सी डैक
CDAC

राष्ट्रीय परम सुपर कंप्यूटिंग सुविधा

वर्ष 2016-17 की वार्षिक रिपोर्ट

NPSF
National PARAM Supercomputing Facility

2016-17

CENTRE FOR DEVELOPMENT OF ADVANCED COMPUTING

www.cdac.in

महानिदेशक का शुभकामना संदेश

1988 में इसकी स्थापना के बाद से, सी-डैक देश में एचपीसी प्रसार के लिए महत्वपूर्ण भूमिका निभा रहा है| राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा (एनपीएसएफ़) को विभिन्न शैक्षणिक और अनुसंधान संस्थानों के शोधकर्ताओं को उनके शोध हेतु एचपीसी सिस्टम की आवश्यकता के लिए (एचपीसी) संसाधनों के प्रावधान के साथ स्थापित किया गया था| परम यूवा के परम यूवा II में अपग्रेड से सी-डैक को सुपरकंप्यूटिंग केंद्रों के पेटस्केल संघ में शामिल होने में मदद मिली है|

मैं ये विशेषधिकार के साथ सूचित करता हूँ की परम यूवा II सिस्टम ने अब तक 2,25,840 जॉब्स का प्रसंस्करण पूरा कर लिया है और जब तक मैं यह रिपोर्ट कर रहा हूं, और जॉब्स का प्रसंस्करण पूरा हो रहा है| पिछले कुछ वर्षों में एनपीएसएफ टीम ने बड़े पैमाने वाली सुविधा को संभालने का और शास्त्रीय उपयोगकर्ताओ के परम प्रणालियों पर उनके कार्य के लिए सहायता करने का अनुभव प्राप्त किया है| मैं एनपीएसएफ टीम के सदस्यों को उनके अनुसंधान कार्य के लिए परम युवा II प्रणाली का उपयोग कर रहे 9 0 अनुसंधान एवं विकास तथा शैक्षणिक संस्थानों के 9 40 से अधिक उपयोगकर्ता के सहायता में उनके अथक और असंबद्ध योगदान के लिए सराहना करता हूं। आने वाले वर्षो में एनपीएसएफ़ प्रणालियों की गणन क्षमता और उनका उपयोगकर्ता आधार कई गुना बढ़ने की संभावना है। इस रिपोर्ट में 2016-2017 के दौरान एनपीएसएफ की गतिविधियों का सारांश दिया गया है और इस सुविधा का उपयोग करके भारतीय वैज्ञानिक समुदाय द्वारा जारी विज्ञान को प्रदर्शित किया है| 179 इतनी सहकर्मी की समीक्षा की गई राष्ट्रीय / अंतर्राष्ट्रीय पत्रिकाओं की संख्या और एनपीएसएफ के उपयोगकर्ताओं द्वारा प्रस्तुत 30 पीएचडी थीसिस उसीका प्रशस्तिपत्र है|

मै एनपीएसएफ टीम से सीडैक की विश्ववस्तरीय एच पी सी सिस्टम्स सँभालने की निरंतर प्रतिबद्धता की अपेक्षा करता हूँ जो की आने वाले वर्षो मे एच पी सी उपयोगकर्ता समुदाय की उन्नति मे सहायक सिद्ध होगा |

डॉ देबाशीष दत्ता
महानिदेशक, सी-डैक

कार्यकारी निदेशक का शुभकामना संदेश

परम युवा II संचालन के पिछले चार सालों से, एनपीएसएफ़ ने कई उपलब्धियां हासिल की हैं| हमेशा उपयोगकर्ताओ की बढ़ती हुई संख्या और अधिक से अधिक बढ़ती हुई संगणन शक्ति की मांग को पूरा करना एक बड़ी चुनौती है| एनपीएसएफ़ ने क्षमता और सामर्थ्य कंप्यूटिंग दोनों की आवश्यकताओं को पूरा करने के लिए एचपीसी संसाधनों के प्रावधान में एक संतुलित दृष्टिकोण का अनुकूलन किया।

96% से अधिक सुविधा का उपयोग अपनी प्रभावी उपयोग का एक स्पष्ट संकेत है। एनपीएसएफ टीम द्वारा वैज्ञानिको को समर्पित और गुणवत्ता समर्थन के बिना यह संभव नहीं था | एनपीएसएफ़ द्वारा प्राप्त अनुभव निश्चित रूप से एचपीसी उपयोगकर्ता समुदाय को विश्व स्तर की सेवा उपलब्ध कराने में मदद करेगा| राष्ट्रीय सुपर कम्प्यूटिंग मिशन (एनएसएम) के माध्यम से सीडैक भारत में भविष्य की एचपीसी आवश्यकताओं को पूरा करने के लिए तैयार हो रहा है| इस मिशन के तहत एनपीएसएफ़ टीम ने एचपीसी विशेषज्ञों के निर्माण के लिए उन्नत कम्प्यूटिंग ट्रेनिंग स्कूल (एक्ट्स) द्वारा आयोजित उच्च निष्पादन कम्प्यूटिंग और सिस्टम एडमिनिस्ट्रेशन (पीजीडीएचपीसीएसए) में पोस्ट ग्रेजुएट डिप्लोमा के ज्ञान और प्रशिक्षण देने में योगदान दिया।

