

Научная статья

Построение карт фазового сдвига включений в подповерхностном слое нанокompозита для подготовки моделей машинного обучения в атомно-силовой микроскопии

*Р.И. Изюмов, А.Л. Свистков**Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Российская Федерация*

Контроль качества распределения нанонаполнителя (углеродных нанотрубок, технического углерода) критически важен для свойств полимерных нанокompозитов. Существующие методы атомно-силовой микроскопии (АСМ) способны по двумерным картам фазового контраста косвенно оценивать распределение, тогда как более точные трёхмерные методы требуют либо длительных экспериментов, либо ресурсоёмкого конечно-элементного моделирования, что ограничивает их практическое использование. В работе предлагается подход к созданию базы синтетических данных, которая в перспективе позволит применять методы машинного обучения для ускоренного восстановления распределения наполнителя по данным фазового контраста АСМ. Генерация базы синтетических данных для обучения нейронной сети осуществляется в среде MATLAB и включает вариацию ключевых параметров: геометрии и глубины залегания частиц; формы зонда; упругих и поверхностно-энергетических свойств материалов. Для получения данных требуется проведение вычислений связи фазового сдвига, определяемого в полуконтактном режиме АСМ, с глубиной залегания частиц. Сформированный массив данных демонстрирует прямую корреляцию между фазовым изображением поверхности (стандартным выходным сигналом АСМ в полуконтактном режиме) и трёхмерным распределением включений в подповерхностном слое. В работе показано влияние геометрических параметров (радиуса частиц, глубины их залегания, радиуса зонда) на качество и вид теоретических карт диссипации. Выявлено, что диссипативные потери, вызывающие фазовый сдвиг, нелинейно зависят от глубины расположения частиц наполнителя. За счёт этого становится возможным устранение неопределённости при обратном восстановлении структуры, а также оперативный количественный анализ нанокompозитов, а в перспективе – учёт более сложных морфологий наполнителя (агломератов, цепочечных структур).

Ключевые слова: атомно-силовая микроскопия, карта фазового сдвига, диссипативные потери, бутадиен-стирольный каучук, нанокompозит, машинное обучение, конечно-элементное моделирование

Получение: 23.07.2026 / Принятие: 28.09.2026 / Публикация онлайн: 31.10.2026

УДК 531

1. Введение

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является одним из наиболее востребованных инструментов для характеристики морфологии и локальных свойств полимерных нанокompозитов. Особый интерес представляет анализ распределения нанонаполнителей (углеродных нанотрубок, технического углерода и другого) в приповерхностном слое эластомерной матрицы, например, бутадиен-стирольного каучука, поскольку качество диспергирования определяет механические свойства материала на макроуровне. Однако стандартные методы АСМ-визуализации, как правило, предоставляют лишь двумерную информацию о поверхностной топографии или фазовом контрасте, что недостаточно для количественного анализа трёхмерного распределения включений в подповерхностном слое.

Разработки подходов к восстановлению распределения частиц наполнителя на основе функциональной связи между глубиной залегания частицы H и величиной диссипативных потерь D , регистрируемых при индентировании, велись многими исследователями. Среди них следует выделить авторов [1] как основоположников концепции, согласно которой информация о распределении наполнителя содержится на карте диссипации энергии, получаемой в полуконтактном режиме АСМ с помощью преобразователя сигнала о фазовом сдвиге. Этот метод позволил выявлять подповерхностные неоднородности, в частности, частицы наполнителя в полимерной матрице, за счёт сильного контраста, возникающего из-за разницы в диссипативных свойствах между наполнителем и матрицей. Авторы ограничились рассмотрением только двумерной проекции наполнителя без учёта глубины залегания частиц и трёхмерной геометрии наполнителя. Их исследование стало базой для работы [2], в которой для получения структуры подповерхностного слоя анализировались формы кривых диссипации энергии в зависимости от амплитуды колебаний. Идентификация конкретного механизма диссипации (например, вязкоупругости матрицы) позволила косвенно судить о наличии подповерхностных неоднородностей, которые влияют на общий механизм потерь энергии. Однако этот метод не предназначен для прямого и быстрого построения двумерных или трёхмерных изображений распределения наполнителя. Он требует сбора данных о полных кривых в каждой точке поверхности образца, что крайне времязатратно, и даёт информацию скорее о типе взаимодействия, а не о точном положении и форме подповерхностного объекта. Развитие этого подхода представлено в работе [3], авторами которой для расчёта карт локальной жёсткости и демпфирования предложена модель на основе гармонических колебаний зонда исходя из амплитудно-фазово-дистанционных кривых. Эти параметры чувствительны к более жестким или диссипативным включениям под поверхностью и позволяют выявлять скрытые подповерхностные структуры. Однако модели требуются параметры, привязанные к поверхности или очень тонкому приповерхностному слою в рамках одного измерения. Без проведения многоуровневых измерений на разных глубинах она не позволяет напрямую реконструировать объёмное изображение наполнителя,

так как не вводит явной координаты глубины. В работе [4] построены трёхмерные карты механических свойств (жёсткости, диссипации) путём регистрации сетки амплитудно-фазово-дистанционных (АФД) кривых. Координата глубины положения наполнителя связана с величиной внедрения зонда и предоставляет возможность напрямую визуализировать распределение, размер и форму подповерхностных объектов (например, цилиндров в блок-сополимере или кристаллических ламелл в полимере) вплоть до глубины ~ 20 нм. Разработанный способ требует регистрации полных АФД-кривых в каждой точке сканируемой области, что делает метод неприменимым для изучения динамических процессов или больших площадей из-за чрезвычайно низкой скорости сбора данных.

В работе [5] предложен оригинальный метод восстановления 3D-распределения частиц наполнителя по данным сканирования на АСМ в полуконтактном режиме. Метод также основан на применении связи $H(D)$, вычисленной при анализе прямого и обратного хода зонда. Несмотря на высокую информативность, практическая реализация метода сопряжена со значительными вычислительными затратами, поскольку требует многократного решения трёхмерных контактных задач методом конечных элементов (КЭ-методом) для различных конфигураций системы «зонд–образец».

В последние годы методы машинного обучения (МО) активно проникают в область обработки данных АСМ и демонстрируют высокую эффективность при решении задач, традиционно требующих значительных вычислительных ресурсов или сложного физического моделирования. В контексте анализа полимерных композитов можно выделить несколько ключевых направлений. Первое направление связано с автоматической сегментацией фазовых АСМ-изображений для идентификации различных доменов в полимерных смесях. В работе [6] представлен рабочий процесс, включающий машинное обучение (unsupervised) и позволяющий автоматически идентифицировать пространственное расположение полимерных доменов разных типов. Авторы показали, что подход ResNet50 (с обучением supervised learning) уступает классическим методам на основе дискретного преобразования Фурье или косинусного преобразования в связке со статистикой дисперсии, что подчёркивает важность выбора архитектуры для конкретной задачи. Второе направление использует МО для количественного анализа распределения наполнителя. В работе [7] для определения глубины залегания частиц наполнителя под поверхностью полимерной матрицы резины по данным АСМ-индентирования предложено применение двух моделей обучения. Одна модель обрабатывает корректные кривые сила–расстояние, вторая — искажённые, что делает подход устойчивым к артефактам эксперимента. Более продвинутый метод представлен в работе [8], где сочетание данных АСМ, байесовской оптимизации и континуальной микромеханики позволило осуществлять 3D-локализацию наночастиц (диаметром ~ 142 нм) в эпоксидной матрице с точностью до 3 нм на синтетических данных. При этом в обоих работах осуществляется обработка силовых кривых, а не карт фазовых сдвигов, что требует большего времени эксперимента.

