

DOI: 10.21122/2220-9506-2026-17-1-77-86

Машинное обучение в расшифровке начального взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью

И.А. Морозов

Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук,
ул. Академика Королёва, 1, г. Пермь 614013, Россия

Поступила 30.10.2025

Принята к печати 09.02.2026

Достоверное определение начала контакта зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью в силовых измерениях необходимо для изучения структурных и физико-механических свойств материалов. В экспериментах в воздушной среде переход от бесконтактного взаимодействия к контактному сопровождается резким ускоренным движением острия к поверхности. В случае деформируемой поверхности высокая скорость изгиба кантилевера на участке бесконтактного взаимодействия, с одной стороны, и относительно низкая частота записи данных атомно-силового микроскопа, с другой стороны, не позволяют определить начало контакта из эксперимента, опираясь на характерные точки силовой кривой. Для решения этой проблемы предлагается использовать алгоритмы машинного обучения, «натренированные» на решении множества модельных задач. Взаимодействие острия с поверхностью моделировали гармоническим осциллятором, варьируя параметры зонда, материала и динамические условия эксперимента. Использование разработанных алгоритмов продемонстрировано на примере обработки результатов индентирования полиэтилена. Полученные контактные отклонения не совпадают с имеющимися точками экспериментальных кривых.

Ключевые слова: атомно-силовая микроскопия, индентирование, контакт, машинное обучение

Адрес для переписки:

Морозов И.А.
Институт механики сплошных сред УО РАН,
ул. Академика Королёва, 1, г. Пермь 614013, Россия
e-mail: imorozov@icmm.ru

Address for correspondence:

Morozov Ilya A.
Institute of Continuous Media Mechanics, Ural Branch of the Russian
Academy of Sciences,
Academician Korolev str., 1, Perm 614013, Russia
e-mail: imorozov@icmm.ru

Для цитирования:

И.А. Морозов.
Машинное обучение в расшифровке начального взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью.
Приборы и методы измерений.
2026. Т. 17. № 1. С. 77–86.
DOI: 10.21122/2220-9506-2026-17-1-77-86

For citation:

Ilya A. Morozov.
Machine Learning in Understanding the Initial Interaction of the Atomic Force Microscope Probe with the Surface.
Devices and Methods of Measurements.
2026;17(1):77–86. (In Russ.).
DOI: 10.21122/2220-9506-2026-17-1-77-86

DOI: 10.21122/2220-9506-2026-17-1-77-86

Machine Learning in Understanding the Initial Interaction of the Atomic Force Microscope Probe with the Surface

Ilya A. Morozov

*Institute of Continuous Media Mechanics,
Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
Academician Korolev str., 1, Perm 614013, Russia*

Received 30.10.2025

Accepted for publication 09.02.2026

Abstract

Reliable determination of the tip-surface contact in atomic force microscopy measurements is necessary for structural and physico-mechanical analysis of the surface properties. Transition from non-contact interaction to contact one during experiments in air environment is accompanied by a rapid jump of the tip to the surface. High velocity of the tip movement in the area of non-contact interaction and the relatively low rate of the atomic force microscopy data capture do not allow determining of the onset of contact from the points of the force curve especially in the case of a deformable surface. The proposed solution is to use machine learning algorithms trained on model results. The interaction of the tip with the surface was modeled using a harmonic oscillator varying parameters of the probe, the material, and the experiment. As a result deflection of the probe in the moment of contact is predicted using input experimental parameters. Use of the developed algorithms is demonstrated by treating the results of the indentation of polyethylene. The obtained contact deflections are significantly differ from the available points of the experimental curves.

Keywords: atomic force microscopy, indentation, contact, machine learning

Адрес для переписки:

Морозов И.А.
Институт механики сплошных сред УО РАН,
ул. Академика Королёва, 1, г. Пермь 614013, Россия
e-mail: imorozov@icmm.ru

Address for correspondence:

Morozov Ilya A.
Institute of Continuous Media Mechanics, Ural Branch of the Russian
Academy of Sciences,
Academician Korolev str., 1, Perm 614013, Russia
e-mail: imorozov@icmm.ru

Для цитирования:

И.А. Морозов.
Машинное обучение в расшифровке начального взаимодействия
зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью.
Приборы и методы измерений.
2026. Т. 17. № 1. С. 77–86.
DOI: 10.21122/2220-9506-2026-17-1-77-86

For citation:

Ilya A. Morozov.
Machine Learning in Understanding the Initial Interaction
of the Atomic Force Microscope Probe with the Surface.
Devices and Methods of Measurements.
2026;17(1):77–86. (In Russ.).
DOI: 10.21122/2220-9506-2026-17-1-77-86

Введение

Точка контакта зонда атомно-силового микроскопа (АСМ) с поверхностью влияет на все последующие определяемые свойства материала: рельеф поверхности и структуру подповерхности неоднородных материалов [1–3], их физико-механические свойства [3–5].

