

# *Kakenhi tips for young researchers*

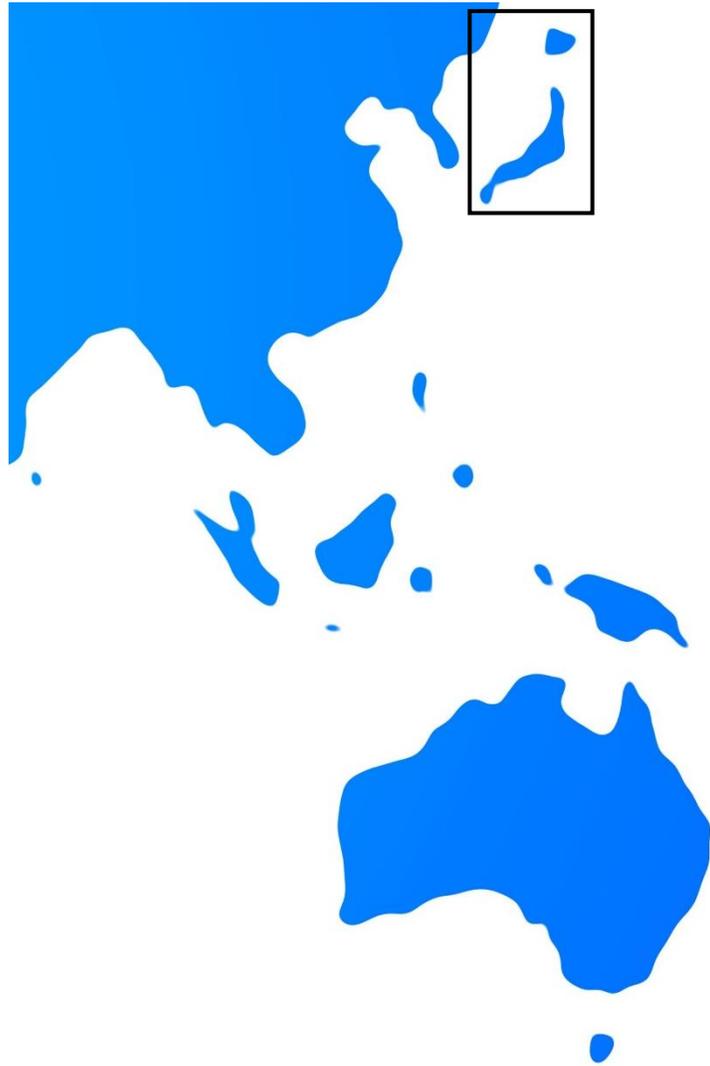
**Daniel Packwood**

[dpackwood@icems.kyoto-u.ac.jp](mailto:dpackwood@icems.kyoto-u.ac.jp)



**京都大学**  
KYOTO UNIVERSITY

# *Self-introduction*

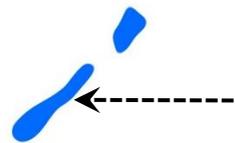
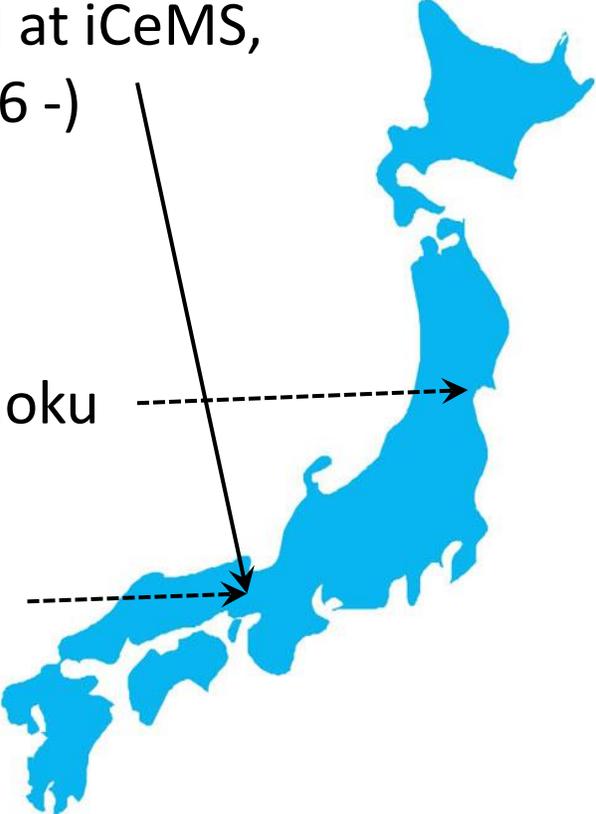


Senior lecturer and PI at iCeMS,  
Kyoto University (2016 -)

JST PRESTO (Collaborative Math)  
(2014 – 2018)

Assistant Professor at Tohoku  
University (2012 – 2016)

JSPS Postdoc at Kyoto University  
Graduate School of Science  
(2010-2012)



University of Canterbury (PhD 2010)  
Major: Chemistry, Minor: Statistics

# Why obtain research grants?



As well as paying for your research costs, research grants show that

- you have a **sound long-term research plan**,
- that people believe your **research will yield exciting outcomes**, and
- that you have the **support of the domestic community**.

It is very hard to demonstrate these things from your publication record alone.

# ***Kakenhi is the main source of public research funding in Japan***

## **Main categories:**

## **Target age:**

↑ Kiban S	50 onwards
Kiban A	Mid 40's onwards
Kiban B	Late 30's – late 40's
Kiban C	Mid 30's – early 40's
Wakate (Young Scientists)	Late 20's – late 30's
(+ other special categories)	



**As you go through your career, you work your way up from Wakate to Kiban S.**

# *My rocky Kakenhi history...*

## **Occasional hits!**

2014: Young researchers B (Wakate B)  
*Charge transport inside of organic crystals*

2016: Shingakujiyutsu Koubo  
*Nanostructure control with Bayesian optimisation*

2018: Young researchers (Wakate)  
*Thin-film deposition system combining experiment and information science*

⋮

## **Occasional misses!**

2017: Young researcher A (Wakate A)  
*Computational platform for work function control*

2018: Shingakujiyutsu Koubo  
*Determination of nanopore atomic structure via a math-materials collaboration*

2019: Kiban B  
*Molecular assembly control by fusion of computation and machine learning*

⋮

**All established researchers will have a long list of acceptance and rejections.**

**If you miss once, just re-think your strategy and try again.**

# What do you need to write?

Wakate application form: [https://www.jsps.go.jp/english/e-grants/data/r02/s-21\\_e.doc](https://www.jsps.go.jp/english/e-grants/data/r02/s-21_e.doc)

Form S-21: Research Proposal Document (forms to be uploaded)

