Письма в ЖЭТФ, том 124, вып. 10, с. 833 – 839 © 2026 г. 25 ноября

Влияние одноосной анизотропии на фазовую диаграмму киральных магнетиков

Д. А. Лихтнер[*1)], *Д. А. Сергеичева*[*], *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 14 июля 2026 г.
После переработки 28 сентября 2026 г.
Принята к публикации 8 октября 2026 г.

Представлены результаты применения методов машинного обучения для поиска конфигураций основного состояния двумерной спиновой модели Гейзенберга. Спиновые конфигурации генерировались полносвязной нейронной сетью, обучаемой на минимизацию средней плотности энергии. На основе полученных данных был построен классификатор фаз с использованием сверточной нейронной сети. Построенные фазовые диаграммы демонстрируют возникновение различных типов магнитного упорядочения, включая скирмионную решетку, ферромагнитное состояние, спиновые спирали и структуры доменных стенок. Учет одноосной анизотропии приводит к появлению области параметров, в которой формируются доменные стенки, при этом увеличение анизотропии расширяет область существования данной фазы.

DOI: 10.7868/S3034576626110194

Методы машинного обучения (ML) находят широкое применение в физике конденсированного состояния, в частности для изучения фазовых переходов [1, 2], распознавания топологических фаз [3] и поиска основного состояния [4].

Ключевую роль в формировании киральных магнитных структур играет взаимодействие Дзялошинского–Мория (DMI) [5]. Его антисимметричный характер, в отличие от симметричного обменного взаимодействия, стабилизирует нетривиальные спиновые структуры, такие как скирмионы и спиновые спирали. Уникальные свойства этих топологических состояний делают их перспективными для применения в спинтронике и устройствах хранения информации [6].

В данной работе исследуется применение методов глубокого обучения для определения основного состояния в киральных магнитных материалах. Такой подход позволяет эффективно моделировать сложные топологические структуры, включая скирмионные (SK) и спиральные состояния (SP), ферромагнитные конфигурации (FM) и доменные стенки (DW), которые возникают в результате конкуренции нескольких взаимодействий.

Для прогноза наблюдения указанных фаз в реальных магнетиках в модельном гамильтониане наряду с обменным взаимодействием, взаимодействием Дзялошинского–Мория и внешним магнитным полем следует учитывать влияние магнитокристаллической анизотропии:

$$H = -J \sum_{<i,j>} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - D \sum_{<i,j>} [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - \\ - K \sum_i (S_i^z)^2 - h \sum_i S_i^z, \qquad (1)$$

где $J > 0$ – константа обменного взаимодействия между соседними спинами в рамках классической модели Гейзенберга, $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – трехмерный вектор спина в i-м узле квадратной решетки $L \times L$, L – линейный размер, h – внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси z, D – коэффициент взаимодействия Дзялошинского–Мория, K – коэффициент одноосной анизотропии, сонаправленный внешнему полю. Значения параметров задаются в единицах интеграла обменного взаимодействия.

На рисунке 1 представлена схема нейронной сети [4] для поиска основного состояния системы, описываемой гамильтонианом (1). В качестве входных параметров в нейронную сеть передается матрица X размера $[n_b, m]$, где n_b – число спиновых конфигураций в наборе, $m = L \times L \times 3$ – количество значений проекций всех спинов в заданной конфигурации (S_i^x, S_i^y, S_i^z). При обработке на выравнивающем слое сети спиновые конфигурации преобразуются в вектора размера m, которые далее проходят через два полносвязных слоя. Первый полносвязный слой