Отдельный класс исследований посвящён предсказанию механических свойств композитов на основе характеристик морфологии наполнителя, получаемых с помощью микроскопии. Например, в работе [9] строятся модели композитов по данным просвечивающей электронной микроскопии, а затем обучаются МО-модели (нейронные сети, гауссовские процессы регрессии, машины опорных векторов) для предсказания кривых напряжение–деформация, причём гауссовская регрессия показала наивысшую точность. Хотя эти работы не решают задачу восстановления 3D-распределения по АСМ-данным, они демонстрируют принципиальную возможность замены трудоёмких вычислений на обученные модели.

Таким образом, существующие подходы либо требуют длительного сбора силовых кривых в каждой точке, либо ориентированы на сегментацию фаз, а не на восстановление глубины залегания и формы включений. В настоящей работе предлагается подход, основанный на применении методов МО. В отличие от упомянутых аналогов, он нацелен на мгновенное восстановление 3D-распределения наполнителя непосредственно по фазовому изображению поверхности, получаемому в стандартном полуконтактном режиме АСМ. Основная идея заключается в замене времязатратных расчётов на применение обученной нейронной сети, способной мгновенно восстанавливать распределение наполнителя по фазовому изображению поверхности. Для обучения сети предлагается сформировать репрезентативную базу синтетических данных, генерируемых в среде MATLAB. Эта база создаётся путём вариации следующих параметров: геометрии (радиуса) частиц наполнителя, глубины их залегания и взаимного расположения; формы зонда (радиуса кончика); физико-механических свойств материалов, в том числе плотности поверхностной энергии и упругих характеристик образца. Одним из этапов генерации является определение диссипативных потерь процесса индентирования в каждом сценарии расчёта. Для этого используется модель взаимодействия зонда с мягким образцом на нанометровом масштабе, учитывающая конечные деформации и изменение поверхностной энергии (например, как в работе [10]). В результате создаётся массив данных, прямо связывающий фазовое изображение поверхности с 3D-распределением наполнителя в приповерхностном слое для широкого диапазона условий эксперимента. Цель данной работы — описать алгоритм формирования обучающего набора данных, обосновать выбор параметров моделирования и показать преимущества применения нейросетевого подхода для значительного ускорения обработки экспериментальных данных АСМ по сравнению с базовым КЭ-методом. Этапы обучения и тестирования конкретной архитектуры нейросети выходят за рамки данного исследования.

2. Основные теоретические положения

В момент касания зондом поверхности образца в системе «зонд–образец» энергетически выгодно делать большей площадь контакта, вследствие чего возникнет втягивающая сила. В процессе извлечения зонда

из образца эта сила заставит упругий материал образца налипнуть на зонд. Поэтому момент отрыва зонда от образца будет сопровождаться скачком (такой процесс также присутствует в классических моделях Дерягина–Мюллера–Топорова (ДМТ) и Джонсона–Кендалла–Робертса (ДжКР) [11, 12]). По отличию силовых кривых погружения и извлечения зонда определяются диссипативные потери энергии даже при индентировании упругого материала [13]. При этом диссипация в процессе индентирования наполненного упругого материала связана только с налипанием на зонд связующего, а его количество зависит от глубины внедрения зонда. На глубину внедрения зонда влияют включения, находящиеся в подповерхностном слое образца.

Процессы внедрения/извлечения зонда схематично продемонстрированы на рисунке 1 в двух точках. Как видно, картины в точках разные. Отличие заключается в том, что при одной и той же силе внедрения зонд погружается на меньшую глубину там, где под поверхностью на небольшой глубине расположен агрегат частиц наполнителя. Наполнитель оказывает сопротивление зонду, вследствие чего площадь контакта и количество налипшего материала становятся меньше, чем при его проникновении в месте, где частицы наполнителя отсутствуют.

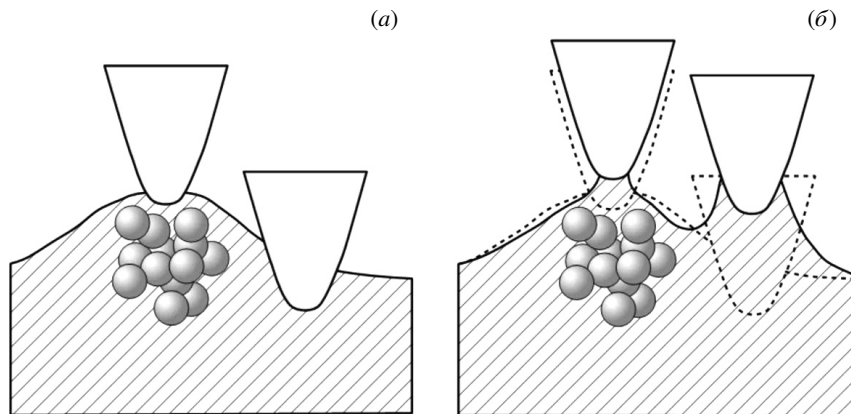


Рис. 1. Количество налипшего на зонд материала в присутствии или отсутствии частиц наполнителя в подповерхностном слое: прямой ход зонда (внедрение) (а), обратный ход зонда (извлечение) (б)

Независимо от того, на основе какой модели будем получать соотношение, определяющее глубину H залегания частицы по вычисленной величине диссипативных потерь D , феноменологически оно описывает зависимость, представляемую в виде графика (см. Рис. 2), при построении которого должны приниматься во внимание следующие положения:

- если частица включения не покрыта слоем связующего ($H = 0$), то будем считать, что такой контакт вообще не будет сопровождаться диссипативными потерями, поскольку никакой материал не будет налипать на зонд и, следовательно, $D(H = 0) = 0$;
- при увеличении расстояния между частицей и поверхностью образца растёт и величина диссипации, асимптотически стремясь к значению, которое можно определить для ненаполненного материала, тогда $D(H \rightarrow \infty) = D_{\max}$.