Согласно теореме Котельникова (Найквиста–Шеннона), непрерывный сигнал может быть полностью восстановлен из дискретного только в том случае, если частота дискретизации вдвое выше частоты исходного сигнала. Ограниченная частота записи АСМ-данных и высокая скорость изгиба кантилевера на участке бесконтактного взаимодействия при сближении зонда с поверхностью не позволяют достоверно определить момент контакта острия с мягким материалом при исследовании в среде с малой вязкостью (обычно, воздух) [6]. Известны работы, где начало контакта является дополнительной неизвестной константой [7]; в задачах микроиндентирования использование производной позволяет избавиться от необходимости определения начала контактного взаимодействия [8]. На практике в подавляющем большинстве случаев задач АСМ-индентирования за точку контакта принимают начало отклонения кантилевера к поверхности [9] либо момент смены направления изгиба кантилевера (минимум отклонения на прямом ходе, *jump-in*). В последнем случае, однако, поверхность уже может быть деформирована за счёт сил инерции и адгезии на глубину до нескольких нанометров. Наиболее рациональным представляется принятие за точку контакта в эксперименте по АСМ-индентированию отклонения, соответствующего абсолютному максимуму скорости изгиба кантилевера [6], однако и этот способ в большинстве случаев не позволяет точно определить начало контактного взаимодействия.

Недостающие данные экспериментальной кривой взаимодействия могут быть получены при помощи «натренированных» алгоритмов машинного обучения. Машинное обучение (МО) – класс методов искусственного интеллекта, характерной чертой которого является не прямое решение задачи, а предсказание результата на основе предварительно проведённого обучения (решение множества подобных задач). Применение МО в области

сканирующей зондовой микроскопии началось со второй половины 1990-х гг. [10]. Лавинообразный скачек публикаций наблюдается с начала 2020 года. Большое количество работ посвящено использованию МО в первичной обработке [11, 12] и анализе [13–15] микроизображений. Известны работы в области МО и обработки силовых кривых индентирования: определение механических свойств [16, 17], определение точки контакта АСМ-зонда с поверхностью при исследовании в жидкости [18], переход к кривым напряжение-деформация [16, 19].

В настоящей работе точка начала контакта определялась с применением модели МО, «натренированной» на модели гармонического осциллятора. Помимо параметров зонда, эксперимента и материала, в модель входила и частота записи АСМ-данных. Предложенный подход использован для обработки результатов быстрого индентирования – массивов силовых кривых, полученных на неоднородном полимере – полиэтилене.

Эксперимент

Демонстрация работы методик показана на примере исследования поверхности полиэтилена. Известно, что этот полимер имеют развитую ламеллярную структуру, которая скрыта внешним поверхностным низкомолекулярным слоем.

В работе использовали АСМ Ntegra Prima в режиме быстрого индентирования Hybrid 3.0: скорость V_z сближения – 5 мкм/с, максимальное усилие – ≈ 10 нН, частота записи данных – 31,2 кГц. Применяли зонды CSG30 с калиброванными радиусом острия R и жёсткостью k : $R = 35$ нм, $k = 0,8$ Н/м; резонансная частота $\omega_0 = 55$ кГц. Радиус острия калибровали методом слепого восстановления (использовали тестовые структуры TGT1), жёсткость – методом тепловых колебаний.

С каждого материала были получены наборы силовых кривых $d(z)$ – зависимости изгиба d кантилевера от вертикального перемещения z сканера с высоким разрешением в плоскости xy (шаг сканирования ≈ 10 нм). Типичная кривая индентирования полиэтилена представлена на рисунке 1. Перемещение $z(t)$ изменяется по линейному закону со скоростью V_z . Обработку силовых кривых проводили собственными алгоритмами.

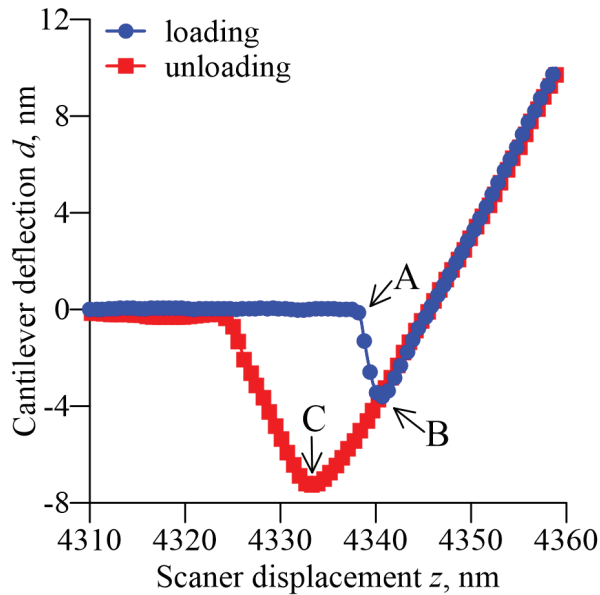


Рисунок 1 – Типичная кривая контактного взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью полиэтилена. Характерные точки, используемые в обсуждении: А – начало отклонения зонда к поверхности; В – завершение скачка зонда; С – отлипание зонда от поверхности на обратном ходе

Figure 1 – A typical contact interaction curve of the atomic force microscope tip with the surface of polyethylene. Characteristic points used in the discussion: A – beginning of the probe deflection to the surface; B – jump-in point; C – detachment of the tip from the surface

Наблюдаемый рельеф поверхности зависит от приложенной нагрузки. Высота рельефа h при отклонении d^* кантилевера вычисляется: $h(x, y, d^*) = -(z(x, y, d^*) - \min(h(d^*)))$. Например, чтобы определить рельеф, соответствующий усилию в момент завершения скачка зонда к поверхности (точка В на рисунке 1), нужно использовать значения z с силовых кривых, соответствующие $d^* \equiv d_B$.