Early-Career Scientist: 1

**1. Research Objectives, Research Method, etc.**  
This research proposal will be reviewed in the Basic Section of the applicant's choice. In filling this application form, refer to the Application Procedures for Grants-in-Aid for Scientific Research-KAKENHI.  
In this column, research objectives, research method, etc. should be described within 3 pages. A succinct summary of the research proposal should be given at the beginning.  
The main text should give descriptions, in concrete and clear terms, of (1) scientific background for the proposed research, and the "key scientific question" comprising the core of the research plan, (2) the purpose, scientific significance, and originality of the research project, and (3) what will be elucidated, and to what extent and how will it be pursued during the research period.  
[SUMMARY]

[MAIN TEXT]

\* Note:  
1. Read carefully the "Procedures for Preparing and Entering a Research Proposal Document" when preparing the document.  
2. The document should be written with font size 10-point or larger.  
3. The title and instructions on the upper part of each page should be left intact.  
4. Do not exceed the maximum number of pages specified in the instructions. In case blank page(s) occur, leave them as they are (do not eliminate any pages).  
5. These notes written in italics should be deleted when filling this column.

Early-Career Scientist: 4

**2. Research Development Leading to Conception of the Present Research Proposal, etc.**  
In this column, descriptions should be given within 1 page, of (1) applicant's research history leading to the conception of this research proposal and its preparation status, and (2) domestic and overseas trends related to the proposed research and the positioning of this research in the relevant field.

Early-Career Scientist: 5

**3. Applicant's Ability to Conduct the Research and the Research Environment**  
In this column, descriptions of (1) applicant's hitherto research activities, and (2) research environments including research facilities and equipment, research materials, etc. relevant to the conduct of the proposed research should be given within 2 pages to show the feasibility of the research plan by the applicant (Principal Investigator).  
If the applicant has taken leave of absence from research activity for some period (e.g. due to maternity and/or child-care), he/she may choose to write about it in "(1) applicant's hitherto research activities".

\* Note:  
1. The description in this column is to explain the feasibility of the research plan. On citing research achievements (research papers, books, patents, invited talks, etc.) they should be given not as an exhaustive list but as supporting evidence to prove the applicant's ability to conduct the proposed research.  
2. Sufficient information should be given so that the reviewers can identify the research achievements.  
In the case of a research paper, for example, the relevant bibliographic information, including the title of the paper, the author(s), the title and the volume of the journal, the publication year, and the pages of the article should be given.  
3. The research papers that can be cited are only those already published or accepted for publication.  
4. These notes written in italics should be deleted when filling this column.

Early-Career Scientist: 7

**4. Issues Relevant to Human Right Protection and Legal Compliance**  
(cf. Application Procedures for Grants-in-Aid for Scientific Research)  
In case the proposed research involves such issues that require obtaining consent and/or cooperation of the third party, consideration in handling of personal information, or actions related bioethics and/or biosafety (including the laws and regulations and the guidelines in the country/region(s) where the joint international research is to be conducted), the planned measures and actions for these issues should be stated within 1 page.  
This applies to research activities that would require approval by an internal or external ethical jury, such as research involving questionnaire surveys, interviews and/or behavior surveys (including personal histories and usage) including personal information, handling of donated specimens, human genome analysis, recombinant DNA, and experimentation with animals.  
If the proposed research does not fall under such categories, enter "N/A (not applicable)".

## Proposal:

Summary, goal, methods (3 pages)

## Background:

How did you choose this project? (1 page)

## Feasibility:

Past achievements and current research environment (2 pages)

## Compliance:

Human rights protections, etc (1 page)

# *Elephant in the room....*



<https://dotunadeoye.com/2019/09/18/whos-the-elephant-in-your-business-idea-room/>

## **2015 success rate for Japanese proposals**

## **English proposals**

Kiban A	23.5 %	13.6 %
Kiban B	24.7 %	11.4 %
Kiban C	29.9 %	23.7 %
Challenging (houga)	25.8 %	10.9 %
Wakate A	22.1 %	9.8 %
Wakate B	29.9 %	20.0 %

[http://www.mext.go.jp/b\\_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/037/shiryo/\\_\\_icsFiles/afieldfile/2015/06/17/1358876\\_05.pdf](http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu4/037/shiryo/__icsFiles/afieldfile/2015/06/17/1358876_05.pdf)

***A contributing factor:  
Casual discussions involving foreign scientists are limited***



**So what are these tips?**

# Tip # 1: Remember that the evaluators are really busy!

<https://ex02.net/archives/23>



The illustration shows a person with a distressed expression, slumped over a desk. They are surrounded by towering stacks of papers and documents, some of which are scattered on the desk. A thought bubble above their head contains the URL <https://ex02.net/archives/23>. A dashed line connects the URL to a sample proposal document.

様式S-8 (応募内容ファイル (添付ファイル項目)) 新学術 (公募) - 1

### 研究概要

(1) 研究目的等

新学術 (公募) - 2, 3 (研究目的), 6 (今回の研究計画を実施するために当たっての準備状況及び研究成果を社会・国民に提供する方法), 7 (これまでに得た研究成果), 8 (前回の公募研究の成果等) の内容を整理し、要約して記述してください。(1/2 頁程度、「研究計画・方法」と合わせて1頁以内)

Nanoporous metals display exceptional catalytic activity for a variety of chemical reactions. In this research, we will elucidate the atomic-scale structure of nanoporous metals via interdisciplinary mathematics-materials science research. Then, by correlating structure with catalytic activity, we will elucidate the relationship between atomic-scale structure and catalytic activity.

- **Problem** Elucidation of atomic-scale structure of nanoporous metals
- **Solution** Use small molecules as probes for the nanoporous metal structure
- **Mathematics** Create a new model and Markov chain theory based on random diffeomorphisms to a surface.
- **Materials science** Deposit probe molecules onto real nanoporous metals, use infrared spectroscopy and math model to get atomic-scale structure
- **Contribution to Ryoiki** Act as a bridge between math and materials and facilitate interdisciplinary collaboration.

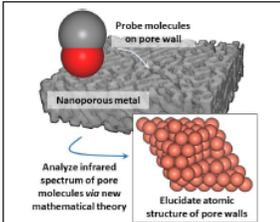
We will use small molecules as probes for the atomic-scale structure of nanoporous metals (Fig 1). In the mathematics part of our study, we will create a model for the structures of the pore walls. In the materials science part, we will deposit probe molecules onto the pore walls and measure their infrared (vibrational) spectra. By interpreting the spectra with the model, we will obtain the pore wall atomic structure. By fitting catalytic activities to the atomic structures, we will then establish a relationship between catalytic activity and nanopore atomic structure.