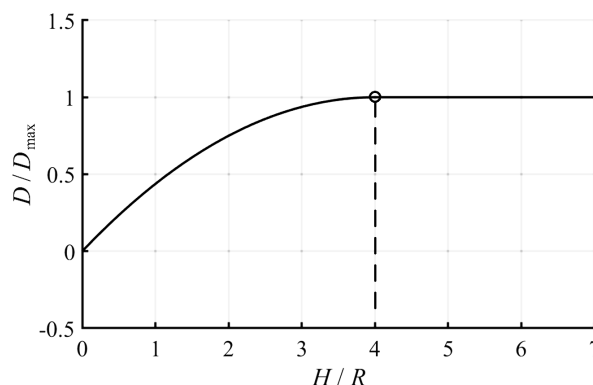


Рис. 2. Связь между нормированными величинами диссипации $D/D_{\max}$ и глубины расположения фрагмента включения H/R ; R – радиус кончика зонда

Введём некоторую глубину, ниже которой отличить положения частиц становится невозможным (из-за наличия шумов в полученных данных о диссипации). На рисунке 2 в качестве примера выбрано значение $H/R = H_{\max}/R = 4$. Для перехода к динамическому колебательному режиму работы АСМ воспользуемся результатом, полученным в работе [1], где установлено, что энергия диссипации за один цикл колебательного режима равна:

$$E_{\text{dis}} = \pi \frac{k}{Q} (QA_d A \sin \gamma - A^2). \quad (1)$$

Здесь k — жесткость кантилевера; Q — добротность; A_d — амплитуда движения основания кантилевера; A — амплитуда колебаний зонда; γ — фазовый сдвиг.

В выражении (1) второй член (A^2) описывает потери энергии в самом кантилевере (вязкое трение о воздух, внутреннее трение в материале балки). Эти потери не зависят от взаимодействия с образцом и являются фоновыми. В экспериментах, выполненных авторами на оборудовании ИМСС УрО РАН (на атомно-силовом микроскопе NT-MDT Integra Prima в полуконтактном режиме с кантилевером серии Etalon, производитель TipsNano), как и в стандартной практике полуконтактной АСМ, амплитуда колебаний зонда A поддерживается на постоянном уровне с помощью системы обратной связи (фиксированного SetPoint). Следовательно, член A^2 является константой и не влияет на изменения диссипации при сканировании. Интересующая переменная часть диссипации определяется только первым членом: $E_{\text{dis}} \propto \sin \gamma$. В предшествующей работе [10] показано, что диссипативные потери можно описать выражением $D \propto \sin(\gamma - \gamma_{\min})$. Упрощение связи $D(H)$ до линейной в диапазоне от нуля до предела видимости $H_{\max}$ позволяет получить уравнение:

$$H = C \sin(\gamma - \gamma_{\min}). \quad (2)$$

Параметр C в уравнении (2) является параметром модели и определяет толщину приповерхностного слоя, в котором происходит поиск твёрдых объектов, $C = H_{\max}$.

Результатом применения соотношения (2) для преобразования карты фазового сдвига, полученной в полуконтактном режиме АСМ-сканирования образца, является трёхмерная картина распределения частиц наполнителя и их форма в приповерхностном слое материала (Рис. 3).

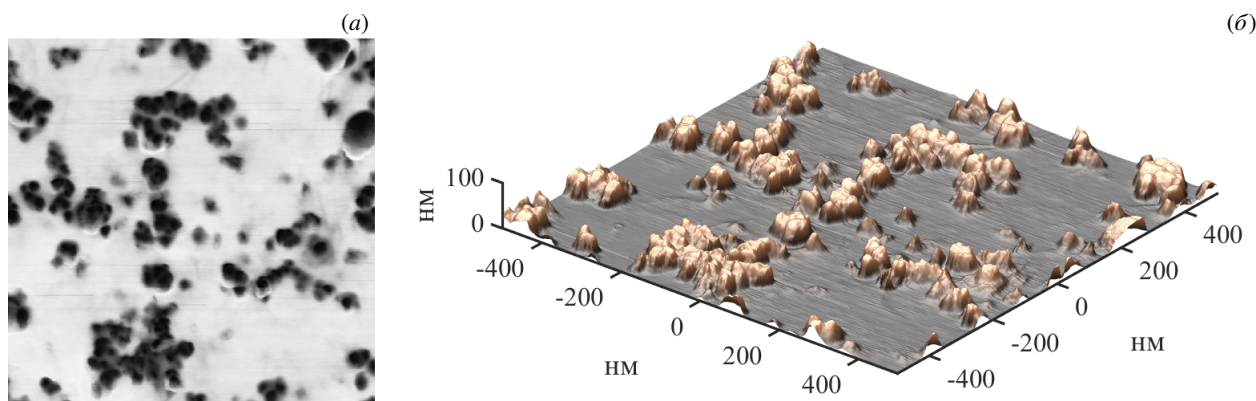


Рис. 3. Карта фазового сдвига участка 1×1 мкм поверхности нанокompозита на основе бутадиен-стирольного каучука с техническим углеродом (50 м.ч.) (а); восстановленная по фазовому изображению подповерхностная структура наполнителя (б); нулевой уровень высоты определяет границу видимости метода восстановления

3. Построение базы данных для обучения нейронной сети

Определение точного соотношения $H(\gamma)$ требует выполнения большого количества вычислений с помощью КЭ-моделирования. Предлагается прибегнуть к такому МО, которое позволит существенно сократить время для обработки экспериментальных данных. Суть подхода заключается в том, чтобы обучить нейронную сеть определять распределение частиц наполнителя в слое материала на заранее подготовленных в программе MATLAB данных.

Для обучения нейронной сети выполняются следующие действия:

- генерируется схема распределения наполнителя в эластомерном материале (Рис. 4а);
- полученная геометрия преобразуется в трёхмерную поверхность, которая находится путём скольжения зонда по агломерату частиц наполнителя по всем доступным для касания участкам (Рис. 4б);
- вычисляются карты фазового сдвига поверхности для каждой геометрии скопления частиц с помощью соотношения (2) (Рис. 4в).

Выполнение всех этапов реализуется с помощью несложных вычислительных алгоритмов (например, в среде MATLAB). Последний этап требует подготовки большого объёма данных $\gamma(H)$ о фазовом сдвиге в случае колебательного взаимодействия зонда с образцом при разной глубине расположения включений и различных свойствах материалов. В результате при заданных сценариях распределения наполнителя в объёме приповерхностного слоя образца и соответствующих параметрах системы «зонд-образец» формируется массив данных, связывающих фазовое изображение поверхности с распределением наполнителя.

Далее с помощью обученной нейронной сети выполняются шаги:

- находится фазовое изображение поверхности композитного материала;
- вычисляется радиус кончика зонда;
- обрабатываются данные вычислений и восстанавливается трёхмерная картина распределения наполнителя в приповерхностном слое образца (Рис. 5).