Модель взаимодействия зонда с материалом

При исследовании участка начального взаимодействия зонда с материалом используется модель гармонического осциллятора: $m\ddot{d} + \alpha\dot{d} + kd = F_{tot}$, где d – изгиб; m – эффективная масса, $m = k/(2\pi\omega)^2$; k и ω – соответственно жёсткость и первая резонансная частота кантилевера.

Коэффициент демпфирования α вычисляется, используя выражение для балки [20]:

$$\alpha = \eta_0 LW^3/H^3,$$

где H – расстояние между поверхностями образца и кантилевера, $H = H_{tip} + h$, H_{tip} – высота пирамидального острия ($H_{tip} = 15$ мкм), h – изменение зазора (рисунок 2а); η_0 – вязкость воздуха ($1,98 \times 10^{-5}$ Па·с); L и W – длина и ширина кантилевера. Вблизи поверхности $h \ll H_{tip}$, поэтому $\alpha \approx \eta_0 LW^3/H_{tip}^3$.

В задаче индентирования поверхность движется к острию с постоянной скоростью V_z . Расстояние h между острием и поверхностью: $h(t) = h_0 - z + d(t)$, где h_0 – начальный зазор (в модели $h_0 = 40$ нм); $z = V_z t$.

F_{tot} – внешние силы, действующие со стороны поверхности. На участке бесконтактного взаимодействия, когда зазор больше равновесного расстояния a_0 , внешней силой является ван-дер-ваальсово притяжение: $F_{tot} = F_{vdw}$ при $h > a_0$. В воздушной среде поверхности зонда и материала обычно покрыты плёнкой жидкости. Наличие на поверхности жидкой плёнки вызывает дополнительное смещение острия в сторону поверхности в момент контакта острия с поверхностью жидкости. Ни в одном из проведённых экспериментов такого явления не выявлено. Поэтому, учитывая невысокую относительную влажность ($\approx 25\%$) в экспериментах, жидкой плёнкой можно пренебречь.

Вблизи поверхности, но вне контакта действует сила адгезии: $F_{tot} = F_{adh}$ при $h \leq a_0$. Контактное взаимодействие при $h \leq 0$ (рисунок 2b) в настоящей работе представлено качественно для полноты демонстрации работы модели и детально не рассмотрено.

Сила Ван-дер-Ваальса между плоскостью и сферой радиуса R при $h > a_0$ (для полимеров $a_0 \approx 0,5$ нм) вычисляется:

$$F_{vhw} = -\frac{2A_{ts}R^3}{3h^2(h+2R)^2},$$

где A_{ts} – параметр взаимодействия (константа Гамакера) между острием и поверхность в среде. На меньшем расстоянии между поверхностями действует адгезия, которую вычисляем по модели Дерягина–Мюллера–Топорова: $F_{vhw} = -\frac{A_{ts}R}{6a_0^2}$

при $h \leq a_0$. Определение константы взаимодействия является отдельной нетривиальной проблемой. В настоящей работе для оценки A_{ts} используем усилие F_{adh} в момент отлипания

зонда от поверхности (экспериментальная кривая обратного хода зонда, см. рисунок 1 – точка С): $F_{adh} = F_{vdw}$; отсюда: $A_{ts} = 6a_0^2 F_{adh} / R$.

Дифференциальное уравнение движения решается относительно d численно методом Эйлера с шагом интегрирования $\Delta t = 0,5$ нс. Начальные условия: $d(0) = 0$, $dd/dt = 0$.

Модель достаточно точно описывает скачок зонда к поверхности полимера (рисунок 2с), включая прохождение точки контакта с поверхностью и внедрение зонда в полимер. Отклонение кантилевера в момент контакта (при $h = 0$), вычисленное на основе модели, находится значительно выше, чем завершение

скачка зонда к материалу и не совпадает ни с одной из точек экспериментальной кривой. Это объясняется тем, что высокая скорость изгиба в окрестности поверхности и недостаточная частота записи данных не позволяют зафиксировать истинное начало контакта. То есть момент завершения скачка, а также ближайшие точки АСМ-кривой, соответствуют состоянию, когда острие уже внедрилось на некоторую глубину в мягкую поверхность. Можно показать, что в зависимости от параметров эксперимента [6], ошибка определения точки контакта может быть довольно существенной.