(2) 研究計画・方法

新学術 (公募) - 4, 5 (研究計画・方法) の内容を整理し、要約して記述してください。(1/2 頁程度、「研究目的等」と合わせて1頁以内)

**Mathematics:** By incorporating surface deformation into our GAMMA model (Nat. Commun. 8, 2017, 14483), we will create a new model for the possible structures of the pore walls inside of nanoporous metals. To predict the structures of the pore walls where the probe molecules adsorb, we will solve the model via a new theory for Markov chains on spaces of deformed surfaces in  $\mathbb{R}^3$ . By establishing a correspondence between these surfaces and atomic structure, the pore wall atomic structure can be predicted by simulating this Markov chain.

**Materials science:** Real nanoporous metals will be created and probe molecules will be deposited onto their surfaces, using our ultra-high vacuum deposition system. Infrared (IR) spectroscopy will then measure the infrared (vibrational) spectra of probe molecules. By analyzing the infrared spectra via the mathematical theory above, we will elucidate the structure of the pore walls with atomic precision.



The diagram illustrates the experimental setup. It shows a 3D model of a nanoporous metal structure with a grey and red probe molecule adsorbed on its surface. Below this, a cluster of red spheres represents the atomic structure of the pore walls. A circular arrow indicates the process of analyzing the infrared spectrum of the probe molecules using a new mathematical theory to elucidate the atomic structure of the pore walls.

Figure 1. Summary of the project. We will elucidate the atomic structure of the pore walls of nanoporous metals.

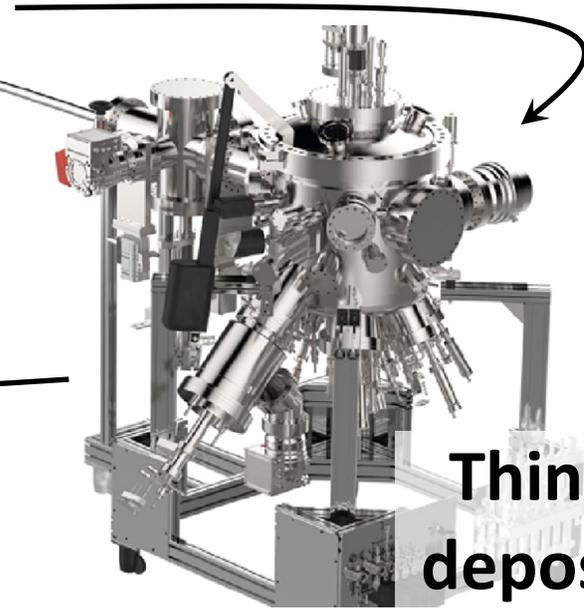
Make your proposal **interesting and easy-to-understand** for the evaluator.

*Tip # 2: On the first page,  
articulate your vision and sell it*

**Artificial  
intelligence**



Set parameters



Quality feedback

**Thin film  
deposition  
machine**



**Solid-state  
batteries**



**Solar cells**



**Organic displays**

Project outcome  
(should be interesting to others)

Long term outcome  
(should be relevant to others)

# Application form (first page)

# Vision

## 1 研究目的、研究方法など

本研究計画審査は「小区分」の審査区分で審査されます。記述に当たっては、「科学研究費助成事業における審査及び評価に関する規程」（公募要領111頁参照）を参考にしてください。  
 本欄には、本研究の目的と方法などについて、3頁以内で記述してください。  
 冒頭にその概要を簡潔にまとめて記述し、本文には、(1)本研究の学術的背景、研究課題の核心をなす学術的「問い」、(2)本研究の目的および学術的独自性と創造性、(3)本研究で何をどのように、どこまで明らかにしようとするのか、について具体的かつ明確に記述してください。  
 (概要) ※10行程度で記述してください。

海外の大手デバイスメーカーが有機発光ダイオードを活用する中、日本業界は有機エレクトロニクス(=有機EL)を取り入れるようかなりの圧力をかけられている。有機ELは安い・柔らかい・薄い・軽いというメリットがよく掲げられているが、高性能・長期寿命デバイス作成において重要な段階「結晶性の高い有機薄膜を蒸着すること」の難しさが問題視されている。本研究では、**実験と機械学習の融合により良好な結晶性が保証される有機薄膜蒸着システムを構築する(主な目標)**。具体的には、目に見えない相関を抽出できるベイズ最適化法で薄膜蒸着装置を左右し、高い結晶性を得るための蒸着パラメーター(基板の温度、蒸着速度など)をかつてない速度で絞る。主目標の達成後、**薄膜の分子レベル構造の解明(副目標1)・長期寿命有機ELの作り方の発見(副目標2)**を目指し、業界への還元を狙う。

(本文) ★主な目標 「結晶性最適化システム」の構築★  
 有機ELである有機効果トランジスタ(OFET)、有機発光ダイオード(OLED)などを実用化するには、それを用いた有機薄膜を基板に綺麗に蒸着することが極めて重要である。主には、優れた結晶性が保証される有機薄膜蒸着システム(=システム)の構築を目指す(図1)。このシステムは実験と機械学習を融合し、**蒸着パラメーター(蒸着速度、蒸着時間、基板の温度、加熱時間、など)と薄膜の電子回折図形の相関を抽出することにより最適な蒸着パラメーターを迅速に絞り、プリントドエレクトロニクス・OLEDディスプレイなどの効率的な大量生産へさらに進歩する。**

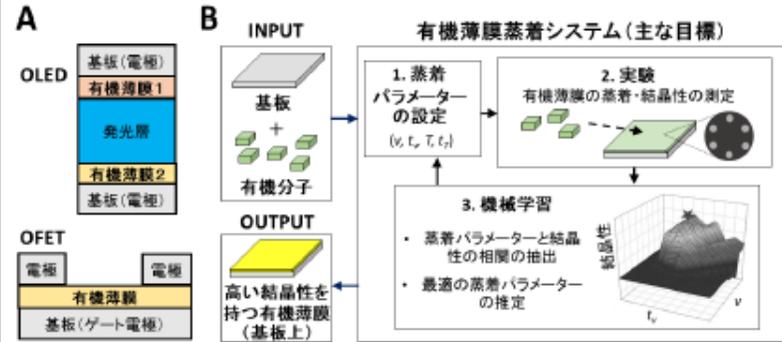
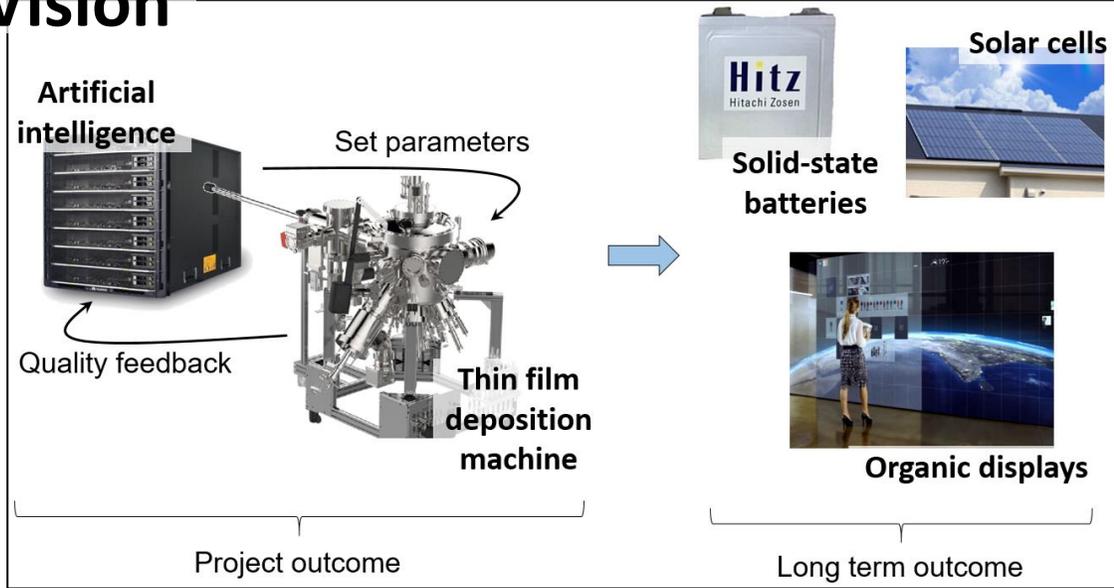