[1)]e-mail: lixtnerdiana@gmail.com

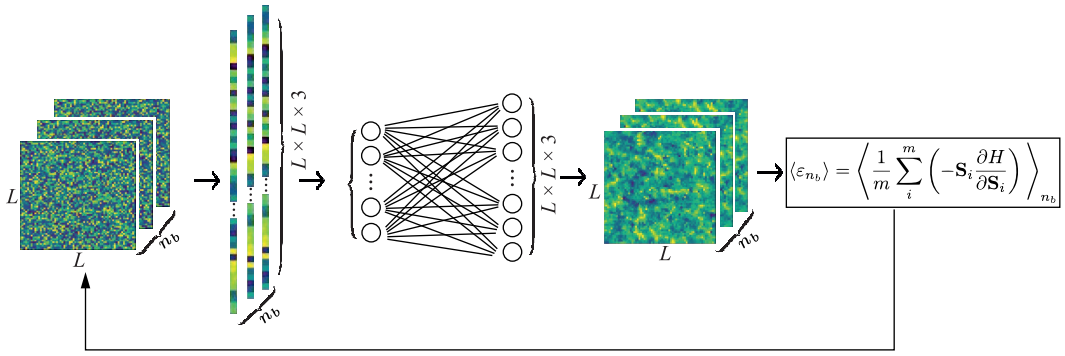

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема поиска основного состояния системы

(256 нейронов) извлекает признаки высокого уровня. Второй полносвязный слой размера m проецирует признаки в пространство исходной размерности. В полученном тензоре осуществляется нормировка всех спинов на единицу. Далее происходит вычисление функции потерь, в качестве которой выступает энергия системы, и осуществляется статистическое усреднение по набору спиновых конфигураций. Рассматриваемая функция потерь (2) основана на оценке плотности энергии, усредненной по набору спиновых конфигураций. Для каждой конфигурации вычисляется локальный вклад в энергию через скалярное произведение спина и эффективного поля.

$$\langle \varepsilon_{n_b} \rangle = \left\langle \frac{1}{m} \sum_i^m \left(-\mathbf{S}_i \frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}_i} \right) \right\rangle_{n_b}. \tag{2}$$

Для минимизации функции потерь (2) необходимо найти спиновую конфигурацию, при которой эффективное поле $\mathbf{h}_{\text{eff},i}$ обращается в нуль в каждом узле решетки.

$$\mathbf{h}_{\text{eff},i} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}_i} = 0. \tag{3}$$

В исследованиях спиновой динамики и магнитных доменов часто используется схема эффективного поля [4]. Вычисленная в рамках этой схемы полная энергия математически эквивалентна полной энергии, найденной напрямую из уравнения (2).

Нейронная сеть была реализована на основе платформы машинного обучения TensorFlow [7]. В процессе обучения в объект GradientTape записываются все операции прямого прохода: операция нормировки, проход через полносвязные слои и вычисление функции потерь. Метод gradient автоматически вычисляет градиенты функции потерь по всем обучаемым параметрам модели. Важно отметить, что в отличие от широко используемых моделей нейронных сетей, для вычисления функции потерь в этой работе метод градиента для спиновых конфигураций задавался явно, в противном случае процесс обучения не будет соответствовать физике, задаваемой спиновым гамильтонианом (1). Указанный метод в дальнейшем используется оптимизатором Adam [8] для обновления весов нейросети. Процесс обучения повторяется итеративно для достижения минимума системы и генерации спиновых конфигураций основного состояния. После обучения генерируются тестовые конфигурации. Визуализация спиновых конфигураций на рис. 2 представляет из себя векторное представление спинов в плоскости $\{S_i^x, S_i^y\}$ с цветовой картой по $\{S_i^z\}$.

Для выявления новых спиновых фаз в основном состоянии необходимо проводить анализ полученных спиновых конфигураций. Количественной характеристикой этого процесса служит зависимость приведенной энергии $\varepsilon = E/N$ от числа эпох на рис. 3. Значение энергии сходится на протяжении первых 500 эпох, затем выходит на плато при значениях $\varepsilon \approx -2J$, что указывает на достижение основного состояния моделируемой спиновой структуры.

Визуализация эволюции системы представлена на рис. 2. В начальный момент (a) наблюдается случайное распределение $\{S_i^z\}$. В процессе обучения нейронной сети происходит постепенная самоорганизация спиновой конфигурации: на этапе 500 эпох (b) начинают формироваться зародышевые топологические структуры, к 1000 эпохам (c) проявляется четкая доменная структура. Наблюдаемая эволюция системы подтверждает корректность работы алгоритма и его способность находить энергетически выгодные состояния в заданной области параметров.