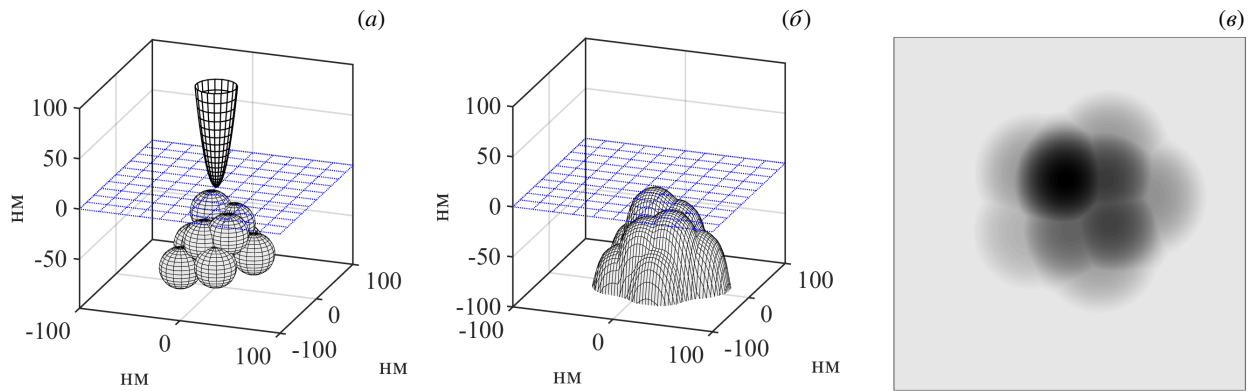


Рис. 4. Схематичное изображение зонда АСМ, поверхности образца (сетки на нулевом уровне) и сферических частиц наполнителя радиусом 20 нм в приповерхностном слое (а); теоретически максимально точная форма скопления частиц, полученная «ощупыванием» в каждой доступной для касания точке зондом с радиусом кончика $R = 2$ нм (б); карта фазового сдвига участка 200×200 нм, рассчитанная по формуле (2) (в)

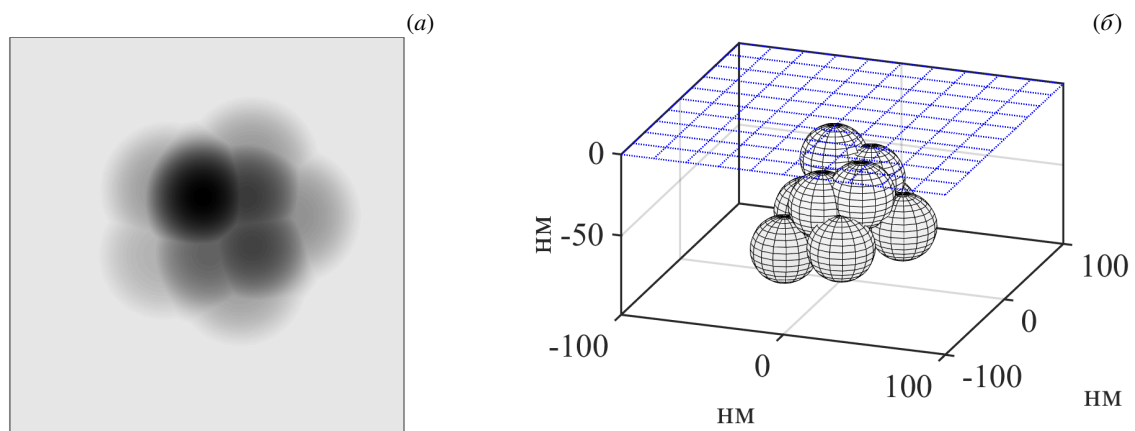


Рис. 5. Пример ожидаемого результата работы обученной нейросети: карта фазового сдвига (а); реальная геометрия включений и их расположение в пространстве, восстановленные по фазовому изображению (б)

4. Влияние параметров модели на результат генерации теоретического фазового изображения модельного слоя нанокompозита

Для демонстрации зависимости структуры приповерхностного слоя образца от параметров модели рассмотрены сценарии процесса индентирования, в которых варьировались: геометрия частиц наполнителя (радиус R_{inc}) (Рис. 6); глубина расположения включений H (Рис. 7, 8); форма зонда (радиус кончика R) (Рис. 9).

На рисунках 7 и 8 показаны сценарии с разной глубиной H залегания агломерата частиц различного размера. При небольших частицах (Рис. 7) увеличение глубины приводит к размытию карты фазового сдвига и потере деталей каждой отдельной частицы, при этом сохраняется возможность оценить примерный размер всего агломерата. При более крупных частицах вследствие большего размера всего агломерата информация об отдельных частицах утрачивается (см. Рис. 8). С увеличением глубины представление об агломерате становится ещё более неопределённым, вплоть до того, что невозможно определить его размер.

На рисунке 6 приведены карты фазового сдвига для случаев, когда одним и тем же зондом сканируются агломераты разных размеров. Как видно, существует некоторое оптимальное соотношение размеров зонда и частиц, при котором достигается максимально детальное отображение структуры агломерата на карте фазового сдвига. Очевидно, что слишком грубый для скопления зонд не позволяет детально различить его структуру в силу своей низкой разрешающей способности. Однако и для агломерата из крупных частиц необходимо подбирать зонд соответствующих размеров, поскольку слишком маленький зонд не способен «почувствовать» его глубоко залегающие частицы. Зонд «видит» только верхушку агломерата, а информация о нём как о целом остаётся недоступной.

На рисунке 9 представлены карты фазового сдвига для сценариев, когда зондом разного радиуса R сканируются агломераты одного размера, состоящие из частиц одинакового радиуса. Видно, что при увеличении радиуса зонда происходит сглаживание фазового контраста: мелкие детали структуры агломерата становятся менее различимыми, и изображение приобретает более размытый вид. Это связано с тем, что зонд с большим радиусом кончика имеет меньшую разрешающую способность и «усредняет» вклад отдельных частиц в диссипативные потери. Таким образом, для детального восстановления структуры агломерата необходимо использовать зонды с радиусом кончика, сравнимым с размером частиц наполнителя.