図1 (本研究の主な目標) (A) 有機発光ダイオード(OLED)と有機効果トランジスタ(OFET)の簡単な構造。有機薄膜は大文字で強調される (B) 優れた結晶性が保証される有機薄膜蒸着システム(=システム)(主な目標)。2. に書いてある黒い円形は電子回折図形(=LEEDパターン)を表す。



(Project outcome)  
 In this project, we will combine experiment with machine learning to create a thin film deposition system that can guarantee high-quality crystallinity.

(Long-term outcome)  
 ... towards efficient mass production of printed electronics, organic displays, and so on.

# Tip # 3: One figure per page (to show a clear flow)

1 研究目的、研究方法など  
海外の大手ディスプレイメーカーが有機発光ダイオードを活用中。本業界は有機ELディスプレイ（有機発光ダイオード）の普及を促すための研究開発を進めている。本研究では、実験と機械学習の融合により、有機ELディスプレイの性能向上を図ることを目的とする。具体的には、蒸着パラメータと結晶性の相関を抽出し、最適な蒸着パラメータを推定することを目指す。

2 本研究の着想に至った経緯など  
本研究の着想は、申請者のJSTさきがけ研究（数理モデルでグラフェン合成の制御、H26-10-H30-3）の次の挑戦として考えられた。有機分子sub-mono layerの分子レベル構造の予測を目的としたさきがけ研究では、国内外の招待発表、招待記事などで高く評価され、JST-CREST細野領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」の本領域が求める研究の具体例となった[7]。本研究の切っ掛けは、さきがけ研究の期に加入したプログラムのJST sIFOSである。そのときに有機ELの実用化に関する困難についての認識が高まり、機械学習を有機EL製造過程に導入しようという発想があった。そして、今年度の戦略目標「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」を検討したうえで、本研究の主な目標「有機薄蒸着システム」と副目標1、2を定めた。

3 機械学習  
真空蒸着装置から取得されたデータ（LEEDパターン）を用いて、蒸着パラメータと結晶性の相関を抽出し、最適な蒸着パラメータを推定する。具体的には、機械学習を用いて、蒸着パラメータと結晶性の相関を抽出し、最適な蒸着パラメータを推定する。この手法では、システムはどんな有機薄蒸着システムかを分子レベルで解明し、副目標1、2を達成する。

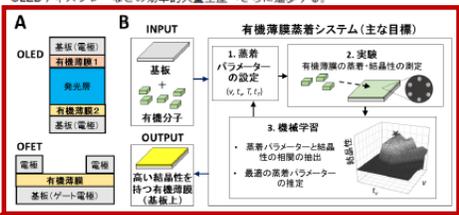
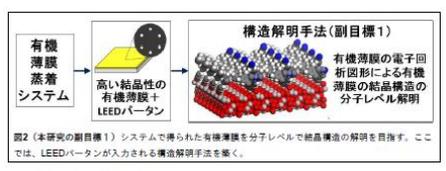


図1 (本研究の主な目標) (A) 有機発光ダイオード (OLED) と有機効果トランジスタ (OFET) の簡単な構造。有機薄蒸着システムで構築される (B) 優れた結晶性が保証される有機薄蒸着システム (=システム) (主な目標)。2. に書いてある高い円形は電子回折図形 (=LEEDパターン) を表す。



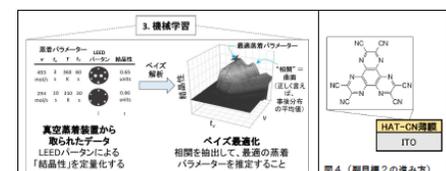
副目標1 薄蒸着結晶構造を解明すること システムで何を作った? \*  
副目標1では、高く評価された研究成果 GAMMA アプローチ (Packwood et al. Nature Communications, 8, 2017, 14463) の一般化を行い、システムに測定される電子回折図形 (=LEEDパターン) に入力される構造解析手法を創生する (図2)。この手法では、システムはどんな有機薄蒸着システムかを分子レベルで解明し、副目標1、2を達成する。

副目標2 長期寿命 OLED の作り方の解明 システムによる日本業界への還元 \*  
薄蒸着の結晶性は OLED の寿命と強い関係があると考えられる [1]。副目標2では、システムを活用し、実際の OLED に入っている有機薄蒸着を優れた結晶性で得るための蒸着パラメータを構築することにより日本業界への還元を図る。

\*本研究の学術的貢献・独自性\*  
日本業界は、有機 EL に投資しなければディスプレイ供給事業を長く続けられない [2]。日本の最大ディスプレイメーカー (株式会社ジャパンディスプレイ) は、iPhone 用の無機 LTP ディスプレイの主要な供給先であり、総利益の54%を Apple から受け取っている。しかし、OLED ディスプレイが搭載されている iPhoneX の公開で、ジャパンディスプレイの今後の見通しが暗くなった [3]。日本企業は有機 EL 分野で後ろから追い越すには、有機 EL 開発に関わる技術的課題を解決することが戦略となる。

応用数学・情報科学が先行している中、有機EL開発に機械学習を導入することが大変魅力的になってきた。本研究では、高性能・長期寿命の有機EL開発において大きな課題「結晶性の高い有機薄蒸着を得るための蒸着パラメータの特定」を機械学習で解決し、従来の経験的試行 (実証的経験による試行錯誤) を乗り越えることを望む。申請者が分かっている範囲では、機械学習をデバイス開発に導入しようとする研究グループはどこにもないので、本研究のインパクト・独自性を保証できる。