Гиперпараметры полносвязной нейронной сети приведены в табл. 1. Обучение нейронной сети проводилось для двумерной спиновой системы с линейным размером $L = 64$. Было выбрано оптимальное коли-

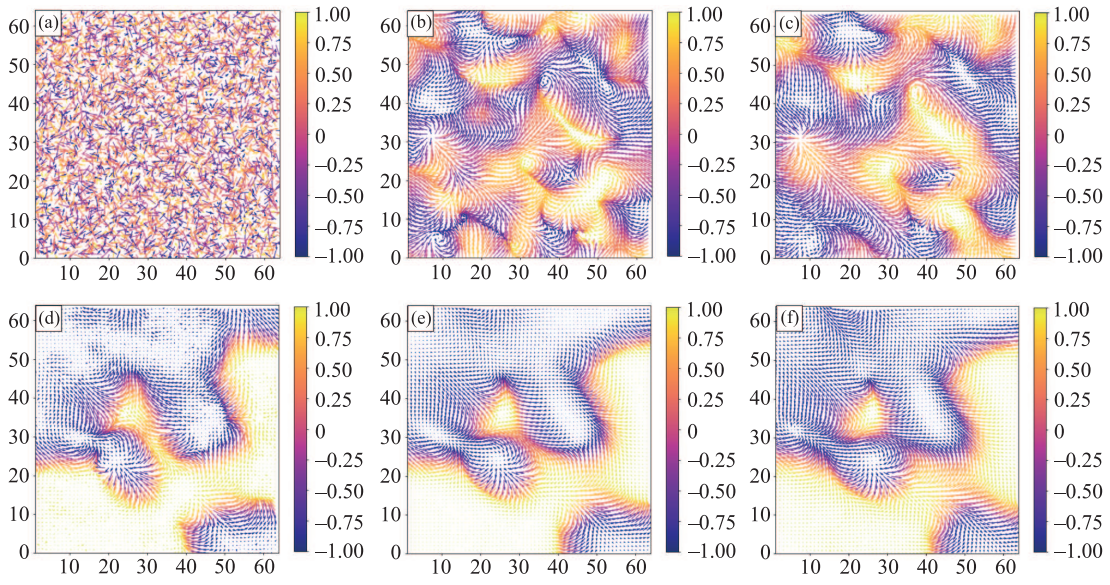

Рис. 2. (Цветной онлайн) Эволюция системы в процессе обучения, представленная изменением спиновой конфигурации для заданного количества эпох: (a) – 0; (b) – 500; (c) –1000; (d) – 1500; (e) – 2000; (f) – 2500

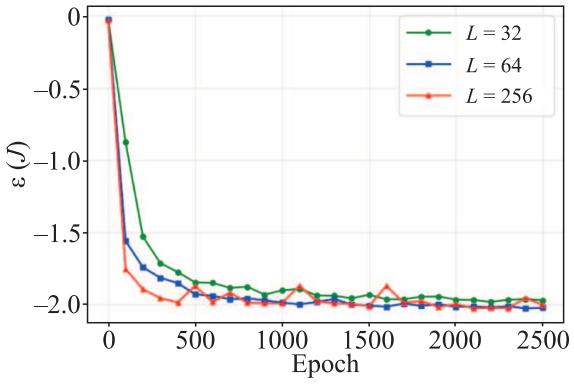

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость плотности энергии ε от числа эпох обучения (Epoch) для линейных размеров решетки $L = 32, 64, 256$

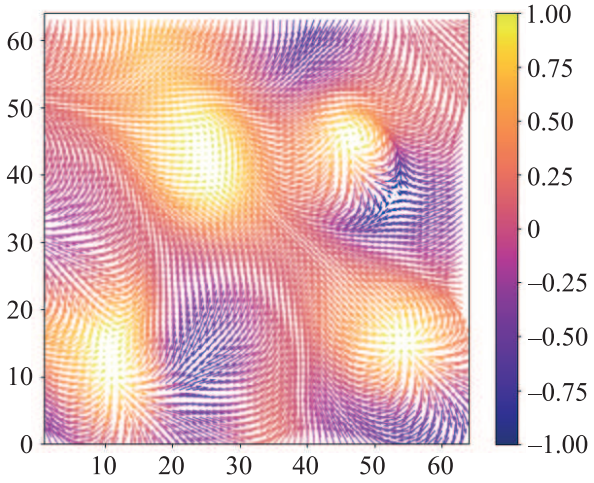

Рис. 4. (Цветной онлайн) Скримионная фаза, полученная при моделировании без учета влияния одноосной анизотропии при $K = 0$. Векторное представление спинов в плоскости $\{S_i^x, S_i^y\}$, цвет стрелок соответствует величине $\{S_i^z\}$