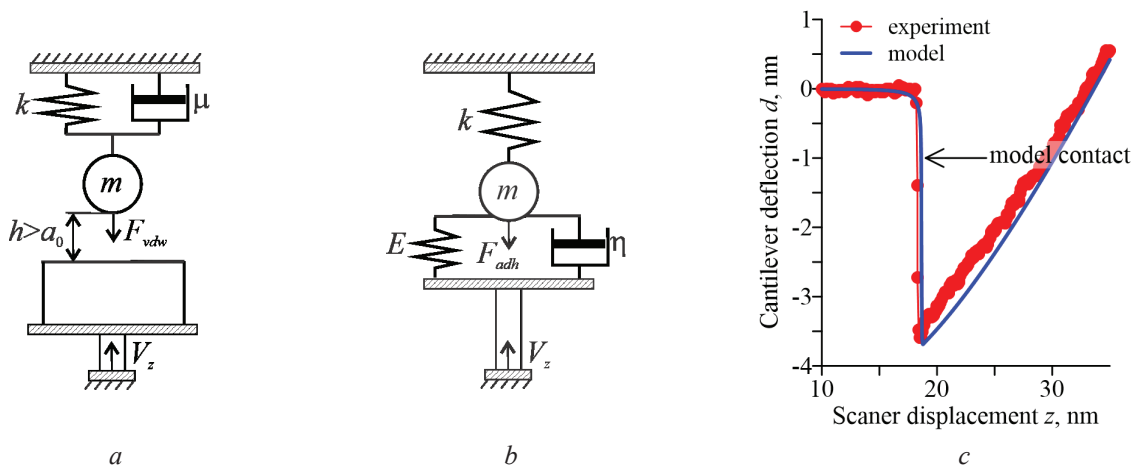


Рисунок 2 – Моделирование бесконтактного (а) и контактного (б) взаимодействия зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью. На (с) показан начальный участок взаимодействия зонда с поверхностью полимера [6]: расчёт в рамках модели и типичная экспериментальная кривая. Отмечен полученный из модели момент контакта острия с поверхностью

Figure 2 – Modeling of non-contact (a) and contact (b) interactions of the atomic force microscope probe with a surface; (c) the initial interaction of the probe with a polymer surface [6], calculation in the frame of the model, and a typical experimental curve. The moment of the tip-surface contact obtained from the model is marked

Машинное обучение

Обработка массивов силовых кривых требует многократных модельных вычислений, что занимает существенное время. Для определения отклонения в момент контакта предложено использовать методы МО, один раз «натренированные» на решении множества модельных задач. Варьировались радиус сферы R от 6 до 40 нм с шагом 2 нм, скорость сближения V_z от 1 до 20 мкм/с с шагом 1 мкм/с, константа взаимодействия A_{ts} (от 2 до 40) $\times 10^{-20}$ Дж с шагом $0,25 \times 10^{-20}$ Дж. Изменялись размеры кантилеверов L , W и T , используя номинальные значения стандартных прямоугольных зондов

производства TipsNano. Диапазон и шаг Δ изменения размеров, а также номинальная жёсткость зондов приведены в таблице.

Используя размеры из таблицы, вычисляли резонансную частоту ω и жёсткость k балки [21]:

$$\omega_0 = 0.1615 \frac{T}{L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad \text{и} \quad k = \frac{EWT^3}{2L^3},$$

где E и ρ – модуль упругости и плотность материала зонда (кремний). Предварительное исследование показало, что варьирование равновесного расстояния a_0 не оказывает влияния на измеренные отклонения d_c кантилевера в момент контакта с поверхностью, поэтому при моделировании фиксировали $a_0 = 0,5$ нм.

Таблица / Table

Номинальная жёсткость и варьируемые размеры (в мкм) кантилеверов

Nominal stiffness and sizes (in microns) of the cantilevers

зонд / параметр probe / parameter	k , Н/м k , N/m	$L_{\min} \dots L_{\max}$, Δ	$W_{\min} \dots W_{\max}$, Δ	$T_{\min} \dots T_{\max}$, Δ
CSG01	0.03	440...460, 5	40.5...54.5, 3.5	0.25...2.25, 0.5
CSG10	0.11	215...235, 5	40...52, 3.75	0.5...2.0, 0.35
CSG30	0.6	215...235, 5	18...32, 3.5	1.0...3.0, 0.5
NSG03	1.74	140...160, 5	17...31, 3.5	1.0...2.4, 0.35
FMG01	2.8	215...235, 5	20.5...35.5, 3.75	1.0...4.0, 0.5
NSG01	5.1	140...160, 5	19.5...34.5, 3.75	1.8...3.8, 0.5
NSG30	40	115...135, 5	22.5...37.5, 3.75	3.0...5.0, 1.0

Таким образом, данными для тренировки модели МО являются комбинации $\{V_z; A_{ts}; R; \omega_0; k\}$ и соответствующие им значения изгибов d_c в момент контакта, вычисленные с помощью модели. Общее число рассчитанных комбинаций параметров составило более 48 млн., что покрывает большинство ходовых зондов, материалов и скоростей индентирования.