\*本研究で何をどこまでにするか・研究の進み方\*  
主な目標 (H30年4月-H31年3月)。研究期内で、半導体表面や金属の単純結晶表面という基板に吸着した低有機分子薄蒸着 (ペンタセンなど) のためのシステムを構築する。



副目標2 (H31年4月-H32年3月)。研究期内では、indium tin oxide (ITO) 上のHAT-CN薄蒸着のための最適蒸着パラメータをシステムで発見する (図4)。ITO上のHAT-CNは実際のOLED開発でよく利用されている材料なので、長寿命OLED開発において相応しいターゲットである。

機械学習の部分 (図3) について、ベイズ最適化というアルゴリズムをハイパフォーマンス計算機に搭載する。ベイズ最適化では、真空蒸着装置から得られたデータをベイズ解析で処理し、蒸着パラメータと結晶性の相関を推定する (Packwood and Hitosugi. Applied Physics Express 10, 2017, 065502, and [4, 5, 6])。ここでは、LEEDパターンにより「結晶性」を定量化することとベイズ最適化が依存するハイパーパラメータを設定することが必要であり、それらを理論値から推定することが期待できる。そして、ベイズ最適化を実行するコードを上記のソフトウェアに導入すると、薄蒸着システムを得られる。システムを評価するために、*in-situ*分子で高結晶性の薄蒸着が確認されているかを検証する。結晶に蒸着された後、ベイズ最適化のアルゴリズムの調整を再検討する。

副目標1 (H30年4月-H31年12月) 半導体・金属の表面に吸着した低有機分子薄蒸着のための構造解析手法を研究期内で作成する。具体的には、与えられたLEEDパターンに対して薄蒸着の試行構造を形成して、マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC法) を機械学習で解明し、従来の経験的試行 (実証的経験による試行錯誤) を乗り越えることを望む。申請者が分かっている範囲では、機械学習をデバイス開発に導入しようとする研究グループはどこにもないので、本研究のインパクト・独自性を保証できる。

1. 本研究の着想に至った経緯  
本研究の着想は、申請者のJSTさきがけ研究 (数理モデルでグラフェン合成の制御、H26-10-H30-3) の次の挑戦として考えられた。有機分子sub-mono layerの分子レベル構造の予測を目的としたさきがけ研究では、国内外の招待発表、招待記事などで高く評価され、JST-CREST細野領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」の本領域が求める研究の具体例となった [7]。本研究の切っ掛けは、さきがけ研究の期に加入したプログラムのJST sIFOSである。そのときに有機ELの実用化に関する困難についての認識が高まり、機械学習を有機EL製造過程に導入しようという発想があった。そして、今年度の戦略目標「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」を検討したうえで、本研究の主な目標「有機薄蒸着システム」と副目標1、2を定めた。

2. 関する国内外の研究動向と本研究の位置付け  
産業的ニーズにも関わらず、高い結晶性を得るための自動システムはまだ発表されていないとみられる。日本業界では、機械学習をデバイス開発過程に導入しようという動きがあるが、具体的な成果はまだ発表されていない。日本国内外では、材料科学と機械学習の共同研究がホトトビクになったが、今までの研究はバーチャルスクリーニング (=第一原理計算による材料発見) に限定される。以上により、本研究は実際のデバイス開発過程と機械学習の初めての実績になる見込がある。

3. 準備状況と実行可能性  
本研究のための研究スペース (京都大学にある実験室、25m<sup>2</sup>)、ハイパフォーマンス計算機 (144コアのIntel クラスタ)、超真空薄蒸着装置 (Onikoro製) はすでに揃っている (図5)。しかし、薄蒸着装置に設置されている蒸着源が融点の高い無機材料のためのもので、有機分子を分解してしまう傾向がある。新しい蒸着源、消耗品費 (蒸着物) や装置のために本申請を提出する。

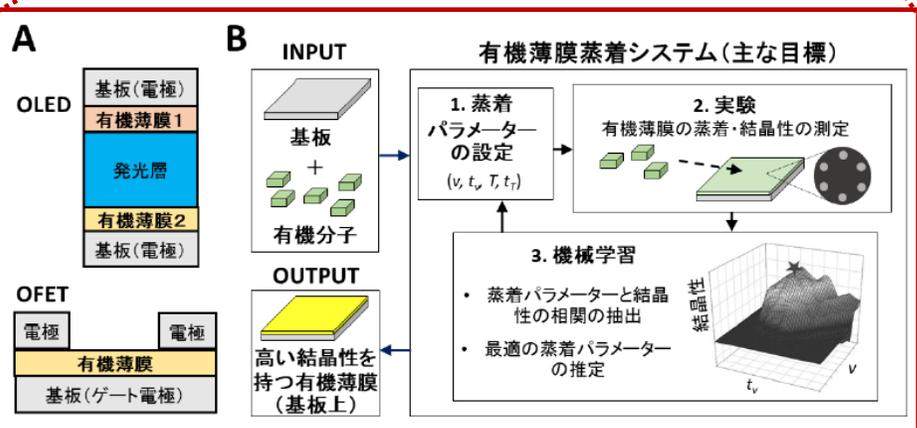


図5 主な目標を達成するための必要な装置があります

JST SciFOS期内で[NP大日本印刷株式会社や株式会社日本触媒などの] 知り合いが、研究成果を日本業界へフィードバックするためのメカニズムがある。

参考文献  
[1] Pakagawa et al. Appl. Phys. Express 7, 2014, 082104  
[2] T. Amato, Bloomberg Technology (October 17 2016)  
[3] M. Watanabe, Appl. Phys. Express 9 2017  
[4] Soko et al. Phys. Rev. Lett. 115, 2015, 209901  
[5] Ueno et al. Mater. Discovery 4, 2016, 18  
[6] Ju et al. Phys. Rev. X 7, 2017, 021044  
[7] http://www.sony.co.jp/atl/jp/img/psu\_material\_170424.pdf

The flow of the proposal should be clear at a glance. To ensure this, use one figure per page. The first figure should summarise the project (background, method, main goal). Figures should be clear when printed in black-and-white. If figures are not normal in your field, make sure the flow is clear from headings and text formatting.