чество эпох обучения, равное 2500. Число спиновых конфигураций $n_b = 32$. Значения параметров коэффициента Дзялошинского–Мория $D = 0.1$ и внешнего поля $h = 0.01$ выбирались в соответствии с областью фаз, исследованной в работе [9]. На входной слой в режиме предсказания подается случайная высокотемпературная спиновая конфигурация $L \times L \times 3$, нормированная для каждого спина и преобразованная в вектор указанной длины.

При моделировании системы без учета влияния одноосной анизотропии были получены спиновые состояния, которые совпадают с результатами, представленными в работе [9]. На рисунке 4 представлена скирмионная фаза, полученная при моделировании без учета влияния одноосной анизотропии при $K = 0$, что подтверждается характерным радиальным распределением $\{S_i^z\}$. Полученное соответствие подтверждает корректность предложенного нами подхода на основе нейронных сетей для определения основного состояния киральных магнетиков.

Учет влияния эффектов анизотропии даже при относительно малом значении параметра K может приводить к выявлению новых фаз и спиновых состояний. Выбор значения параметра K определяется особенностями рассматриваемой кристаллической структуры [10–12]. В данной работе было использо-

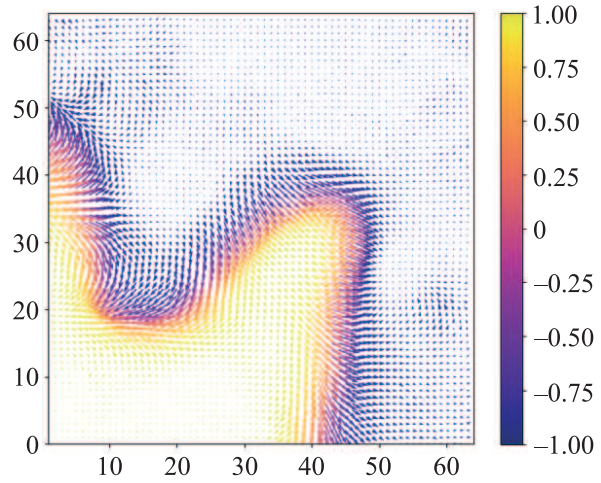

Рис. 5. (Цветной онлайн) Фаза доменных стенок, полученная при моделировании с учетом влияния одноосной анизотропии при $K = 0.07$

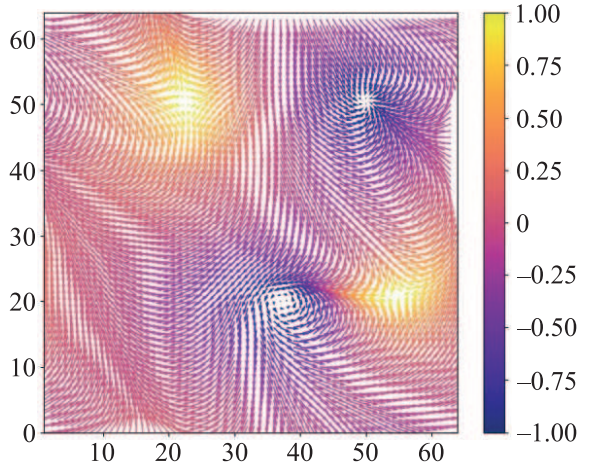

Рис. 6. (Цветной онлайн) Скирмионная фаза, полученная при моделировании методами Монте-Карло с учетом влияния одноосной анизотропии $K = 0.07$, $D = 0.3$, $h = 0.0$

вано значение анизотропии $K = 0.07$, соответствующее системе атомов кобальта, адсорбированных на поверхности Pt(111) [11].

Таблица 1. Гиперпараметры полносвязной нейронной сети

Parameter	Value
System size	32, 64, 256
Activation function	tanh
Optimizer	Adam
Number of epochs	2500
Batch size	32
Learning rate	0.001
Dropout	not used

Учет эффектов отличной от нуля анизотропии приводит не только к изменению значений D и h, при которых наблюдаются выявленные спиновые фазы, но и возникает новая фаза со спиновыми возбуждениями типа доменных стенок.