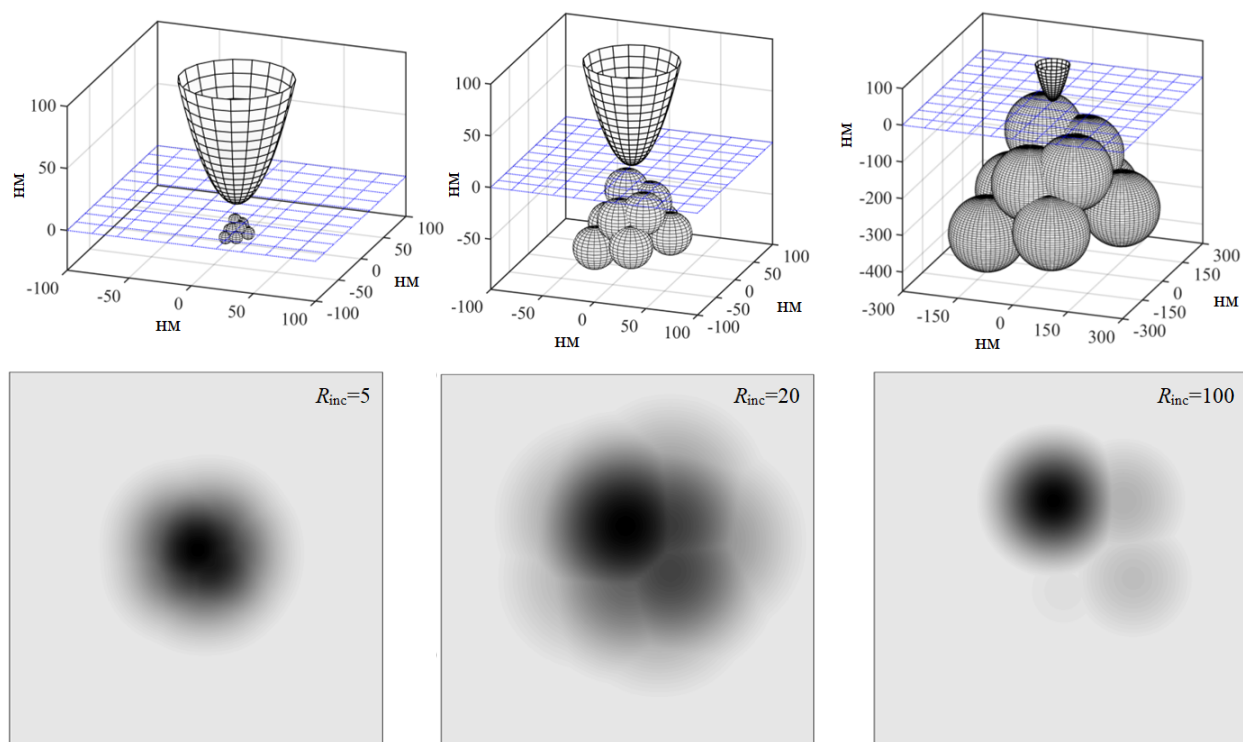


Рис. 6. Варианты радиуса R_{inc} , нм частиц агломерата (верхний ряд) и карты фазового сдвига при фиксированном радиусе зонда ($R = 10$ нм)

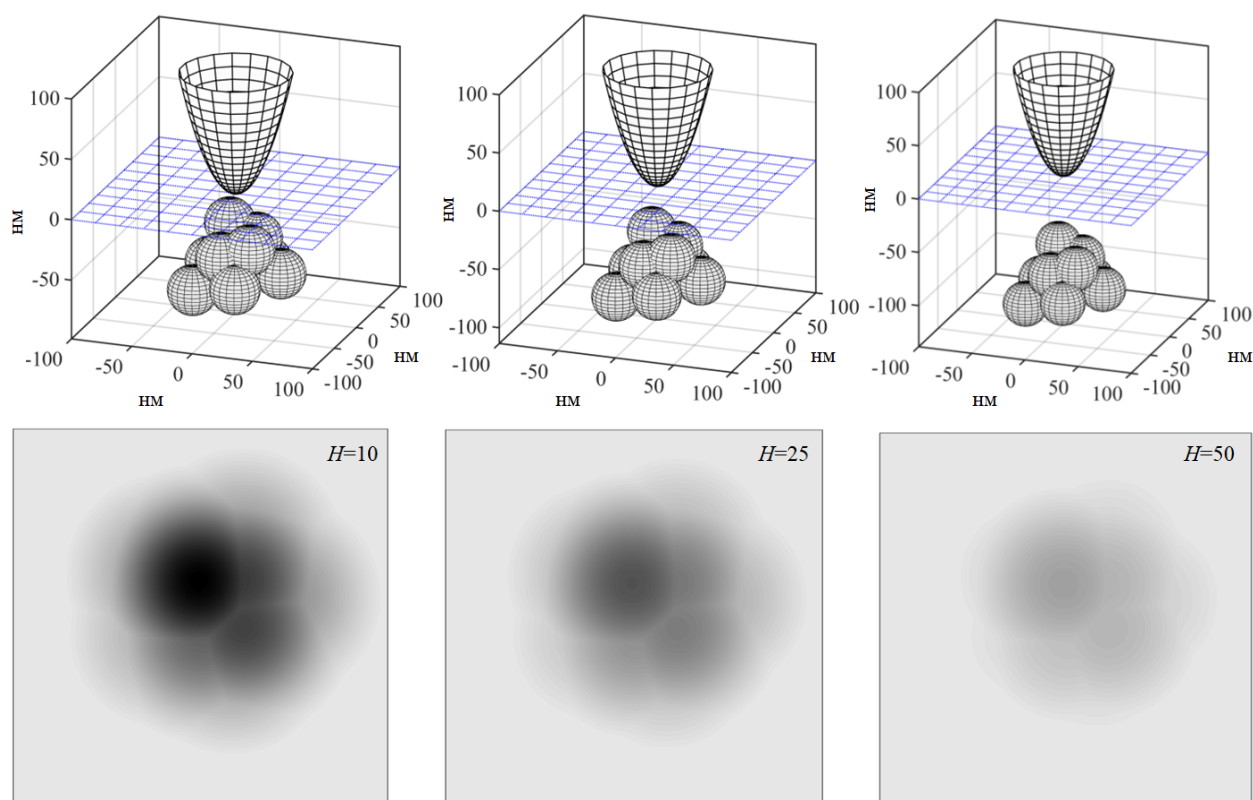


Рис. 7. Варианты глубины H , нм агломерата частиц малого радиуса ($R_{inc} = 20$ нм) в подповерхностном слое образца (верхний ряд) и соответствующие карты фазового сдвига (нижний ряд) при фиксированном радиусе зонда ($R = 10$ нм)

Для наглядной демонстрации отсутствия во всём множестве сценариев индентирования совпадения результатов при геометрически подобных схемах на рисунке 10 показаны результаты вычислений карт фазового сдвига для двух схем, отличающихся в 2.5 раза только размерными параметрами.

Можно видеть, что геометрически подобные схемы дают как количественно, так и качественно разные