Весь набор параметров был разделён на две части: обучающую и тестовую в соотношении 70:30. Первую часть использовали для тренировки алгоритма МО, вторую часть для верификации его работы. Использовали язык программирования Python. Наилучший алгоритм МО находили перебором среди доступных методов: нелинейная регрессия, нейронные сети, ансамблевые методы. Критерием сравнения служила среднеквадратическая разность M между фактическими значениями и предсказанными на тестовой выборке значениями.

Обсуждение результатов

Первичный анализ данных проводился с использованием коэффициента корреляции Спирмена s : чем ближе s к +1 или -1, тем сильнее прямая либо обратная связь между парой признаков; малый по модулю s указывает на отсутствие корреляции.

Анализ входных данных показал, что скорость V_z сближения имеет значимую корреляцию с d_c только в случае кантилеверов малой жёсткости (зонды типа CSG01): коэффициент корреляции Спирмена – 0,12. С увеличением жёсткости коэффициент корреляции снижается

от 0,08 (CSG10) до 0,0003 для зондов NSG30. То есть, исключение из параметров обучения модели V_z в случае жёстких зондов не окажет влияния на конечный результат. В настоящей работе исследовались модели МО, обученные как на полных, так и на неполных данных.

Наиболее точным алгоритмом, предсказывающем точку контакта, оказалось дерево решений (decision tree) – древовидная модель, основанная на принятии решений через последовательность логических операций. Средняя погрешность модели, обученной на полных данных, $M^{0.5} = 0,024$ нм. Результат верификации алгоритма показан на рисунке 3а: предсказанные и тестовые результаты практически ложатся на одну прямую. В рассматриваемой задаче использовались зонды CSG30, абсолютное значение изгиба кантилевера в максимуме скачка к поверхности (точка В на рисунке 1) не превышало 5 нм, поэтому ограничили выборку комбинациями $d_c > -10$ нм и $0,1 < k < 5$ Н/м. Такой набор параметров также охватывает с запасом значительный спектр экспериментов с полимерами. В этом случае получено небольшое улучшение точности обучения: $M^{0.5} = 0,017$ нм (результат верификации обрезанной модели показан на вставке рисунка 3а).

Было оценено, вариации каких параметров вносят наибольший вклад в ошибку предсказания. Для этого вычислялась абсолютная ошибка Δ между каждым предсказанным и тестовым значением: $\Delta_i = |d_{ci_pred} - d_{ci_test}|$ и определялся коэффициент корреляции Спирмена между Δ и $\{V_z, A_{ts}, R, k\}$. Оказалось, что ошибка предсказания слабо зависит от изменения скорости

сближения и радиуса острия (коэффициенты корреляции 0,03 и 0,05 соответственно; максимальная ошибка предсказания – 0,35 нм). Ошибка предсказания имеет обратную корреляцию с константой взаимодействия и жёсткостью кантилевера: коэффициенты корреляции -0,33 и -0,31, т. е. чем выше A_{ts} или k , тем ошибка предсказания меньше. Последнее продемонстрировано на рисунке 3b, где по-

строены зависимости средней ошибки от изменения A_{ts} и k . В целом, можно ожидать, что ошибка предсказания точки контакта для данного типа зондов (жёсткость от 0,1 до 5 Н/м) при самой неблагоприятной комбинации параметров не превышает 0,3 нм, что, учитывая, среднюю величину скачка таких зондов к поверхности в 3...4 нм (см. рисунок 1 и 2c), является удовлетворительным результатом.

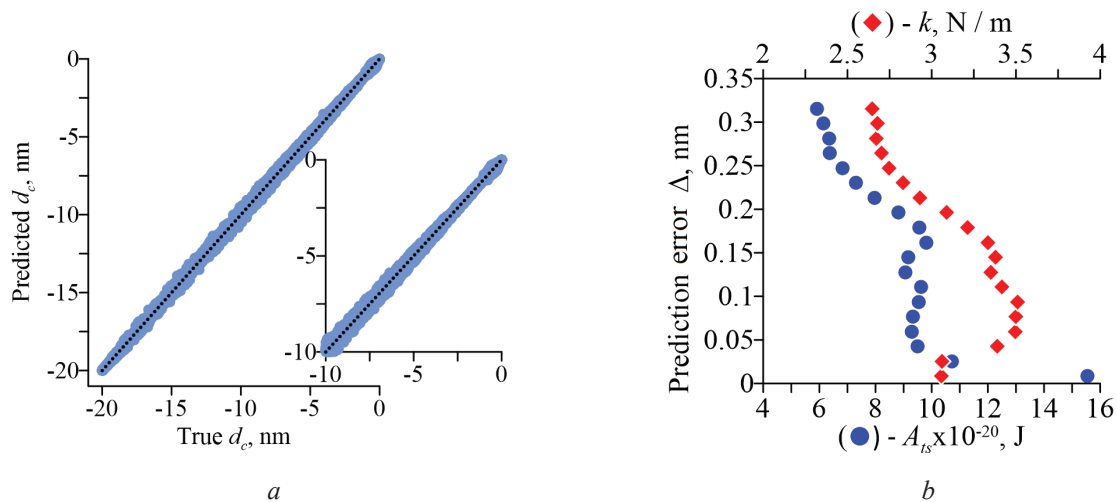


Рисунок 3 – Предсказанные моделью машинного обучения и проверочные отклонения зонда в точке контакта для модели, «натренированной» на полных и неполных данных (a); пунктиром показана прямая под углом в 45°, то есть предсказанные результаты довольно точно совпадают с проверочными данными. На (b) показана погрешность машинного обучения при вариации жёсткости балки и константы взаимодействия