В работах [12–14] было показано, что при больших значениях константы анизотропии эффекты конкуренции различных типов анизотропии и дальнодействующего диполь-дипольного взаимодействия приводят к появлению страйпов и доменных стенок. В киральных магнетиках эффекты конкуренции анизотропии с взаимодействием Дзялошинского–Мория и при достаточно малых значениях параметра D приводят к формированию фазы доменных стенок. Анализ спинового состояния, представленного на рис. 5, показывает, что одноосная анизотропия приводит к разбиению системы на области с противоположно направленными спинами.

В работе было проведено сопоставление спиновых конфигураций, полученных нейронной сетью и классическим односпиновым методом Монте-Карло. Классическое моделирование осуществлялось в рамках алгоритма Метрополиса со следующими параметрами: время релаксации – 20 000 шагов Монте-Карло (MCS), на статистическое усреднение – 20 000 MCS, время корреляции – 20 MCS. Спиновые состояния, полученные при моделировании классическим методом Монте-Карло, рис. 6 и 7, подтверждают результаты нейронной сети.

Для выявленных спиновых фаз в работе был проведен расчет топологического заряда Q, который характеризует степень топологической нетривиальности спиновой конфигурации. Значение $Q = 0$ соответствует ферромагнитному состоянию, $Q = \pm 1$ – изолированному скирмиону, $Q = \pm 2$ – бискирмиону.

В настоящей работе топологический заряд вычислялся двумя методами. Первый метод основан на непрерывном определении топологического заряда, где производные $\partial\mathbf{m}\backslash\partial x$ и $\partial\mathbf{m}\backslash\partial y$ аппроксимировались методом конечных разностей, после чего топологическая плотность суммировалась по всей решетке:

$$Q_{\text{cont}} = \frac{1}{4\pi} \iint \mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \right) dx\, dy. \qquad (4)$$

Второй метод использует дискретное выражение для топологического заряда, предложенное в работе Берга и Люшера [15]. В рамках этого подхода вклад в заряд определяется ориентацией тройки спинов на каждом элементарном треугольнике решетки:

$$Q_{\mathrm{BL}} = \frac{1}{8\pi} \sum_{\langle ijk \rangle} \mathbf{m}_i \cdot [\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_k]. \qquad (5)$$

Без учета влияния анизотропии был проведен расчет значений топологического заряда в зависимости от отношения h/D. Представленные на рис. 8 и 9 значения согласуются с результатами, представленными в работе [16]. Для скирмионной конфигурации, полученной при значении анизотропии $K = 0$, оба метода дают значение топологического заряда $|Q| = 1.000(7)$. Рассчитанное значение близко к ожидаемому значению $Q = \pm 1$, характерному для идеального изолированного скирмиона, и малые отклонения от единицы свидетельствуют о наличии деформаций в структуре скирмиона.

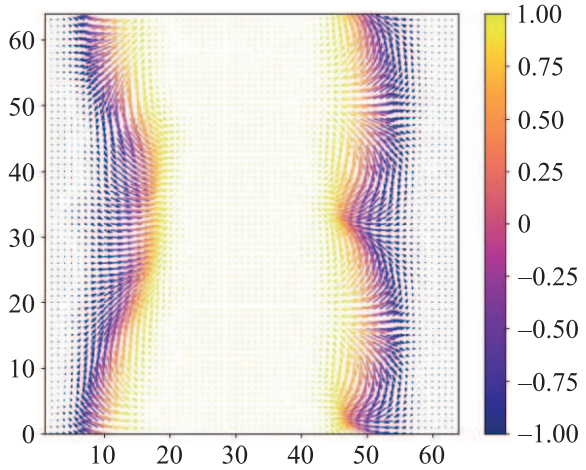

Рис. 7. (Цветной онлайн) Фаза доменных стенок, полученная при моделировании методами Монте-Карло с учетом влияния одноосной анизотропии $K = 0.07$, $D = 0.05$, $h = 0.0$