मैं एनपीएसएफ उपयोगकर्ता समुदाय को उनके महत्वपूर्ण उपलब्धियों 61 प्रकाशनों और 180 छात्रों को उनके शोध कार्य के लिए बधाई देता हूँ|

डॉ. हेमंत दरबारी
कार्यकारी निदेशक, सी-डैक, पुणे

विभाग-प्रमुख का शुभकामना संदेश

वर्ष 2016-17 के लिए इस वार्षिक रिपोर्ट के माध्यम से एनपीएसएफ़ की गतिविधियों के प्रगतिशील तथ्यों और आंकड़ों को आगे बढ़ाने के लिए मैं बहुत हर्षित हूं|

इस रिपोर्ट का उद्देश्य परम युवा II उपयोग आंकड़ों की सही तस्वीर प्रस्तुत करना है। मेरा मानना है कि एनपीएसएफ ने उपयोगकर्ताओं को समर्थन देने और संसाधनों को एक संतुलित और पारदर्शी ढंग से प्रावधान करने में अपना सर्वश्रेष्ठ प्रयास किया है।

96% से ऊपर के परम युवा II उपयोग, नए उपयोगकर्ताओं और परियोजनाओं के नामांकन में अध्ययन वृद्धि एनपीएसएफ की सफलता का एक स्पष्ट संकेत है| एनपीएसएफ पर विश्वास और आस्था रखने के लिए मैं एनपीएसएफ उपयोगकर्ता समुदाय का बहुत आभार व्यक्त करता हूँ |

मुझे पूरा यकीन है कि एनपीएसएफ उपयोगकर्ताओ की उम्मीदों को पूरा करेगा और आगे बढ़ेगा।

श्री विनोद कुमार एम्
विभाग प्रमुख, एचपीसी-आई एंड इ समूह, सी-डैक, पुणे

विषय सूची

1 एनपीएसएफ - परिचय 1
2 मुख्य विशेषताएँ 3
3 समीक्षा में वर्ष 2016 - 2017 5
4 परम युवा II मूल बातें 9
5 उपयोगकर्ता एवं उपयोग आंकड़े 13
6 शोध प्रकाशन की रिपोर्ट्स 29
7 परम युवा II उपयोगकर्ताओ द्वारा शोध प्रबंध 41
8 परम युवा II उपयोगकर्ताओं द्वारा प्रकाशन 43
9 परम युवा II के दौरे 53
परिशिष्ट ए वर्ष 2016-17 के दौरान नामांकित परियोजनाएं 57
परिशिष्ट बी वर्ष 2013-17 के परम युवा II के सांख्यिकी 65
परिशिष्ट सी उपयोगकर्ताओं से प्रशंसनीय सन्देश 69
परिशिष्ट डी आगंतुकों के विचार 73
परिशिष्ट ई चित्रशाला 77

1

एनपीएसएफ - परिचय

एनपीएसएफ में क्लस्टर

परम युवा II: वर्ष 2013 से संचालित, Peak Perf. 529.4 TFlop/s, जून 2013 में 69वाँ रैंक, टॉप500

परम युवा : संचालन वर्ष 2008-2012, Peak Perf. 54 TFlop/s, नवंबर 2008 में 69वां रैंक, टॉप500

परम 10000 : संचालन वर्ष 1998-2005,Peak Perf. 100 GFlop/s

राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा (एनपीएसएफ) सी-डैक की स्थापना से लेकर उन्नत सक्षम कंप्यूटिंग (एचपीसी) में अनुसंधान व विकास के क्षेत्र में ढाई दशक से अधिक समय तक किए गए प्रयास का परिणाम है। विभिन्न शैक्षिक एवं अनुसंधान संस्थानों के वैज्ञानिक उपयोगकर्ता समुदाय के लिए अत्याधुनिक प्रदर्शन कंप्यूटिंग प्रणालियों एवं संसाधनों को सौंपने के लिए राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा का परिनियोजन 1998 में सी-डैक, पुणे में किया गया था ताकि देश में उन्हें ऐसी प्रणालियों के बारे में जानने, उनके उपयोग करने और एचपीसी जागरूकता को बढ़ाने में सहायता मिल सके।

राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा की परम 10000, परम युवा एवं परम युवा II नामक सुपरकंप्यूटिंग पहलों ने भारत में समांतर एवं वितरण प्रक्रिया प्रौद्योगिकियों में योगदान किया है, जिससे विभिन्न वैज्ञानिक एवं अभियांत्रिकी विषयों में अधिक प्रभावी रूप से अनुसंधान करने के लिए विभिन्न शोधकर्ताओं को सहायता मिली है।

परम 10000

100 जीफ्लॉप पीक प्रदर्शन वाले परम 10000 का शुभारंभ 1998 में हुआ ताकि भविष्य में विकास के लिए मार्ग प्रशस्त किया जा सके।

एक विशिष्ट प्रणाली में 160 सीपीयू होते हैं और वह 100 GFLOPS के लिए सक्षम होते हैं लेकिन यह आसानी से TFLOP रेंज के लिए स्केलेबल था। इसे रूस और सिंगापुर को निर्यात किया गया।