Figure 3 – Predicted and test cantilever deflections at the contact point for a machine learning model trained on full and trimmed data (a); the dotted line goes at 45°, thus predicted results fit the test data quite well. The error of prediction for the variations of the cantilever stiffness and interaction constant is shown in (b)

Коэффициенты модели МО были сохранены в отдельный файл для удобства дальнейшей обработки экспериментальных АСМ-данных. Объём полученного файла полной модели в сжатом состоянии более 500 Мб. Ссылка на него, а также пример использования могут быть предоставлены автором по запросу.

На рисунке 4 представлены наблюдаемые рельефы поверхности полиэтилена на различных стадиях взаимодействия зонда с поверхностью. В момент начала отклонения (точка А на рисунке 1) к поверхности наблюдаем огибающую рельефа (рисунок 4a). В точке завершения скачка к поверхности (точка В на рисунке 1) на рельефе видны фрагменты внутренней ламеллярной структуры полиэтилена (рисунок 4b), которые в полной мере проступают на рельефе при максимальной

нагрузке (рисунок 4c). То есть, в точке завершения скачка острие находится в контакте с материалом, деформируя внешний низкомолекулярный слой, скрывающий внутреннюю структуру полимера.

Карта и распределение константы взаимодействия показаны на рисунке 5: в силу неоднородной структуры полимера константа взаимодействия также имеет контраст, коррелирующий с ламеллярной структурой материала. Среднее значение 12×10^{-20} Дж находится в удовлетворительном соответствии с наблюдаемым значением для полиэтилен-кремний (16×10^{-20} Дж, [22]).

При помощи модели МО, используя входные параметры $\{A_{ts}, R, k, \omega_0, V_z\}$, были рассчитаны отклонения d_c в момент контакта для каждой точки АСМ-изображения.

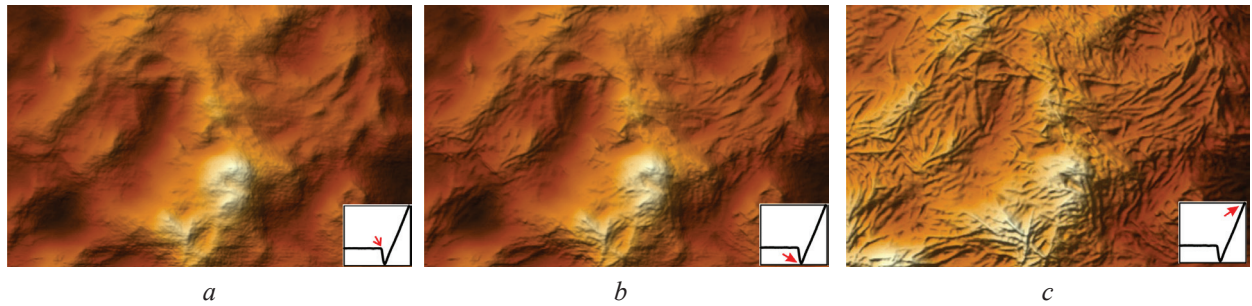


Рисунок 4 – Изображения (размер $2 \times 1 \text{ мкм}^2$) полученной на атомно-силовом микроскопе поверхности полиэтилена в момент отклонения зонда к поверхности (a), в точке завершения скачка зонда (b) и при максимальном усилии (c)

Figure 4 – Images of the polyethylene surface ($2 \times 1 \text{ μm}^2$) obtained by atomic force microscopy at the onset of the probe deflection to the surface (a), at the point of the jump-in (b) and at the maximum applied load (c)

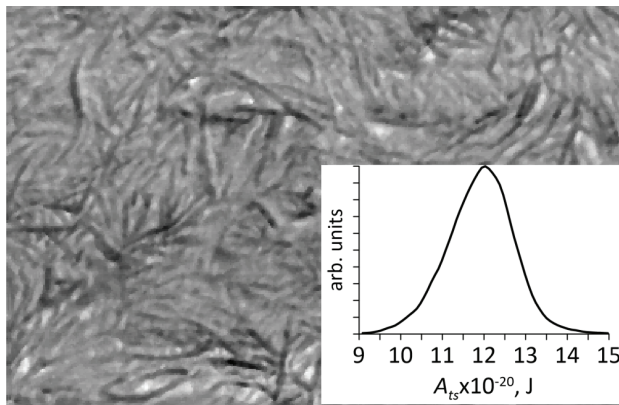


Рисунок 5 – Карта и распределение константы взаимодействия зонда с исследуемой поверхностью

Figure 5 – The map and the distribution of the interaction constant of the polyethylene

При помощи модели МО, используя входные параметры $\{A_{ts}, R, k, \omega_0, V_z\}$, были рассчитаны отклонения d_c в момент контакта для каждой точки АСМ-изображения. Полученный рельеф в момент контакта (рисунок 6a) качественно не отличается от огибающей поверхности (рисунок 4a), однако абсолютный изгиб зонда в момент контакта более чем в два раза меньше, чем изгиб в точке завершения скачка зонда к поверхности.