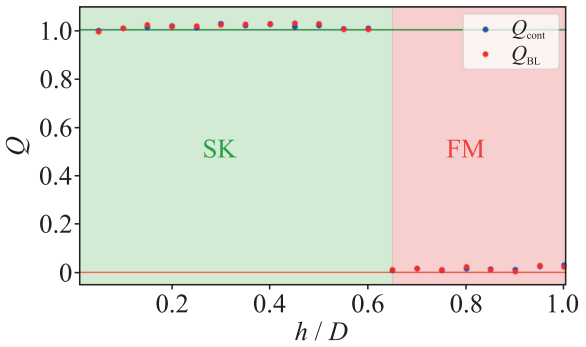

Рис. 8. (Цветной онлайн) Значения топологического заряда $Q(h/D)$ для случая $K = 0$. Статистическая погрешность меньше размера символа

В различных магнитных фазах были получены характерные значения топологического заряда. В ферромагнитной фазе заряд равен $|Q| = 0.000(1)$. В спиральной фазе получено значение $|Q| = 0.006(2)$, близкое к нулю, что подтверждает отсутствие глобальной топологической структуры. Для конфигураций с доменными стенками среднее значение составляет $|Q| = 0.506(1)$. Нецелые значения Q для состояния доменных стенок соответствуют теоретическим ожиданиям о топологическом заряде неизолированного возбуждения [17]. Сравнение вычисленных значений заряда с теоретически ожидаемыми результатами для ферромагнитного и скирмионного состояний демонстрирует высокую точность предложенного метода.

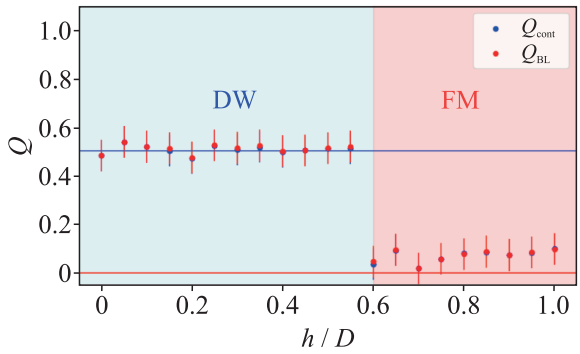

Рис. 9. (Цветной онлайн) Значения топологического заряда $Q(h/D)$ для $K = 0.07$

Для автоматической классификации магнитных фаз был разработан классификатор на основе сверточной нейронной сети. Гиперпараметры данной нейронной сети приведены в табл. 2. Классификатор обучался на размеченном наборе данных, содержащем изображения спиновых конфигураций четырех типов: ферромагнитная фаза, спиральная фаза, скирмионная решетка и доменные стенки. Нейронная сеть автоматически извлекает характерные признаки из визуального представления спиновых конфигураций и определяет ее принадлежность к одному из четырех классов. Обученная модель демонстрирует высокую точность классификации и используется для построения фазовых диаграмм. В переходных областях, где конфигурация классифицировалась как смешанная, положение границы фаз определялось по большинству статистически независимых запусков. Фаза, соответствующая меньшему числу статистических конфигураций, считалась метастабильной. В переходной области шаг изменения параметров уменьшался вдвое.

В работе [9] была построена фазовая диаграмма в координатах коэффициента взаимодействия Дзялошинского–Мория D и внешнего магнитного по-

Таблица 2. Гиперпараметры сверточной нейронной сети

Parameter	Value
Input layer	$L \times L \times 3$
Optimizer	Adam
Loss function	SparseCategoricalCrossentropy
Batch size	32
Number of epochs	50
Activation function	ReLU

ля без учета анизотропии ($K = 0$). Разработанный в настоящей работе классификатор позволяет строить фазовые диаграммы с учетом влияния анизотропии K. Полученная фазовая диаграмма для случая $K = 0$ (рис. 10) хорошо согласуется с результатами, представленными в работе [9].