परम युवा

इस शृंखला में अगला परम युवा (जिसे आगे परम युवा I कहा गया) था जिसे 2008 में निर्मित कर शुभारंभ किया गया। इसे सुपरकंप्यूटिंग सम्मेलन, ऑस्टिन, टेक्सास, संयुक्त राज्य अमेरिका में नवंबर 2008 में जारी सूची में टॉप500 में 69वां रैंक मिला।

परम युवा II

त्वरक / सह-प्रोसेसर तकनीक के साथ एचपीसी में हाल के रुझानों के समकक्ष रहने के क्रम में परम युवा का उन्नयन किया गया। यह उन्नत संस्करण परम युवा II कहलाया और इसका शुभारंभ भारत में बने सुपरकंप्यूटरों की प्रतिष्ठित परम शृंखलाओं के नवीनतम एडिसन में फरवरी 2013 में किया गया। परम युवा II अपने कंप्यूटिंग पावर को प्राप्त करने के लिए Intel Xeon के साथ Intel Xeon Phi के संयोजन से देश में पहली एचपीसी प्रणालियों में से एक है। इस शुभारंभ के साथ, भारत में सी-डैक भी पहली अनुसंधान व विकास संस्थान बन गया जिसने 500 TF माइलस्टोन को पार किया।

विभिन्न विश्वविद्यालयों, आईआईटी और अन्य अनुसंधान एवं विकास संस्थानों के उपयोगकर्ताओं को एनपीएसएफ में कंप्यूटिंग संसाधनों को प्राप्त करने के लिए राष्ट्रीय ज्ञान नेटवर्क के साथ संबद्ध विश्वसनीयता और उपलब्धता का लाभ मिला है। वैज्ञानिक समुदाय इस कंप्यूटिंग सुविधा का उपयोग एनपीएसएफ, सी-डैक के टेक्निकल एफिलिएट स्कीम के माध्यम से करता है। इसके तहत, मुख्य अन्वेषक (विश्वविद्यालय/संस्थान/शोध एवं विकास में संकाय सदस्य/ वैज्ञानिक) टेक्निकल एफिलिएट स्कीम के रूप में नामांकन करता है, शोधकर्ता, अपने छात्रों/सहयोगियों के साथ एनपीएसएफ संसाधनों पर उपयोगकर्ता एकाउंट पा सकता है तथा अपने शोध कार्य के लिए कंप्यूटिंग समय का उपयोग कर सकता है। संभावित उपयोगकर्ता अपने सवाल npsfhelp@cdac.in पर भेज सकते हैं।

इस रिपोर्ट में वर्ष 2016-17 के दौरान की गई एनपीएसएफ की गतिविधियों को शामिल किया गया है।

2

मुख्य विशेषताएँ

वर्ष 2013 में, परम युवा के समान पावर में पीक कंप्यूटर पावर में 54 Tera Flops से 529.4 Tera Flops की वृद्धि हासिल की गई है

तथ्य और आंकड़े

8 फरवरी 2013 को परम युवा II को देश को समर्पित किया गया।

529.4 टेरा फ्लाप सैद्धांतिक शिखर प्रदर्शन है।

386.7 टेरा फ्लाप निरंतर प्रदर्शन है।

1,760.20 MFlops प्रति वाट ऊर्जा दक्षता है।

30,056 कंप्यूटिंग कोर।

221 कंप्यूटिंग नोड।

विशेषताएँ

2,25,003 जॉब पूर्ण प्रोसेसिंग।

447 रैंक, नवंबर 2016 टॉप 500 सूची के अनुसार।[दुनिया भर में टॉप 500 सुपर कंप्यूटर में उच्चतम रैंक हासिल किया गया: 69 जून 2013 में, टॉप500 http://www.top500.org]

140 रैंक, नवंबर 2016 के अनुसार, ग्रीन 500 सूची। [उच्चतम रैंक पूरे विश्व में ग्रीन 500 सुपर कंप्यूटर में हासिल किया गया: 44 नवंबर 2013में, ग्रीन500 http://www.green500.org]

940 उपयोगकर्ता।

90 संस्थान।

252 परियोजनाएँ।

30 ने पीएचडी पूर्ण की।

179 प्रकाशन।

3

समीक्षा में वर्ष 2016 - 2017

परम युवा II उपयोगकर्ता समुदाय के लिए सामाजिक रूप से गठित, एनपीएसएफ वैज्ञानिक उपयोगकर्ता फोरम (एनएससीएफ) का शुभारंभ

2016	
मई	एनपीएसएफ उपयोगकर्ता समुदाय और एनपीएसएफ सिस्टम प्रशासन के लिए सामान्य मंच बनाने के उद्देश्य से परम युवा II उपयोगकर्ता समुदाय के लिए NPSF Scientific User Community Forum(NSCF) पोर्टल का 23 मई 2016 को शुभारंभ किया गया।
जून	परम युवा II सिस्टम ने 4 जून 2016 को दो सौ हजार (2, 00,000) जॉब की प्रोसेसिंग पूर्ण की। परम युवा II सिस्टम को 18/06/2016 को 12:00 से 21/06/2016 को 17:05 तक अनुरक्षण में रखा गया। अनुरक्षण के दौरान निम्न गतिविधियां की गईं: ▪ HPE StoreAll storage system (परम युवा II होम एरिया स्टोरेज) में हार्डवेयर मुद्दे का समाधान किया गया। ▪ परम युवा II कंप्यूट नोडों का BIOS अपग्रेड ▪ NFS रूट सर्वर के साथ मेमोरी मुद्दों को हल किया गया है।
जुलाई	1024 कोरों पर परम युवा II सिस्टम के दैनिक आपरेशनल रन के निष्पादन के लिए सी-डैक, पुणे के साथ SAC (ISRO), अहमदाबाद की 3 वर्षीय सहयोगी परियोजना सफलतापूर्वक पूर्ण।
अगस्त	एनपीएसएफ में पावर आपूर्ति सबसिस्टम में आनेवाली विफलताओं के कारण परम युवा II कल्स्टर 15 अगस्त (22:52 बजे) से 18 अगस्त (17.30 बजे) तक अनुरक्षण में था।
सितंबर	कम वाल समय में बड़ी संख्या में कोर (512 से 1024) जॉबों को संसाधित करने के लिए एक नई निष्पादन queue BURSTq को 9 सितंबर 2016

