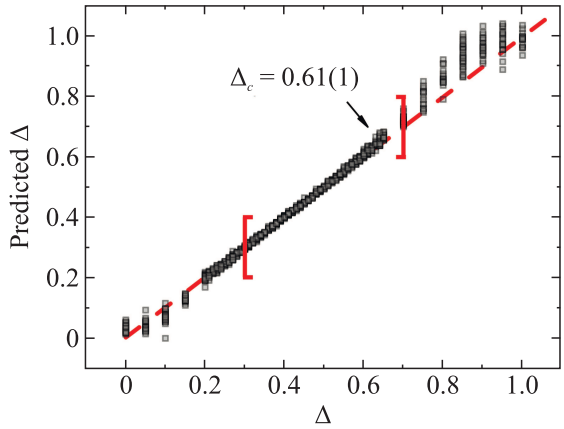

Рис. 10. (Цветной онлайн) Сопоставление предсказаний регрессионной модели с заданными значениями параметра Δ. Пунктирная линия соответствует "идеальному" случаю

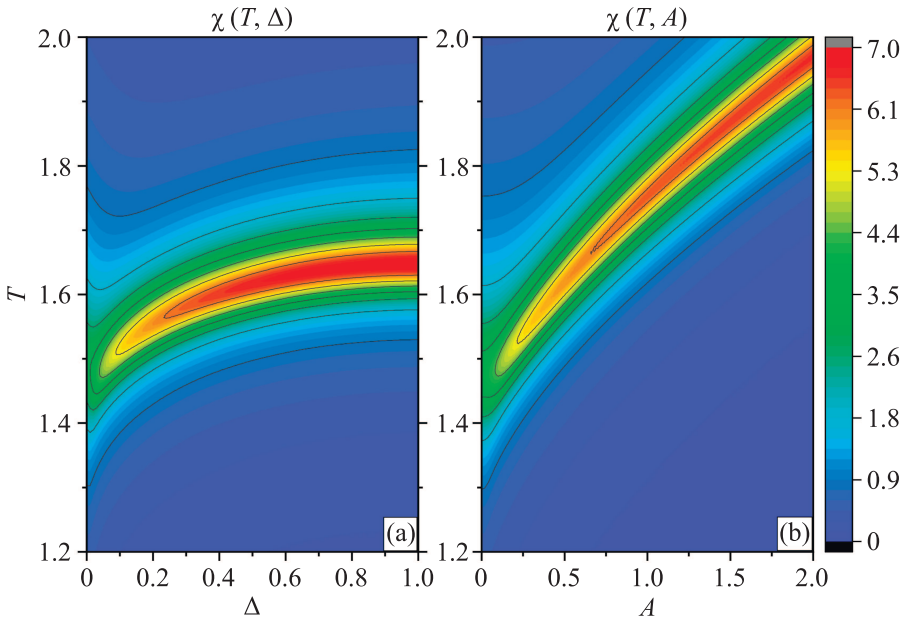

Рис. 11. (Цветной онлайн) Двупараметрические зависимости магнитной восприимчивости при учете влияния (a) обменной и (b) одноионной анизотропии

На рисунке 9 представлены зависимости средних значений компонент намагниченности M_x и M_z от параметра анизотропии Δ. Анализ флуктуаций M_x и M_z позволяет выделить интервал значений Δ, который соответствует переходной области смены влияния анизотропии. График зависимости компоненты M_x от параметра анизотропии Δ (рис. 9a) позволяет выделить интервал $\Delta \in [0.32(2); 0.61(1)]_{M_x}$, в котором наблюдается изменение амплитуд флуктуаций M_x. Для $\Delta < 0.5$ можно выделить флуктуации компоненты M_x, характерные для квазиизотропной модели, где эффекты анизотропии несущественны. Значения анизотропии $\Delta > 0.6$ демонстрируют существенное уменьшение M_x, что указывает на ориентацию намагниченности вдоль оси анизотропии. Плавное снижение амплитуд флуктуаций наблюдается в диапазоне $0.5 \leq \Delta \leq 0.6$, что соответствует переходной области. На основе средних значений амплитуд флуктуаций M_z (рис. 9b) можно выделить интервал $\Delta \in [0.32(2); 0.61(1)]_{M_z}$. Согласованное поведение компонент намагниченности подтверждает наличие переходной области, характеризующей смену магнитного поведения под действием эффектов анизотропии.

Для определения порогового значения одноосной анизотропии Δ_c была реализована регрессионная модель. Архитектура модели включает в себя два скрытых слоя с функцией активации ReLU и выходной слой с линейной активацией. Обучение сети производилось на размеченной выборке с использованием алгоритма оптимизации Adam [1, 26] и функции потерь MSE (среднеквадратичная ошибка).

На рисунке 10 представлена зависимость предсказываемых значений Δ. В интервале $\Delta \in [0.3; 0.7]$, наблюдается минимальные отклонения предсказываемых значений Δ от “идеальных”, что подтверждает границы переходной области, как было выявлено на рис. 9. Полученные результаты свидетельствуют о том, что модели регрессии и кластеризации корректно выявляют скрытые закономерности в данных. Особенно важно, что модели машинного обучения устойчивы к флуктуационным эффектам в переходной области, где значения параметров системы наиболее чувствительны к изменению фазового состояния.