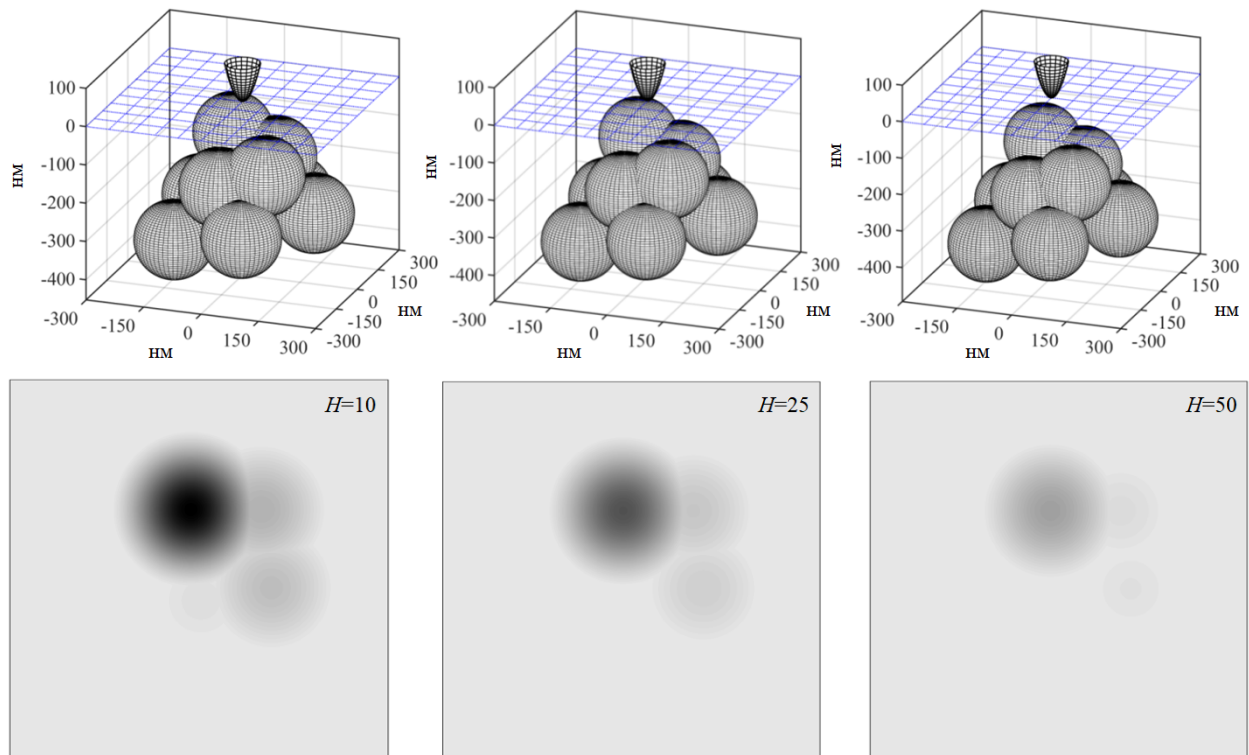


Рис. 8. Варианты глубины H , нм агломерата частиц большего радиуса ($R_{inc} = 100$ нм) в подповерхностном слое образца (верхний ряд) и соответствующие карты фазового сдвига (нижний ряд) при фиксированном радиусе зонда ($R = 10$ нм)

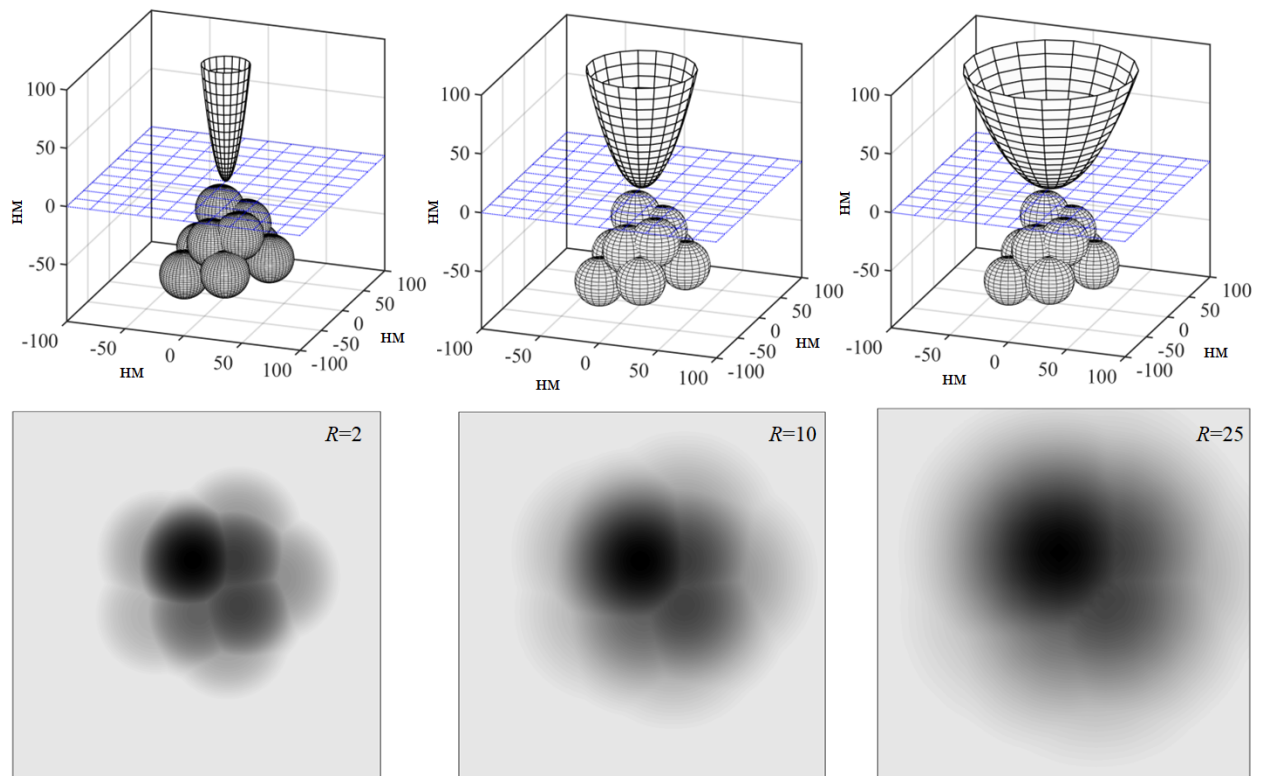


Рис. 9. Варианты размеров зонда R , нм (верхний ряд) и карты фазового сдвига при фиксированных глубине ($H = 10$ нм) агломерата и радиусе частиц ($R_{inc} = 20$ нм) (нижний ряд)

результаты. Это объясняется нелинейностью связи $\gamma(H)$. Представленный на рисунке 10 график профилей построен вдоль оси абсцисс и проходит через минимальное значение на каждой карте фазового сдвига. Для удобства сравнения точка минимума «привязана» к нулевому значению, а диссипация пронормирована в диапазоне от 0 до 1. Различие профилей говорит о том, что в применяемом в данной работе подходе к обучению