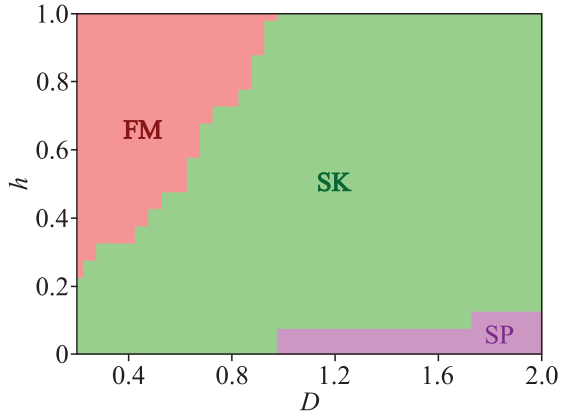

Рис. 10. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма без учета анизотропии $K = 0$

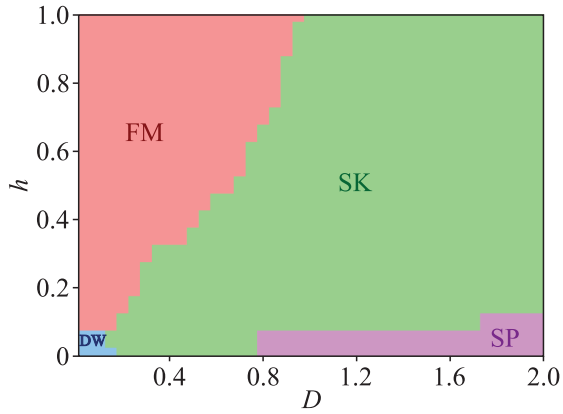

Рис. 11. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма с учетом влияния анизотропии $K = 0.07$

Фазовая диаграмма, построенная для случая $K = 0.07$ (рис. 11), демонстрирует четкое разделение областей устойчивости различных магнитных фаз. Помимо традиционных магнитных фаз, ферромагнитной, спиральной и скирмионной, на диаграмме выделена область доменных стенок. Домены представляют из себя метастабильные образования, разделяющие области с противоположной намагниченностью.

Сравнение фазовых диаграмм при $K = 0$ и $K = 0.07$ показывает существенное влияние одноосной анизотропии на стабильность магнитных фаз. Введение анизотропии приводит к сокращению области существования скирмионной фазы и появлению области доменных стенок. Эффекты анизотропии подавляют киральные структуры, способствуя формированию доменов.

На рисунке 12 представлено сравнение фазовых диаграмм для двух значений анизотропии. При $K = 0.07$ (рис. 12a) область доменных стенок ограничена. При увеличении анизотропии до $K = 0.1$ (рис. 12b) эта область расширяется, что говорит об усилении влияния анизотропии на магнитную структуру.

В данной работе методы машинного обучения были применены для поиска конфигураций основного состояния двумерной спиновой системы. Полносвязная нейронная сеть позволила получать устойчивые спиновые конфигурации, включая топологически нетривиальные состояния, при варьировании параметров D, h и K. Рассчитанные значения топологического числа $Q(h, D)$ для различных фаз соответствуют теоретически ожидаемым значениям, что подтверждает эффективность алгоритма.

Благодаря разработанному классификатору на основе сверточной нейронной сети были построены фазовые диаграммы в координатах D и h. Данные диаграммы показали, что при варьировании параметров система реализует четыре характерные магнитные фазы: скирмионную решетку, ферромагнитное состояние, доменные стенки и спиновую спираль. Была определена область параметров на фазовой диаграмме, при которых с учетом анизотропии происходит возникновение фазы доменных стенок. Благодаря полученным фазовым диаграммам для $K = 0.07$ и $K = 0.1$ был сделан вывод о том, что увеличение параметра анизотропии приводит к расширению области доменных стенок.

Полученные результаты демонстрируют, что методы машинного обучения позволяют эффективно исследовать магнитные фазы и строить фазовые диаграммы для анизотропных киральных магнетиков.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рам-