Наиболее сильные эффекты анизотропии значениями спина $S > 1/2$ в магнитных материалах могут быть обусловлены не обменной, а одноионной анизотропией. Учет влияния одноионной анизотропии может осуществляться добавлением в Гамильтониан слагаемого $\mathcal{H}_{\text{ion}} = -\sum_i (S_i^z)^2$, где A – параметр одноионной анизотропии. Для оценки влияния различных типов анизотропии на критическое поведение модели Гейзенберга был проведен расчет двупараметрической магнитной восприимчивости $\chi(T, \Delta)$ и $\chi(T, A)$ (рис. 11). Представленные на рис. 11 данные позволяют сделать заключение, что при некотором количественном отличии качественные выводы о влиянии анизотропии сохраняются.

Существенное влияние конкуренции эффектов анизотропии ожидается в искуственных магнитных структурах [27], в квазидвумерных и одномерных магнитных структурах с анизотропией формы. Рассмотренная модель с учетом эффектов конкуренции анизотропии может быть полезна для описания сильно анизотропных магнетиков, например, $CsNiCl_2$ [28] с $S = 1$, в котором реализуется трехмерная структура из слабо связаннных цепочек. Более широким примером таких систем выступает XXZ – модель Гейзенберга с $S > 1/2$, например, $SrCu_{0.99}Co_{0.01}O_2$ с $S = 3/2$ [29].

В данной работе впервые применен алгоритм Ванга–Ландау для исследования влияния анизотропии на критическое поведение трехмерной модели Гейзенберга. Определено пороговое значение одноосной анизотропии $\Delta_c = 0.61(1)$, после которого система испытывает резкое изменение структуры спиновых конфигураций и высокую чувствительность признаков. Пороговое значение анизотропии Δ_c может служить ориентиром при проектировании новых функциональных материалов с заданными свойствами, что особенно актуально для разработки устройств спинтроники и магнитной памяти [30, 31]. Полученные результаты раскрывают механизм перехода между изотропным и анизотропным поведением в трехмерных магнитных системах с непрерывной симметрией. Разработанный подход, сочетающий алгоритм Ванга–Ландау с методами машинного обучения, создает новый инструментарий для изучения фазовых переходов в сложных магнитных системах.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0039).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, and H. K. Lee, Sci. Rep. **10**, 2177 (2020).
2. I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, and V. V. Mazurenko, Phys. Rev. B **98**, 174411 (2018).
3. A. A. Chubarova, M. V. Mamonova, and P. V. Prudnikov, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys. **17**, 238 (2024).
4. P. V. Prudnikov, V. V. Prudnikov, M. A. Menshikova, and N. I. Piskunova, J. Magn. Magn. Mater. **387**, 77 (2015).
5. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
6. T. Aleksandrov, C. Desgranges, and J. Delhommelle, Molecular Simulation **38**, 1265 (2012)
7. W. Janke and W. Paul, Soft Matter **12**, 642 (2015).
8. A. D. Swetnam and M. P. Allen, J. Comput. Chem. **32**, 816 (2011).
9. N. Rathore, Q. Yan, and J. J. de Pablo, J. Chem. Phys. **120**, 5781 (2004).
10. J. Xu and H. Ma, Phys. Rev. E **75**, 041115 (2007).
11. C. J. Silva, A. A. Caparica, and J. A. Plascak, Phys. Rev. E **73**, 036702 (2006).
12. D. P. Landau, F. Wang, and S. Tsai, Comput. Phys. Commun. **179**, 8 (2008).
13. L. Yu. Barash, M. A. Fadeeva, and L. N. Shchur, Phys. Rev. E **96**, 043307 (2017).
14. C. Zhou and R. N. Bhatt, Phys. Rev. E **72**, 025701 (2005).
15. R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, Phys. Rev. E **75**, 046701 (2007).
16. L. Zhan, Comput. Phys. Commun. **179**, 339 (2008).
17. J. Yin and D. P. Landau, Comput. Phys. Commun. **183**, 1568 (2012).
18. S. Sinha and S. K. Roy, Phys. Lett. A **373**, 308 (2009).
19. C. Zhou, T. C. Schulthess, S. Torbrügge, and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **96**, 120201 (2006).
20. M. Kalyan, R. Bharath, V. Sastry, and K. Murthy, J. Stat. Phys. **163**, 197 (2016).
21. V. I. Egorov, O. G. Maksimova, and A. R. Baidganov, J. Phys.: Conf. Ser. **1141**, 012068 (2018).
22. S. Schnabel and W. Janke, arXiv:2204.14004 (2022).
23. G. Brown and T. C. Schulthess, J. Appl. Phys. **97**, 10E303 (2005).
24. I. T. Jolliffe and J. Cadima, Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci. **374**, 20150202 (2016).
25. P. B. Nagpal and P. A. Mann, Int. J. Comput. Appl. **27**, 44 (2011).
26. D. P. Kingma and J. Ba, arXiv:1412.6980 (2017).
27. A. Fernández-Pacheco, R. Streubel, O. Fruchart, R. Hertel, P. Fischer, and R. P. Cowburn, Nat. Commun. **8**, 15756 (2017).
28. I. Affleck and G. F. Wellman, Phys. Rev. B **46**, 8934 (1992).
29. A. Singhania, M. Kadosawa, Y. Ohta, S. Kumar, and S. Nishimoto, Phys. Rev. B **104**, 224407 (2021).
30. M. H. Kryder, E. C. Gage, T. W. McDaniel, W. A. Challener, R. E. Rottmayer, and G. Ju, IEEE Proc. **96**, 1810 (2008).
31. D. Apalkov, B. Dieny, and J. M. Slaughter, IEEE Proc. **104**, 1796 (2016).