# Tip # 4: Write in short paragraphs

有機薄膜蒸着システム → 高い結晶性の有機薄膜 + LEEDパターン → 構造解明手法(副目標1)

有機薄膜の電子回析図形による有機薄膜の結晶構造の分子レベル解明

図2 (本研究の副目標1) システムで得られた有機薄膜を分子レベルで結晶構造の解明を目指す。ここでは、LEEDパターンが入力される構造解明手法を築く。

★副目標1 薄膜結晶構造を解明すること システムで何を作った?★  
副目標1では、高く評価された研究成果 GAMMA アプローチ (Packwood et al. *Nature Communications*. 8, 2017, 14463) の一般化を行い、システムに測定される電子回析図形 (=LEED パターン) に入力される構造解明手法を創生する (図2)。この手法では、システムはどんな有機薄膜を作るかを分子レベルで解明し、かつ、分子構造と薄膜結晶構造を繋げるコンセプトを抽出することも可能である。

★副目標2 長期寿命 OLED の作り方の解明 システムによる日本業界への還元★  
薄膜の結晶性は OLED の寿命と強い関係があると考えられる [1]。副目標2では、システムを活用し、実際の OLED に入っている有機薄膜を優れた結晶性で得るための蒸着パラメーターを模索することにより日本業界への還元を狙う。

★本研究の学術的背景・独自性★  
日本産業界は、有機 EL に投資しなければディスプレイ供給事業を長く続けられない[2]。日本の最大ディスプレイメーカー (株式会社ジャパンディスプレイ) は、iPhone 用の無機 LCD ディスプレイの主要の供給先であり、総合利益の54%を Apple から受け取っている。しかし、OLED ディスプレイが搭載されている iPhoneX の公開で、ジャパンディスプレイの今後の見通しが暗くなった [3]。日本企業は有機 EL 分野で後から追い越すには、有機 EL 開発に関わる技術的課題を解決することが戦略となる。

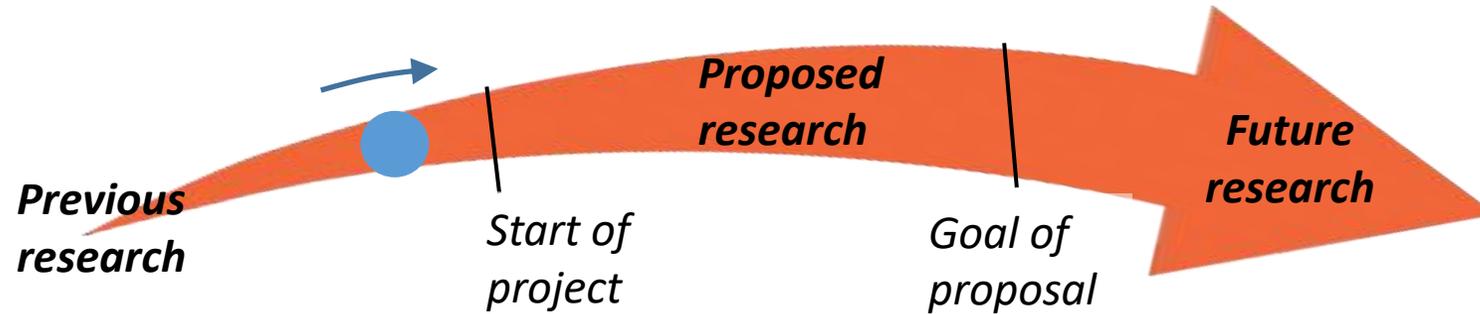
応用数学・情報科学が流行っている中、有機EL開発に機械学習論を導入することが大変魅力的になってきた。本研究では、高性能・長期寿命の有機EL開発において大きな課題「結晶性の高い有機薄膜を得るための蒸着パラメーターの特定」を機械学習で解決し、従来の課題対策「直感的経験による試行錯誤」を乗り越えることを狙う。申請者が分かっている範囲では、機械学習をデバイス開発に導入しようとする研究グループはどこにもいないので、本研究のインパクト・独自性を保証できる。

★本研究で何をどこまでにするか・研究の進み方★  
主な目標 (H30年4月-H31年3月)。研究期内で、半導体表面や金属の単結晶表面という基板に吸着した低有機分子薄膜 (ペンタセンなど) のためのシステムを構築する。

- Make one point per paragraph.
- **Key words in bold.** Proposal should be understandable by reading bold parts only. But do not use too much bold text.
- Have one line of space between paragraphs. This makes the proposal look easier to read.
- Avoid tiny font sizes. If you run out of space, you need write more succinctly.

## Tip # 5:

# Convey a sense of momentum through your writing



- The proposed project should feel like part of a **longer, personal trajectory**.
- Describe how your previous research **brought you** to the proposed project, and how your proposed project **will bring you** to your future research.
- This also shows that you **are thinking about your long-term career**.

Early-Career Scientists 4

2. Research Development Leading to Conception of the Present Research Proposal, etc.  
In this column, descriptions should be given within 1 page, of (1) applicant's research history leading to the conception of this research proposal and its preparation status, and (2) domestic and overseas trends related to the proposed research and the positioning of this research in the relevant field.

*"...applicant's research history leading to the conception of this research proposal..."*

研究概要

(1) 研究目的等

新学術 (公募) - 2, 3 (研究目的), 6 (今回の研究計画を実施するために当たっての準備状況及び研究成果を社会・国民に発信する方法), 7 (これまでに受けた研究費とその成果等), 8 (前回の公募研究の成果等) の内容を簡潔にまとめて記述すること。(1/2 頁程度。「研究計画・方法」と合わせて 1 頁以内)

・ 金属錯体の非対称性に基づく二次元磁性 第一原理構造予測で材料探索 ・

長距離磁気秩序を示す二次元材料はスピントロニクスのために非常に期待されている。本研究では、非対称金属錯体の自己組織化で形成した単一層を対象とし、第一原理から単一層の構造を予測できる手法 (= first-principles structure prediction および FPSP コード) の開発を目指す (図 1A)。また、コードによるバーチャルスクリーニングを行い、長距離磁気秩序を示す単一層を形成できる金属錯体を探索する (図 1B)。

この探索を行うために、不対電子間の相互作用 (強磁性相互作用、反強磁性相互作用) が電子間距離に依存することを活かす。具体的には、金属錯体の非対称性による単一層中の不対電子間距離に変異を導入し、新たなスピン配置を引き起こす。そして、非対称性を維持しながら金属錯体間相互作用を最適化して、長距離の強磁性・反強磁性を同時に示す単一層を形成できる金属錯体を絞り込む。

本研究では、前に作られたコード [Nature Communications 2017, 2018] をさらに発達し、不対電子・非対称性を有する金属錯体を取り扱うことで従来の第一原理構造予測と全く違う方向性へ進む。さらに、領域内の実験関係共同研究者を見つけ、「配位アシンメトリー領域」へ積極的に貢献しながら材料科学実験へのフィードバックを狙う。