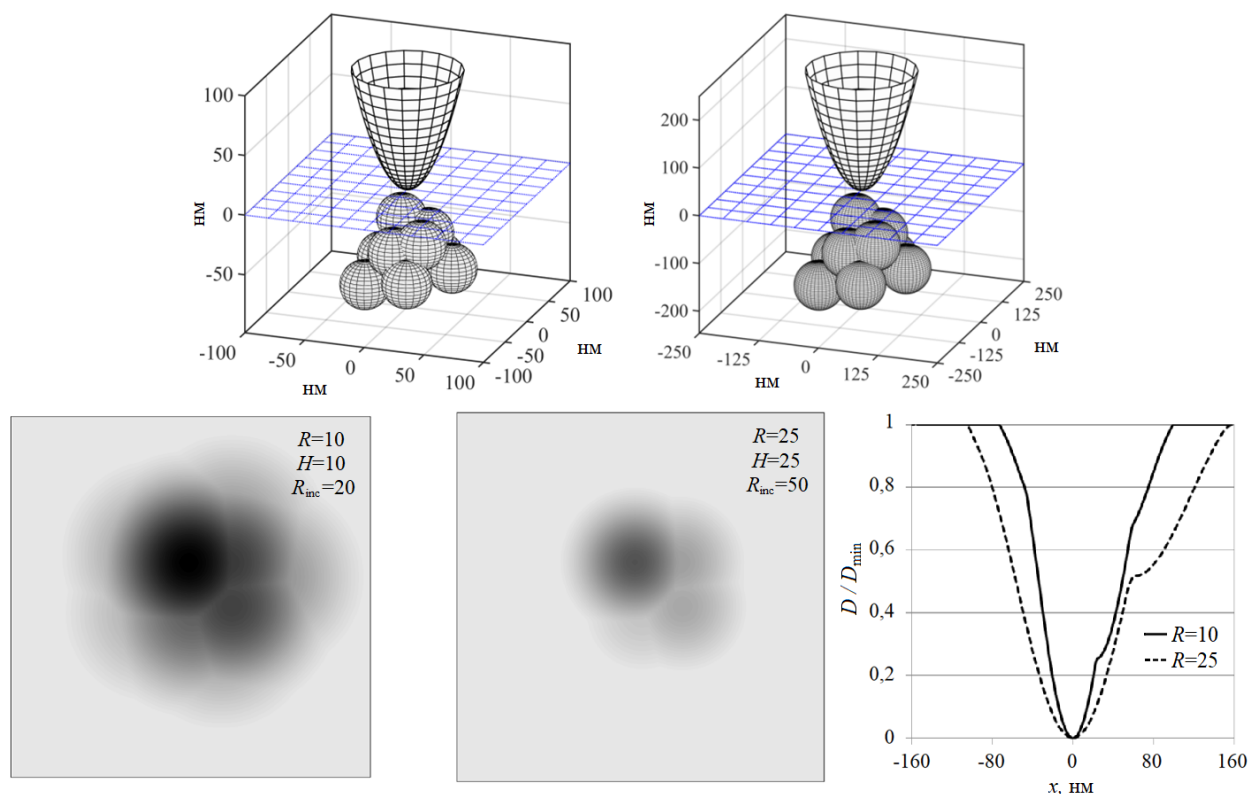


Рис. 10. К сравнению индентирования систем, в 2.5 раза отличающихся только геометрическими размерами (верхний ряд); карты фазового сдвига и нормированные профили диссипации (нижний ряд)

нейронных сетей исключены неопределенности обратного восстановления структуры по экспериментально установленному фазовому изображению.

За рамками исследования остаётся варьирование таких параметров, как плотность поверхностной энергии зонда и образца, а также упругих характеристик образца.

5. Выводы

В работе предложен подход, направленный на преодоление важного ограничения существующих методов восстановления трёхмерного распределения нанонаполнителя в приповерхностном слое эластомерных нанокомпозитов по данным АСМ — вычислительной сложности, связанной в том числе с необходимостью применять КЭ-моделирование для получения связи диссипативных потерь индентирования с глубиной расположения частиц наполнителя.

Предложена методика, направленная на замену прямых КЭ-расчётов применением для получения результатов обученной нейронной сети. Такой подход позволяет сохранить физическую корректность восстанавливаемой картины распределения частиц (углеродных нанотрубок, технического углерода) и на порядки сократить время постобработки данных АСМ. Практическая реализация методики, включая обучение и тестирование нейросетевой модели, является предметом дальнейших исследований, как и разработанный и обоснованный алгоритм генерации репрезентативной базы синтетических данных в среде MATLAB. База формируется путём систематического варьирования ключевых параметров: геометрии и глубины залегания включений, формы зонда, а также упругих и поверхностно-энергетических свойств материалов. В качестве примера вычисление карты фазового сдвига выполнено с использованием способа, представленного в работе [10].

Создаваемый массив данных устанавливает прямую связь между картой фазового сдвига поверхности (стандартным выходным сигналом полуконтактного режима АСМ) и трёхмерным распределением наполнителя в объёме приповерхностного слоя. Предложенный метод открывает практическую возможность для оперативного количественного анализа нанокомпозитов без необходимости проведения трудоёмких вычислений для каждой экспериментальной карты. База может быть расширена за счёт учёта более сложных морфологий наполнителя (агломератов, цепочечных структур), а апробация подхода осуществлена на реальных экспериментальных данных для бутадиен-стирольного и бутадиен-нитрильного каучуков с различными типами углеродных наполнителей.

Работа выполнена в рамках крупного научного проекта при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение № 075-15-2024-535 от 23.04.2024).

Литература

1. Anczykowski B., Gotsmann B., Fuchs H., Cleveland J.P., Elings V.B. How to measure energy dissipation in dynamic mode atomic force microscopy // *Applied Surface Science*. 1999. Vol. 140, no. 3/4. P. 376–382. DOI: 10.1016/S0169-4332(98)00558-3
2. Garcia R., Gómez C.J., Martínez N.F., Patil S., Dietz C., Magerle R. Identification of Nanoscale Dissipation Processes by Dynamic Atomic Force Microscopy // *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 97, no. 1. 016103. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.016103
3. Schröter K., Petzold A., Henze T., Thurn-Albrecht T. Quantitative Analysis of Scanning Force Microscopy Data Using Harmonic Models // *Macromolecules*. 2009. Vol. 42, no. 4. P. 1114–1124. DOI: 10.1021/ma8024464
4. Spitzner E.-C., Riesch C., Magerle R. Subsurface Imaging of Soft Polymeric Materials with Nanoscale Resolution // *ACS Nano*. 2011. Vol. 5, no. 1. P. 315–320. DOI: 10.1021/nn1027278
5. Изюмов Р.И., Свистков А.Л. Математическая модель механического взаимодействия тел нанометрового масштаба // *Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика*. 2024. № 4. С. 35–45. DOI: 10.17072/1993-0550-2024-4-35-45
6. Paruchuri A., Wang Y., Gu X., Jayaraman A. Machine Learning for Analyzing Atomic Force Microscopy (AFM) Images Generated from Polymer Blends // *Digital Discovery*. 2024. Vol. 3, no. 12. P. 2533–2550. DOI: 10.1039/d4dd00215f
7. Morozov I.A., Izumov R.I., Beliaev A.Y. AFM Indentation and Machine Learning in Analysis of Filler Distribution in Rubber // *Journal of Applied Polymer Science*. 2026. Vol. 143, no. 13. e70370. DOI: 10.1002/app.70370
8. Thiem J., Cole D.P., Dubey U., Srivastava A., Ashraf C., Henry T.C., Bakis C.E., Vashisth A. Using data science to locate nanoparticles in a polymer matrix composite // *Composites Science and Technology*. 2022. Vol. 218. 109205. DOI: 10.1016/j.compscitech.2021.109205
9. Ghasemi H., Yazdani H. Atomistic simulation and machine learning predictions of mechanical response in nanotube-polymer composites considering filler morphology and aggregation // *Computational Materials Science*. 2025. Vol. 246. 113399. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113399
10. Izumov R.I., Svistkov A.L. Theoretical basis and experimental application of the dissipative properties analysis method for mapping particle distribution in the subsurface layer of elastomeric nanocomposites // *International Journal of Solids and Structures*. 2026. Vol. 341. 114298. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2026.114298
11. Derjaguin B., Muller V., Toporov Y. Effect of contact deformations on the adhesion of particles // *Journal of Colloid and Interface Science*. 1975. Vol. 53, no. 2. P. 314–326. DOI: 10.1016/0021-9797(75)90018-1
12. Johnson K.L., Kendall K., Roberts A.D. Surface energy and the contact of elastic solids // *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*. 1971. Vol. 324, no. 1558. P. 301–313. DOI: 10.1098/RSPA.1971.0141
13. Onozuka N., Nakajima K. Atomic Force Microscopy Analysis of Velocity Dependent Adhesive Viscoelastic Contact // *Langmuir*. 2024. Vol. 40, no. 46. P. 24565–24575. DOI: 10.1021/acs.langmuir.4c03370