Таким образом, в данном случае в момент завершения скачка к поверхности, зонд уже вдавливался в материал на глубину больше 1 нм (в случае более мягких материалов можно ожидать и более существенное вдавливание).

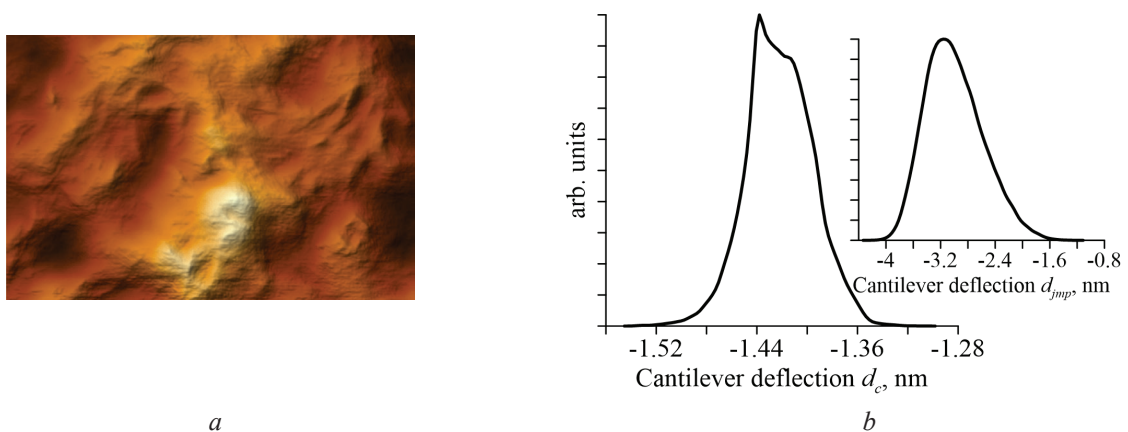


Рисунок 6 – Рельеф в момент контакта (a) и соответствующее распределение отклонения кантилевера (b). Вставкой на (b) показано отклонение в момент завершения прыжка

Figure 6 – Surface at the moment of contact (a) and the corresponding distribution of the cantilever deflection (b). The inset in (b) shows the deflection at the moment of jump-in

Полученные точки контакта дополняют силовые кривые и не совпадают с имеющимися точками начального участка взаимодействия.

Заключение

Исследован начальный участок кривой индентирования: притяжение острия зонда атомно-силового микроскопа под действием сил Ван-дер-Ваальса в воздушной среде к (деформируемой) поверхности полимера. На этапе бесконтактного взаимодействия кантилевер развивает высокую скорость изгиба, которая, в силу относительно низкой частоты записи данных, ведёт к потере значимых точек силовой кривой. В частности, это делает невозможным точное определение начала контакта острия с поверхностью.

Недостающие данные предлагается получать методами машинного обучения, «натренированными» на решении множества модельных задач на основе гармонического осциллятора. Предлагаемый подход проиллюстрирован определением точки контакта острия с поверхностью и может быть расширен для нахождения других параметров материала. Машинное обучение во много раз ускоряет обработку массивов силовых кривых экспериментов по быстрому индентированию.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда и Министерства образования и науки Пермского края (соглашение № С-26/1774 от 12.05.2025): грант № 25-21-20086.

Acknowledgments

The work was supported by the Russian Science Foundation and the Ministry of Education and Science of the Perm Region (agreement No. C-26/1774 dated May 12, 2025): grant No. 25-21-20086.