課題: 長距離磁気秩序を示す金属錯体単一層の探索

解決: 金属錯体単一層の構造を第一原理から予測できるコードを開発し、適当な単一層をバーチャルに探索すること

非対称性の出番: 金属錯体の非対称性が単一層中の長距離磁気秩序を引き起こすこと

領域への貢献: 配位アシンメトリーに基づく機能を発揮する材料を理論的に研究すること

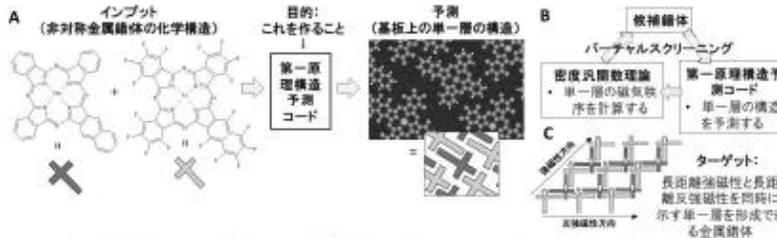


図 1. 本研究の目的・計画 (A)H31 年度は、非対称金属錯体の自己組織化で形成する単一層を対象とし、単一層の原子構造を予測できるコード (以下、FPSP コード) の開発を目指す。(B)H31 年度は、コードと密度汎関数理論によってバーチャルスクリーニングを行い、長距離磁気秩序を示す単一層を形成できる金属錯体の探索を目指す。(C) 金属錯体の非対称性が引き起こす長距離磁気秩序の例。

(2) 研究計画・方法

新学術 (公募) - 4, 5 (研究計画・方法) の内容を簡潔にまとめて記述すること。(1/2 頁程度。「研究目的等」と合わせて 1 頁以内)

平成 31 年度 (図 1A): FPSP コードを作成するには、金属錯体単一層のエネルギーを計算するための方法と単一層の平衡構造を計算できるモンテカルロ法が望ましい。パラメーターや単一層の候補構造がかなり多いので、円滑に進むために申請者の機械学習専門知識を活用する。具体的には、金属錯体の配置の例とそのエネルギーが記入されたデータベースを形成し、データベース中の相関をパラメーターフリー機械学習 (= カーネル型機械学習) で抽出する。この相関を活かすと単一層のエネルギーを迅速に計算するかつ、単一層の候補構造の数を劇的に減らすことが可能になる。以上により、単一層のエネルギーを計算するための方法と効率の良いモンテカルロ法へ同時に到達する。データベースを密度汎関数理論で形成するので、単一層の構造を第一原理計算とほぼ同じ精度で予測できると考えられる。

平成 32 年度 (図 1B,C): バーチャルスクリーニングを行うために、Fe や Mn を有する非対称ポルフィリン誘導体を候補錯体とする。そして、様々な候補錯体について FPSP コードで単一層の構造を予測し、単一層の磁気秩序を密度汎関数理論で計算する。ここではポルフィリン誘導体の化学構造と単一層の磁気秩序の相関を観察しながら、長距離磁気秩序を示す単一層を形成させる候補金属錯体を絞り込むように進める。

# Tip # 6: Only if possible – First page in Japanese

- A good translation will improve the chances of success. However, if nuances are lost then the chances will decrease.
- If a trusted colleague is available, do this with them and ask about the phrases they choose (helps if you can read Japanese).
- Google Translator is not recommended.

# Tip # 7: Demonstrate insider Japan knowledge

**有機薄膜蒸着システム** → **高い結晶性の有機薄膜+LEEDパターン** → **構造解明手法(副目標1)**

有機薄膜の電子回折図形による有機薄膜の結晶構造の分子レベル解明

図2(本研究の副目標1) システムで得られた有機薄膜を分子レベルで結晶構造の解明を目指す。ここでは、LEEDパターンが入力される構造解明手法を築く。

**\*副目標1 薄膜結晶構造を解明すること システムで何を作った?\***  
副目標1では、高く評価された研究成果 GAMMA アプローチ (Packwood et al. Nature Communications. 8, 2017, 14463) の一般化を行い、システムに測定される電子回折図形 (=LEED パターン) に入力される構造解明手法を創生する (図2)。この手法では、システムはどんな有機薄膜を作るかを分子レベルで解明し、かつ、分子構造と薄膜結晶構造を繋げるコンセプトを抽出することも可能である。

**\*副目標2 長期寿命 OLED の作り方の解明 システムによる日本業界への還元\***  
薄膜の結晶性は OLED の寿命と強い関係があると考えられる [1]。副目標2では、システムを活用し、実際の OLED に入っている有機薄膜を優れた結晶性で得るための蒸着パラメータを探索することにより日本業界への還元を狙う。

**\*本研究の学術的背景・独自性\***  
日本業界は、有機 EL に投資しなければディスプレイ供給事業を長く続けられない[2]。日本の最大ディスプレイメーカー (株式会社ジャパンディスプレイ) は、iPhone 用の無機 LQD ディスプレイの主要の供給先であり、総合利益の54%を Apple から受け取っている。しかし、OLED ディスプレイが搭載されている iPhoneX の公開で、ジャパンディスプレイの今後の見通しが暗くなった [3]。日本企業は有機 EL 分野で後から追い越すには、有機 EL 開発に関わる技術的課題を解決することが戦略となる。

応用数学・情報科学が流行っている中、有機EL開発に機械学習論を導入することが大変魅力的になってきた。本研究では、高性能・長期寿命の有機EL開発において大きな課題「結晶性の高い有機薄膜を得るための蒸着パラメータの特定」を機械学習で解決し、従来の課題対策「直感的経験による試行錯誤」を乗り越えることを狙う。申請者が分かっている範囲では、機械学習をデバイス開発に導入しようとする研究グループはどこにもないので、本研究のインパクト・独自性を保証できる。

**\*本研究で何をどこまでにするか・研究の進み方\***  
主な目標 (H30年4月-H31年3月)、研究期限内で、半導体表面や金属の単結晶表面という基板に吸着した低有機分子薄膜 (ペンタセンなど) のためのシステムを構築する。

Japan's largest display maker (Japan Display) is the main producer of LCD displays for the iPhone, and receives 54 % of its total profit from Apple. However, with the announcement of the iPhoneX, which uses an OLED display, the future of Japan Display has become bleak.

Upon examining this year's Strategic Goals from MEXT (New Material Development Method by Combination of Experiment and Data Science), I formulated this project.