को प्रस्तुत किया गया। जाब के लिए 512 से अधिक और 1024 कोर से कम अधिकतम 17:55:00 वाल टाइम जॉब बनाए गए ताकि क्यू को रूट किया जाए। इस क्यू के परिचय से बिग जॉबों के प्रोसेसिंग में काफी सहायता मिली।

परम युवा II वार्षिक रिपोर्ट, वित्त वर्ष 2015-2016 के हिंदी संस्करण को डॉ. हेमंत दरबारी, कार्यकारी निदेशक, पुणे द्वारा हिंदी दिवस के अवसर पर विमोचन किया गया। परम युवा II के हिंदी संस्करण रिपोर्ट को एनपीएसएफ टीम द्वारा सी-डैक भाषा प्रोसेसिंग टूलों की मदद से तैयार किया गया।

अक्टूबर

एनपीएसएफ में पावर आपूर्ति सबसिस्टम की पावर विफलता के कारण परम युवा II कल्स्टर 9 अक्टूबर 16 (17:19) से 10 अक्टूबर (18:07) तक उपलब्ध नहीं था।

नवंबर - दिसंबर

एनपीएसएफ टीम सदस्यों ने एक्ट्स, सी-डैक, पुणे द्वारा संचालित PG-DHPSA (Post Graduate Diploma in HPC System Administration) पाठ्यक्रम के छात्रों के लिए एचपीसी सिस्टम प्रबंधन से संबंधित लैब सत्रों को आयोजित किए और व्याख्यान दिए।

2017

जनवरी

दिनांक 27 जनवरी, 2017 को कु. निशा अग्रवाल ने " इंट्रोडक्शन टू ओपनसीएल कंप्यूटिंग " के विषय पर पुणे इंस्टिट्यूट ऑफ़ कंप्यूटर टेक्नोलॉजी (पीआईसीटी), पुणे में व्याख्यान दिया। पीआईसीटी, पुणे से आमंत्रण पर यह व्याख्यान संकाय विकास कार्यक्रम के अन्तर्गत दिया गया था।

फरवरी

राष्ट्रीय विज्ञान दिवस समारोह के एक भाग के रूप में, 28 फरवरी 2017 को सी-डैक में, एनपीएसएफ टीम ने एक कार्यक्रम में प्रतिभागिता की और परम युवा II से संबंधित गतिविधियों को प्रदर्शित किया। पुणे और मुंबई जैसे आस-पास के जिलों से लगभग 1500 (विभिन्न कालेजों और विद्यालयों के छात्र) आगंतुक इन तकनीकी सत्रों का आनंद उठाए और परम युवा II को समझे।

मार्च	23-26 मार्च 2017 के दौरान आईआईटी कानपुर द्वारा आयोजित Techkriti 17के भाग के रूप में अंतरराष्ट्रीय उन्नत सक्षम कंप्यूटिंग प्रतियोगिता के लिए परम युवा II कंप्यूटिंग संसाधन दिए गए। 11 मार्च 2017 को श्री वाई.एस. स्वरूप ने कॉलेज आफ इंजिनियरिंग पुणे में "Network System Administration and Security (NSAS)" पर एक सप्ताह के अल्पकालिक प्रशिक्षण कार्यक्रम में "Setup and handling of IT infrastructure in DC" विषय पर आमंत्रित व्याख्यान दिए।

4

परम युवा II मूल बातें

कुल कंप्यूटर नोड 290 (221 नोड, परम युवा II का + कुछ संरक्षित पुराने नोड) 60 कोर के साथ
Intel Xeon Phi 5110P, जैसे दो त्वरक कार्ड प्रति कुप्यूट नोड,
50 ओपन स्रोत वैज्ञानिक अनुप्रयोग/ लाइब्रेरियां/उपकरणों को उपलब्ध कराया गया