References

1. Wang D, Fujinami S, Nakajima K, Nishi T. True Surface Topography and Nanomechanical Mapping Measurements on Block Copolymers with Atomic Force Microscopy. *Macromolecules*. 2010;43(7):3169-3172. **DOI:** 10.1021/ma9028695
2. Dehnert M, Spitzner E-C, Beckert F, Friedrich C, Magerle R. Subsurface Imaging of Functionalized and Polymer-Grafted Graphene Oxide. *Macromolecules*. 2016;49(19):7415-7425. **DOI:** 10.1021/acs.macromol.6b01519
3. Morozov IA. Subsurface AFM Study of Inhomogeneous Polymeric Materials. *Journal of Applied Polymer Science*. 2025;142(11):e56611. **DOI:** 10.1002/app.56611
4. Stühn L, Fritschen A, Choy J, Dehnert M, Dietz C. Nanomechanical sub-surface mapping of living biological cells by force microscopy. *Nanoscale*. 2019;11(27):13089-13097. **DOI:** 10.1039/C9NR03497H
5. Gisbert VG, Garcia R. Fast and high-resolution mapping of van der Waals forces of 2D materials interfaces with bimodal AFM. *Nanoscale*. 2023;15(47):19196-19202. **DOI:** 10.1039/D3NR05274E
6. Morozov IA, Izumov RI. Influence of experimental conditions on apparent AFM tip-surface contact in air. *Ultramicroscopy*. 2025;273:114148. **DOI:** 10.1016/j.ultramic.2025.114148
7. Cao Y, Yang D, Soboyejoy W. Nanoindentation Method for Determining the Initial Contact and Adhesion Characteristics of Soft Polydimethylsiloxane. *J. Mater. Res. Springer Science and Business Media LLC*. 2005;20(8):2004-2011. **DOI:** 10.1557/jmr.2005.0256
8. Garcia M, Schulze KD, O'Bryan CS, Bhattacharjee T, Sawyer WG, Angelini TE. Eliminating the surface location from soft matter contact mechanics measurements. *Tribology – Materials, Surfaces & Interfaces*. 2017;11(4):187-192. **DOI:** 10.1080/17515831.2017.1397908
9. Yang C-W, Chen C-H, Ding R-F, Liao H-S, Hwang I-S. Multiparametric characterization of heterogeneous soft materials using contact point detection-based atomic force microscopy. *Applied Surface Science*. 2020;522:146423. **DOI:** 10.1016/j.apsusc.2020.146423
10. Hadjiiski L, Linnemann R, Stopka M, Oesterschulze E, Rangelow I, Kassing R. Application of neural networks to a scanning probe microscopy system. *Thin Solid Films*. 1995;264(2):291-297. **DOI:** 10.1016/0040-6090(95)05851-6
11. Liu Y, Sun Q, Lu W, Wang H, Sun Y, Wang Z, Lu X, Zeng K. General Resolution Enhancement Method in Atomic Force Microscopy Using Deep Learning. *Advanced Theory and Simulations*. 2019;2(2):1800137. **DOI:** 10.1002/adts.201800137
12. Li M, Rieck J, Noheda B, Roerdink JBTM, Wilkinson MHF. Stripe noise removal in conductive atomic force microscopy. *Sci Rep*. 2024;14(1):3931. **DOI:** 10.1038/s41598-024-54094-w

13. Nartova AV, Mashukov MYu, Astakhov RR, Kudinov VYu, Matveev AV, Okunev AG. Particle Recognition on Transmission Electron Microscopy Images Using Computer Vision and Deep Learning for Catalytic Applications. *Catalysts*. 2022;12(2):135. **DOI:** 10.3390/catal12020135
14. Anantatamukala A, Krishna KVM, Dahotre NB. Generative adversarial networks assisted machine learning based automated quantification of grain size from scanning electron microscope back scatter images. *Materials Characterization*. 2023;206:113396. **DOI:** 10.1016/j.matchar.2023.113396
15. Giergiel M, Zapotoczny B, Czyzyska-Cichon I, Konior J, Szymonski M. AFM image analysis of porous structures by means of neural networks. *Biomedical Signal Processing and Control*. 2022;71:103097. **DOI:** 10.1016/j.bspc.2021.103097
16. Kim Y, Gu GH, Asghari-Rad P, Noh J, Rho J, Seo MH, Kim HS. Novel deep learning approach for practical applications of indentation. *Materials Today Advances*. 2022;13:100207. **DOI:** 10.1016/j.mtadv.2022.100207
17. Weber A, Vivanco M. dM, Toca-Herrera JL. Application of self-organizing maps to AFM-based viscoelastic characterization of breast cancer cell mechanics. *Sci Rep*. 2023;13(1):3087. **DOI:** 10.1038/s41598-023-30156-3
18. Sotres J, Boyd H, Gonzalez-Martinez JF. Locating critical events in AFM force measurements by means of one-dimensional convolutional neural networks. *Sci Rep*. 2022;12(1):12995. **DOI:** 10.1038/s41598-022-17124-z
19. Jeong K, Lee H, Kwon OM, Jung J, Kwon D, Han HN. Prediction of uniaxial tensile flow using finite element-based indentation and optimized artificial neural networks. *Materials & Design*. 2020;196:109104. **DOI:** 10.1016/j.matdes.2020.109104
20. Bao M, Yang H. Squeeze film air damping in MEMS. *Sensors and Actuators A: Physical*. 2007;136(1):3-27. **DOI:** 10.1016/j.sna.2007.01.008
21. Clifford CA, Seah MP. The determination of atomic force microscope cantilever spring constants via dimensional methods for nanomechanical analysis. *Nanotechnology*. 2005;16(9):1666-1680. **DOI:** 10.1088/0957-4484/16/9/044
22. Payam AF, Morelli A, Lemoine P. Multiparametric analytical quantification of materials at nanoscale in tapping force microscopy. *Applied Surface Science*. 2021;536:147698. **DOI:** 10.1016/j.apsusc.2020.147698