Сведения об авторах:

Изюмов Роман Игоревич (корр.), мнс, Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), 614018, г. Пермь, ул. Академика Королёва, д. 1; e-mail: izumov@icmm.ru; ORCID: 0000-0002-2083-039X

Свистков Александр Львович, дфмн, зав. лаб., ИМСС УрО РАН; e-mail: svistkov@icmm.ru; ORCID: 0000-0002-4754-5214

Research article

Generation of phase shift maps for subsurface inclusions in a nanocomposite to train machine learning models in atomic force microscopy

R.I. Izumov, A.L. Svistkov

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russian Federation

Quality control of nanofiller distribution (carbon nanotubes, carbon black) is crucial for the properties of polymer nanocomposites. The existing methods of atomic force microscopy (AFM) allow for indirect assessment of the distribution via two-dimensional phase contrast maps, whereas more accurate three-dimensional techniques require either lengthy experiments or resource-intensive finite element (FE) modeling, which limits their practical application. This paper presents an approach to creating a synthetic dataset that will eventually allow the use of machine learning methods for accelerating the reconstruction of filler distribution patterns based on AFM phase-contrast data. The generation of a synthetic database for training the neural network is accomplished in the MATLAB environment and involves the variation of key parameters: particle geometry and depth, probe shape, and elastic and surface-energy properties of the materials. Data acquisition requires calculating the relationship between the particle depth and the phase shift determined by the tapping-mode AFM technique. The generated dataset reveals a direct correlation between the surface phase portraits (the standard tapping-mode AFM output signal) and the three-dimensional distribution of inclusions in the subsurface layer.

The study demonstrates the influence of geometric parameters (particle radius, depth, probe radius) on the quality and appearance of theoretical dissipation maps. It has been found that there is a nonlinear relationship between the depth of the filler particles and the dissipative losses causing a phase shift, which makes it possible to eliminate the ambiguities during the reconstruction of the structure. The obtained results open possibilities for rapid quantitative analysis of nanocomposites and, in the longer term, for consideration of more complex filler morphologies (agglomerates, chain-like structures).

Keywords: atomic force microscopy, phase portrait, dissipative losses, styrene-butadiene rubber, nanocomposite, machine learning, finite element modeling

Received: 23.07.2026 / **Accepted:** 28.09.2026 / **Published online:** 31.10.2026

Acknowledgements

The work was carried out as part of a major scientific project funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-15-2024-535 dated 23 April 2024).

References

1. *Anczykowski B., Gotsmann B., Fuchs H., Cleveland J.P., Elings V.B.* How to measure energy dissipation in dynamic mode atomic force microscopy. *Applied Surface Science*. 1999. Vol. 140, no. 3/4. P. 376–382. DOI: 10.1016/S0169-4332(98)00558-3
2. *Garcia R., Gómez C.J., Martinez N.F., Patil S., Dietz C., Magerle R.* Identification of Nanoscale Dissipation Processes by Dynamic Atomic Force Microscopy. *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 97, no. 1. 016103. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.016103
3. *Schröter K., Petzold A., Henze T., Thurn-Albrecht T.* Quantitative Analysis of Scanning Force Microscopy Data Using Harmonic Models. *Macromolecules*. 2009. Vol. 42, no. 4. P. 1114–1124. DOI: 10.1021/ma8024464
4. *Spitzner E.-C., Riesch C., Magerle R.* Subsurface Imaging of Soft Polymeric Materials with Nanoscale Resolution. *ACS Nano*. 2011. Vol. 5, no. 1. P. 315–320. DOI: 10.1021/nn1027278
5. *Izyumov R.I., Svistkov A.L.* Nanometer-scale Bodies Mechanical Interaction Mathematical Model. *Bulletin of Perm University. Mathematics. Mechanics. Computer Science*. 2024. No. 4. P. 35–45. DOI: 10.17072/1993-0550-2024-4-35-45
6. *Paruchuri A., Wang Y., Gu X., Jayaraman A.* Machine Learning for Analyzing Atomic Force Microscopy (AFM) Images Generated from Polymer Blends. *Digital Discovery*. 2024. Vol. 3, no. 12. P. 2533–2550. DOI: 10.1039/d4dd00215f
7. *Morozov I.A., Izyumov R.I., Beliaev A.Y.* AFM Indentation and Machine Learning in Analysis of Filler Distribution in Rubber. *Journal of Applied Polymer Science*. 2026. Vol. 143, no. 13. e70370. DOI: 10.1002/app.70370
8. *Thiem J., Cole D.P., Dubey U., Srivastava A., Ashraf C., Henry T.C., Bakis C.E., Vashisth A.* Using data science to locate nanoparticles in a polymer matrix composite. *Composites Science and Technology*. 2022. Vol. 218. 109205. DOI: 10.1016/j.compscitech.2021.109205
9. *Ghasemi H., Yazdani H.* Atomistic simulation and machine learning predictions of mechanical response in nanotube-polymer composites considering filler morphology and aggregation. *Computational Materials Science*. 2025. Vol. 246. 113399. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113399
10. *Izyumov R.I., Svistkov A.L.* Theoretical basis and experimental application of the dissipative properties analysis method for mapping particle distribution in the subsurface layer of elastomeric nanocomposites. *International Journal of Solids and Structures*. 2026. Vol. 341. 114298. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2026.114298
11. *Derjaguin B., Muller V., Toporov Y.* Effect of contact deformations on the adhesion of particles. *Journal of Colloid and Interface Science*. 1975. Vol. 53, no. 2. P. 314–326. DOI: 10.1016/0021-9797(75)90018-1
12. *Johnson K.L., Kendall K., Roberts A.D.* Surface energy and the contact of elastic solids. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*. 1971. Vol. 324, no. 1558. P. 301–313. DOI: 10.1098/RSPA.1971.0141
13. *Onozuka N., Nakajima K.* Atomic Force Microscopy Analysis of Velocity Dependent Adhesive Viscoelastic Contact. *Langmuir*. 2024. Vol. 40, no. 46. P. 24565–24575. DOI: 10.1021/acs.langmuir.4c03370