चार उपक्लस्टर	
उपक्लस्टर 1	इंटेल सर्वर सिस्टम R2000GZ का 221 नोड क्लस्टर तथा Dual socket Intel Xeon E5 2670 (Sandy Bridge) प्रोसेसर प्रति नोड आठ CPU कोर प्रति साकेट, 2.6 GHz दो Intel Xeon Phi 5110P प्रति नोड Infiniband FDR इंटरकनेक्ट विभाजन: TESTp, FDRp, BIGJOBp, MICp, SDSp
उपक्लस्टर 2	60+ nodes cluster of HP Proliant DL580 G5 तथा साथ में Quad socket Intel Xeon X7350 प्रोसेसर प्रति नोड चार CPU कोर प्रति साकेट, 2.93 GHz सिस्टम इंटरकनेक्ट: PARAMNet3, Infiniband DDR विभाजन: DDRp
उपक्लस्टर 3	Supermicro SuperServer 1027GR-TRF का चार नोड क्लस्टर तथा साथ में Dual socket Intel Xeon E5 2650 (Sandy Bridge) प्रोसेसर प्रति नोड आठ CPU कोर प्रति साकेट, 2.6 GHz दो NVIDIA GPU Tesla M2090 प्रति नोड, Infiniband में FDR इंटरकनेक्ट विभाजन: GPUp

उपक्लस्टर 4	Supermicro 4U AMD SR5690 SMP server तथा साथ में 64 cores Quad socket AMD Opteron 6276 प्रोसेसर Sixteen CPU कोर प्रति साकेट, 2.3 GHz 512 GBytes रैम विभाजन: (के साथ ग्रुप किया हुआ) GPUp
स्टोरेज	HPC Scratch area with 10 GB/s write bandwidth over Parallel File System रिलायबल यूजर होम एरिया: 100TB बैकअप: 400TB (नेटिव समता)
सॉफ्टवेयर	आपरेटिंग सिस्टम: CentOS v6.2, Kernel v2.6.32-220 इंटेल क्लस्टर स्टूडियो XE 2013 इंटेल क्लस्टर स्टूडियो XE 2015 पीजीआई क्लस्टर विकास किट
अनुप्रयोग	File formats, data bases और math के लिए लाइब्रेरियां और साफ्टवेयर भौतिक विज्ञान / क्वांटम केमिस्ट्री, आणविक मॉडलिंग, यूआईडी डायनामिक्स, क्लाइमेट मॉडलिंग और सर्किट सिमुलेशन और एयरोस्पेस इंजीनियरिंग की तरह कई औरों के लिए कई वैज्ञानिक अनुप्रयोग

क्लस्टर विभाजन सेवा की गुणवत्ता में सुधार के लिए किया गया है।

विभाजन और कतार-

परम युवा II संसाधनों को सजातीय समूहों में बांटा गया है, जिसे विभाजन के रूप में जाना जाता है। तालिका 4.2 विभाजन और काम प्रस्तुत करने के लिए उनके कतार मानचित्रण का सारांश दर्शाता है।

तालिका 4.2: परम युवा II पर कतारों और विभाजन का सारांश

विभाजन	कतार	वॉल समय सीमा	विभाजित नोड्स में त्वरक
FDRp	batch	7 दिन	Xeon Phi
BIGJOBp	batch	7 दिन	Xeon Phi
TESTp	TESTq	2 घंटे	Xeon Phi
GPUp	GPUq*	7 दिन	GPU
MICp	MICq	7 दिन	Xeon Phi
SDSpξ	SDSq+	06 घंटे	Xeon Phi
SDSpξ	BURSTq +	17 घंटे 55 मिनटΨ	Xeon Phi

उपयोगकर्ताओं के संसाधन की आवश्यकता के अनुसार विभिन्न कतारें अलग अभिकलन अभ्यास के लिए सेवा की गुणवत्ता की एक स्पेक्ट्रम सुनिश्चित करती हैं।

- TESTp विभाजन की उपलब्धता के साथ, उपयोगकर्ताओं के बिना लंबे समय तक इंतजार के वास्तविक जॉब से पहले परीक्षण जॉब चलाने के संसाधन मिलते हैं। वर्तमान में TESTq कतार के लिए अधिकतम वाल समय सीमा 2 घंटे प्रति जॉब है।

- BIGJOBp विभाजन की उपलब्धता के साथ 64 कोर से अधिक संसाधन अनुरोध वाले जॉब के लिए कतार प्रतीक्षा समय काफी कम हो गया है।

- SDSp विभाजन के संसाधन, मुख्य रूप से विभिन्न उपयोगकर्ताओं के लिए अपनी प्रतिबद्धता के अनुसार एक निश्चित अवधि के लिए दैनिक आधार पर वास्तविक जॉब चलाने के लिए हैं। उनके निष्क्रिय समय के दौरान इस विभाजन के संसाधनों को कम वालटाइम के लिए कोर के बड़ी संख्या की आवश्यकता के लिए जॉब के लिए उपलब्ध कराया गया है ताकि बड़े जॉब के लिए प्रतीक्षा समय में कमी आए।(BURSTq).