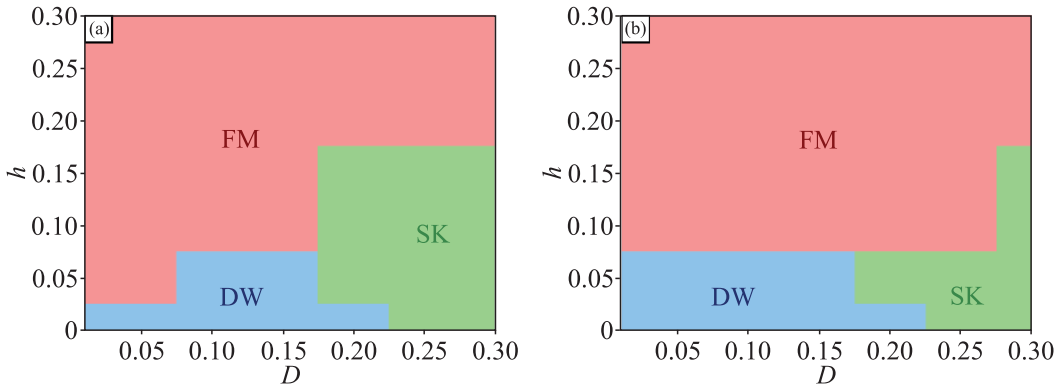

Рис. 12. (Цветной онлайн) Сравнение фазовых диаграмм для различных значений анизотропии: (a) – $K = 0.07$; (b) – $K = 0.1$

ках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0039).

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

1. W. Hu, R. R. P. Singh, and R. T. Scalettar, "Discovering phases, phase transitions, and crossovers through unsupervised machine learning: A critical examination", Phys. Rev. E **95**, 062122 (2017).
2. S. J. Wetzel, "Unsupervised learning of phase transitions: From principal component analysis to variational autoencoders", Phys. Rev. E **96**, 022140 (2017).
3. J. Carrasquilla and R. G. Melko, "Machine learning phases of matter", Nat. Phys. **13**, 431 (2017).
4. H. Y. Kwon, N. J. Kim, C. K. Lee, and C. Won, "Searching magnetic states using an unsupervised machine learning algorithm with the Heisenberg model", Phys. Rev. B **99**, 024423 (2019).
5. R. E. Camley and M. Krawczyk, "Consequences of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction", J. Phys. Condens. Matter **35**, 123001 (2023).
6. J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart, A. Thiaville, and A. Fert, "From Early Theories of Dzyaloshinskii-Moriya Interactions", Nat. Nanotechnol. **8**, 839 (2013).
7. M. Abadi, P. Barham, J. Chen et al. (Collaboration), "TensorFlow: A system for large-scale machine learning", in Proceedings of the 12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 16), USENIX Association, Berkeley, CA, USA (2016), p. 265; arXiv:1605.08695.
8. D. P. Kingma and J. L. Ba, "Adam: A method for stochastic optimization", in 3rd International Conference on Learning Representations, San Diego, CA, USA (2015); arXiv:1412.6980.
9. I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, and V. V. Mazurenko, "Supervised learning approach for recognizing magnetic skyrmion phases", Phys. Rev. B **97**, 184415 (2018).
10. K. Shibata, X. Z. Yu, T. Hara, D. Morikawa, N. Kanazawa, K. Kimoto, S. Ishimaru, and Y. Tokura, "Towards control of the size and helicity of skyrmions in helimagnetic alloys by spin–orbit coupling", Nat. Nanotechnol. **8**, 723 (2015).
11. P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malmesbury, S. Rusponi, P. Ohresser, W. Eberhardt, C. Carbone, and K. Kern, "Ferromagnetism in one-dimensional monatomic metal chains", Nature **416**, 301 (2003).
12. J. M. D. Coey, "Hard Magnetic Materials: A Perspective", IEEE Trans. Magn. **47**, 4671 (2011).
13. S. A. Pighin, O. V. Billoni, D. A. Stariolo, and S. A. Cannas, "Domain walls, canted states and stripe width variation in ultrathin magnetic films with perpendicular anisotropy", Phys. Rev. B **80**, 054405 (2009).
14. Y. Z. Wu, C. Won, A. Scholl, A. Doran, H. W. Zhao, X. F. Jin, and Z. Q. Qiu, "Magnetic Stripe Domains in Coupled Magnetic Sandwiches", Phys. Rev. Lett. **93**, 117205 (2004).
15. B. Berg and M. Lüscher, "Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice O(3) σ-model", Nucl. Phys. B **190**, 412 (1981).
16. V. V. Mazurenko, I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, and M. I. Katsnelson, "Estimating Patterns of Classical and Quantum Skyrmion States", J. Phys. Soc. Jpn. **92**, 044001 (2023).
17. I. Lemesh and G. S. D. Beach, "Twisted domain walls and skyrmions in perpendicularly magnetized multilayers", Phys. Rev. B **98**, 104402 (2018).