**2 本研究の着想に至った経緯など**

本欄には、(1)本研究の着想に至った経緯、(2)関連する国内外の研究動向と本研究の位置づけ、(3)準備状況と実行可能性について1頁以内で記述してください。

**1. 本研究の着想に至った経緯**

本研究の着想は、申請者のJSTさきがけ研究 (数理モデルでグラフェン合成の制御、H26. 10-H30. 3) の次の挑戦として考えられた。有機分子sub-monolayerの分子レベル構造の予測を目指したさきがけ研究では、国内外の招待発表、招待記事などで高く評価され、JST CREST細野領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」の「本領域が求める研究」の具体的な例となった [7]。本研究の切っ掛けは、さきがけ研究の期内に参加したプログラムJST SciFOSである。そのときに有機ELの実用化に関する困難についての認識が高まり、機械学習を薄膜蒸着過程に導入しようという着想があった。そして、今年度の戦略目標「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」を検討したうえ、本研究の主な目標「有機薄膜蒸着システム」と副目標1、2を図った。

**2. 関連する国内外の研究動向と本研究の位置付け**

産業のニーズにも関わらず、高い結晶性を得るための自動システムはまだ発表されていないとみられる。日本業界では、機械学習をデバイス開発過程に導入しようという動きがあるが、具体的な成果はまだ発表されていない。日本国内外では、材料科学と機械学習の共同研究がホットトピックになったが、今までの研究はバーチャルスクリーニング (=第一原理計算による材料発見) に限定される。以上により、本研究は実際のデバイス開発過程と機械学習の初めての成果になる見通がある。

**3. 準備状況と実行可能性**

本研究のための研究スペース (京都大学にある実験室、25m<sup>2</sup>)、ハイパフォーマンス計算機 (144コアのIntelクラスター)、超真空薄膜蒸着装置 (Omicron製) はすでにある (図5)。しかし、薄膜蒸着装置に設置されている蒸着源が融点の高い無機材料のためのもので、有機分子を分解してしまう傾向がある。新しい蒸着源、消耗品費 (蒸着物) や旅費のために本申請を提出する。

**図5 主な目標を達成するための必要な装置があります**

JST SciFOS期内でDNP日本印刷株式会社や株式会社日本触媒などの知り合いができ、研究成果を日本業界へフィードバックするためのメカニズムがある。

参考文献

[4] Sako et al. Phys. Rev. Lett. 115, 2015, 205901  
[1] Fukugawa et al. Appl. Phys. Express 7, 2014, 082104  
[5] Ueno et al. Mater. Discovery 4, 2016, 18  
[2] T. Amano, Bloomberg Technology (October 17 2016)  
[6] Ju et al. Phys. Rev. X 7, 2017, 021024  
[3] M. Wuerthele. AppleInsider (February 9 2017)  
[7] http://www.smyyaka.jst.go.jp/image/c\_material\_170424.pdf

This may make you feel familiar to the evaluators (even if they do not know who you are).

## Tip # 8: Think carefully about which 'research field' you choose

Basic Section	
28010	Nanometer-scale chemistry-related
28020	Nanostructural physics-related
28030	Nanomaterials-related
28040	Nanobioscience-related
28050	Nano/micro-systems-related
Medium-sized Section 29: Applied condensed matter physics and related fields	
Basic Section	
29010	Applied physical properties-related
29020	Thin film/surface and interfacial physical properties-related
29030	Applied condensed matter physics-related
Medium-sized Section 30: Applied physics and engineering and related fields	
Basic Section	
30010	Crystal engineering-related
30020	Optical engineering and photon science-related
Medium-sized Section 31: Nuclear engineering, earth resources engineering, energy engineering, and related fields	
Basic Section	
31010	Nuclear engineering-related
31020	Earth resource engineering, Energy sciences-related

When you submit your proposal, you must select a research field.

Your proposal will be evaluated by senior researchers from that field.

**Look through the entire list and choose appropriately!**

### List of fields:

[http://www.mext.go.jp/component/a\\_menu/science/detail/\\_\\_icsFiles/afieldfile/2018/10/16/1397892\\_01\\_1.pdf](http://www.mext.go.jp/component/a_menu/science/detail/__icsFiles/afieldfile/2018/10/16/1397892_01_1.pdf)

## *Tip # 9: Last but not least, familiarize yourself with E-rad!*



<https://www-shinsei.jsps.go.jp/kaken/index.html>

- E-rad is the website where you submit your proposal.
- Access requires an ID and password. Kyoto University provides this. Ask your secretary to obtain the ID and password from the administration.
- As well as uploading your proposal, you must enter additional information (amount of money required, etc). Check the submission page well ahead of the deadline.

***Final comments***



1 研究目的、研究方法など

本研究計画書は「不区分」の審査区分で審査されます。記述に当たっては、「科学技術振興機構事業における審査及び評価に関する指針」(企画書編第11章第3節)を参考にしてください。

本業には、本研究の目的と方法などについて、3頁以内で記述してください。

冒頭にその概要を簡潔にまとめて記述し、本文には、(1)本研究の学術的意義、研究課題の核心となる学問的「問い」、(2)本研究の目的および学問的独自性を創発性、(3)本研究で何をどのように、どこまで明らかにしようとするのか、について具体的な説明を記述してください。

(概要) ※10行程度で記述してください。

海外の大手デバイスメーカーが有機発光ダイオードを活用する中、日本業界は有機エレクトロニクス(=有機EL)を取り入れるようかなりの圧力をかけられている。有機ELは安い・柔らかい・薄い・軽いというメリットがよく挙げられているが、高性能・長期寿命デバイス作成において重要な段階「結晶性の高い有機薄膜を蒸着すること」の難しさが問題視されている。本研究では、実験と機械学習の融合により良好な結晶性が保証される有機薄膜蒸着システムを構築する(主な目標)。具体的には、目に見えない相関を抽出できるベイズ最適化法で薄膜蒸着装置を左右し、高い結晶性を得るための蒸着パラメーター(基板の温度、蒸着速度など)をかつてない速度で絞る。主目標の達成後、薄膜の分子レベル構造の解明(副目標1)・長期寿命有機ELの作り方の発見(副目標2)を目指し、業界への還元を迫る。

(本文) \*主な目標「結晶性最適化システム」の構築\*

有機ELである有機効果トランジスタ(OFET)、有機発光ダイオード(OLED)などを実現するには、それを用いた有機薄膜を基板に綺麗に蒸着することが極めて重要である。主には、優れた結晶性が保証される有機薄膜蒸着システム(=システム)の構築を目指す(図1)。このシステムは実験と機械学習を融合し、蒸着パラメーター(蒸着速度、蒸着時間、基板の温度、加熱時間、など)と薄膜の電子回折図形の相関を抽出することにより最適な蒸着パラメーターを迅速に絞り、プリントドエレクトロニクス・OLEDディスプレイなどの効率的な大量生産へさらに進捗する。

図1(本研究の主な目標)(A)有機発光ダイオード(OLED)と有機効果トランジスタ(OFET)の駆動構造。有機薄膜は大文字で強調される。(B)優れた結晶性が保証される有機薄膜蒸着システム(=システム)(主な目標)。2. に書いている高い円形は電子回折図形(=LEEDパターン)を表す。

- These tips are only based on my experience and do not guarantee success. You should take time to find what works for you.
- You should put a good effort into writing Kakenhi. It brings important career benefits and is a great chance to clarify your research direction.