---

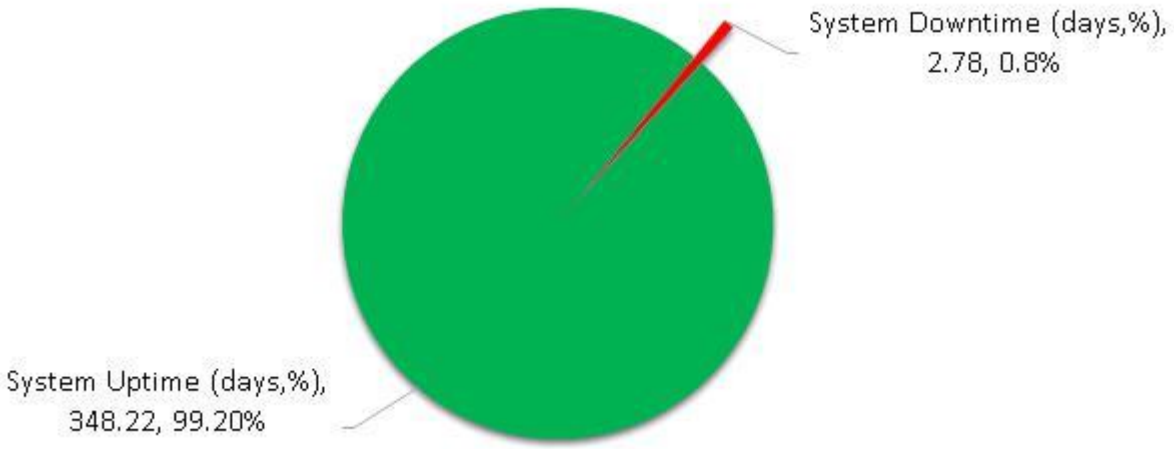
* जीपीयू नोड्स / एसएमपी नोड पर जॉब्स के लिए कतार

+ उन्नत आरक्षण संसाधनों पर जॉब्स के लिए कतार

Ψ प्रतिबद्ध संसाधनों के लिए निष्क्रिय अवधि (लगातार ७ दिनों के लिए दैनिक आधार पर)

ξ वास्तविक जॉब्स के लिए प्रतिबद्ध संसाधनों के साथ विभाजन

परम युवा II उपलब्धता: (अवधि- अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017) [351 दिन]



- अपटाइम: 348.22 दिन
- अनुरक्षण अवधि: 2.78 दिन
    - अगस्त 15,2016, 10:53 रात्रि से अगस्त 18,2016, 05:40 शाम तक [2 दिन, 18 घंटे, 47 मिनट]
- सिस्टम अपटाइम: 99.20%

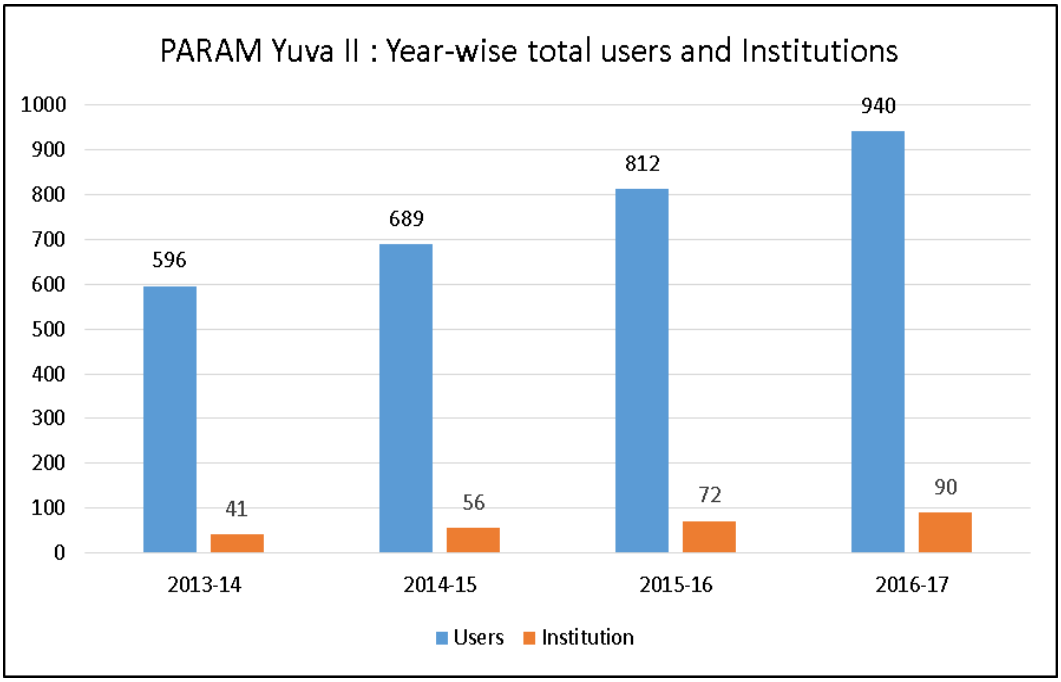
5

उपयोगकर्ता एवं उपयोग आंकड़े

वर्ष 2016-17 में : जोड़े गए उपयोगकर्ता : 112 ; जोड़े गए संस्थान : 17 ; संसाधित जॉब : 32,232

परियोजनाएँ और उपयोगकर्ता (15 मार्च 2017 को)

- परियोजना संख्या : 252
- उपयोगकर्ता संख्या: 940 (90 संस्थानों में)
- पीएचडी छात्रों की संख्या: 188



संस्थानों में उपयोगकर्ता

तालिका 5.1: शैक्षिक संस्थानों में उपयोगकर्ता

शैक्षिक संस्थान	उपयोगकर्ता संख्या
अहमदनगर कॉलेज	1
एमिटी विस्वविद्यालय	2
अलीगढ़ मुस्लिम विश्वविद्यालय	5
अन्ना यूनिवर्सीटी	2
आर्मी प्रौद्योगिकी संस्थान, पुणे	5
बिट्स पिलानी, हैदराबाद परिसर	2
सीआरएम अभि. एवं तक. कॉलेज	2
कारनेग मेलन यूनिवर्सिटी	1
कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग, पुणे	2
बिहार केंद्रीय विश्वविद्यालय	1
गुजरात केंद्रीय विश्वविद्यालय	3
हरयाना केंद्रीय विश्वविद्यालय	3
दिल्ली विश्वविद्यालय	2
डी वाई पाटिल विश्वविद्यालय, नवी मुंबई	3
गांधी इंस्टीट्यूट ऑफ टेक और प्रबंधन, हैदराबाद	1
जीएलए विश्वविद्यालय, मथुरा	1
गोवा विश्वविद्यालय, गोवा	2
सरकारी कॉलेज, टोंक	1
गुरु नानक देव विश्वविद्यालय	1
गुजरात प्रौद्योगिकी विश्वविद्यालय	1
हिमाचल प्रदेश विश्वविद्यालय	3
आईआईए, बैंगलोर	12
आईआईआईटी, हैदराबाद	3
आईआईआईटी, दिल्ली	4
आईआईएससी, बैंगलोर	7
आईआईएसईआर, पुणे	52
आईआईएसईआर, मोहाली	1
आईआईएसईआर, तिरुवनंतपुरम	3
आईआईटी बॉम्बे	204
आईआईटी भुवनेश्वर	2
आईआईटी दिल्ली	8

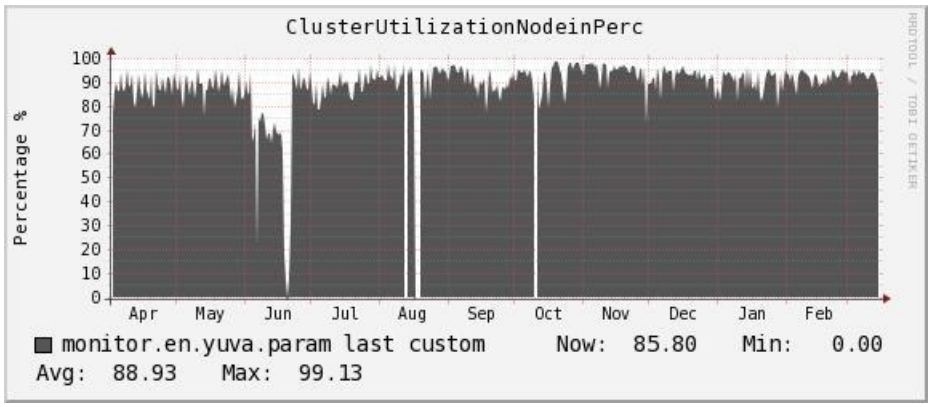
आईआईटी (आईएसएम) धनबाद	2
आईआईटी गुवाहाटी	23
आईआईटी गांधीनगर	10
आईआईटी हैदराबाद	26
आईआईटी जोधपुर	10
आईआईटी कानपुर	23
आईआईटी खड़गपुर	12
आईआईटी पटना	7
आईआईटी रोपार	8
आईएनएसटी, मोहाली	14
जेएमआई विश्वविद्यालय	1
जिवाजी विश्वविद्यालय	3
जेएनयू	2
कुरुक्षेत्र विश्वविद्यालय	3
मणिपाल विश्वविद्यालय	2
एमआईटी पुणे	1
एनआईटी कालीकट	1
एनआईटी राउरकेला	1
पंजाब विश्वविद्यालय	2
पीजेटीएसयू, हैदराबाद	1
पीडीयू शेखावाटी विश्वविद्यालय, सीकर	1
पीयू कॉलेज, मिजोरम	1
आरटीएम नागपुर विश्वविद्यालय	2
सत्स्त्र विश्वविद्यालय, तंजावुर	3
शेखावत विश्वविद्यालय	1
एसआरएम विश्वविद्यालय	3
एसआरटीएम विश्वविद्यालय	2
सेंट जेवियर्स कालेज, अहमदाबाद	1
एस पी पुणे विश्वविद्यालय	36
श्री गुरु ग्रंथ साहिब विश्व विश्वविद्यालय	4
तेजपाल विश्वविद्यालय	1
हैदराबाद विश्वविद्यालय	1
राजस्थान विश्वविद्यालय	1
वीएनआईटी नागपुर	10
कुल	559

तालिका 5.2: शोध संस्थानों में उपयोगकर्ता

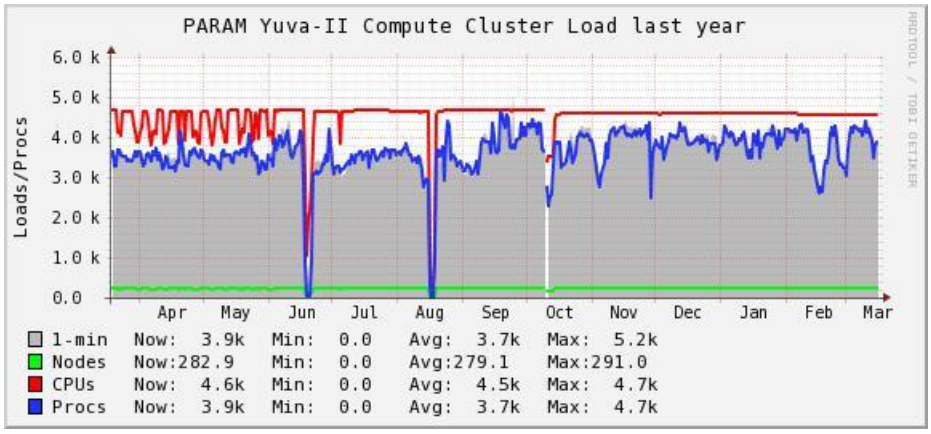
शोध संस्थान	उपयोगकर्ता संख्या
बीएआरसी मुंबई	1
सीबीएस, मुम्बई	2
सीआईएफआरआई, कोलकाता	2
सी-डैक	137
सीईसीआरआई, कराईकुडी	4
डीआरडीओ-बीयू सेंटर फॉर लाइफ साइंसेस, कोयंबटूर	4
ई-शिक्षक	2
गरुड़ा	165
आईएएसएसटी, गुवाहाटी	4
इंडो कोरिया विज्ञान और प्रौद्योगिकी केंद्र	1
भारतीय वायु सेना, बेंगलूर	1
इसरो	5
आईएससी मुंबई	2
आईयूसीएए, पुणे	7
जेएनसीएएसआर, बैंगलोर	10
एनएबीआई, मोहाली	1
एनसीएल, पुणे	6
एनसीआरए, पुणे	6
एनआईसी	2
एनआईएसईआर	1
पीआरएल, अहमदाबाद	3
आरआरआई, बैंगलोर	3
एसआईएनपी, कोलकाता	2
टीएचएसआईटी	4
विजय कुमार फाउंडेशन, गुड़गांव	6
कुल	381

परम युवा II सिस्टम उपयोगिता:

क्लस्टर उपयोगिता : अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017



क्लस्टर लोड : अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017



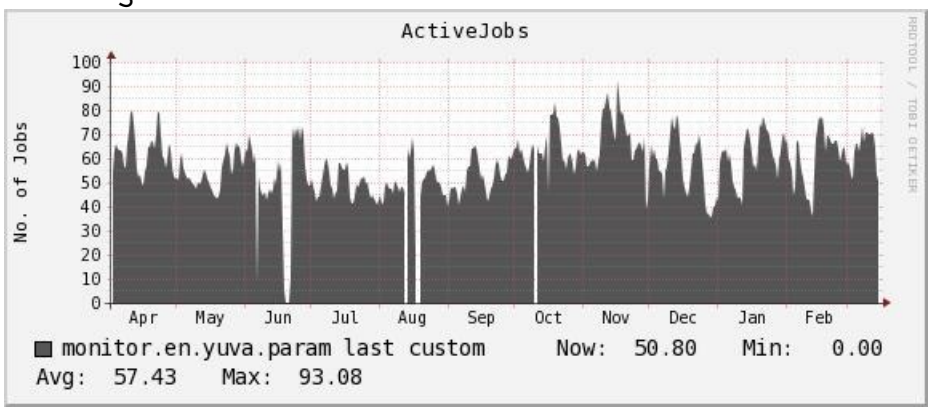
मई में गैप के लिए परम युवा II एकाउंटों की अनुरक्षण गतिविधि (18/06/2016 को 12:00 बजे से 21/06/2016 को 17:05 बजे तक) और अगस्त (15/08/2016 के 22:52 बजे से 18/08/2016 को 17.30 तक), उपयोगिता ग्राफ में (शीर्ष)।

पावर और कूलिंग अवसंरचना से संबंधित मुद्दों के कारण अक्टूबर (09/10/2016 को 17:19 से 10/10/2016 को 18:07 तक) में परम युवा II (कुछ नोड) का आंशिक शटडाउन था। इस अवधि में आंशिक शटडाउन, गैंगलिया (बाटम) से पूरक डेटा से सीपीयू कोर की कमी में फिर से लगाया गया है।

जॉब कतारें:

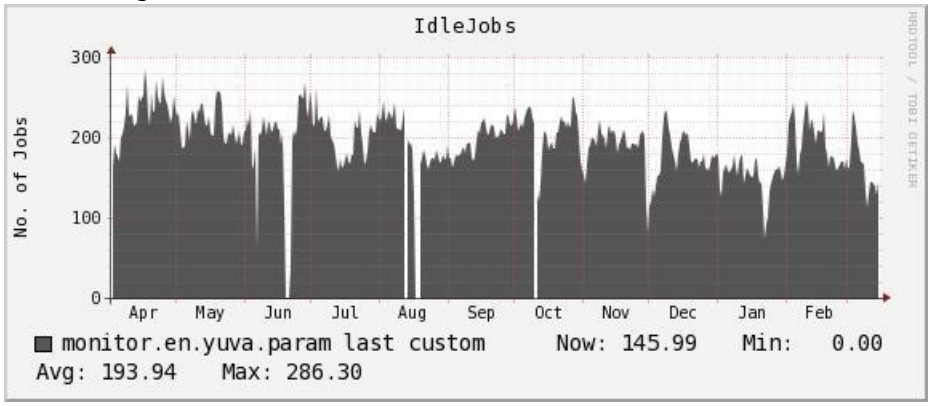
रनिंग जॉब (क्रियाशील जॉब)

परम युवा II - क्रियाशील जॉब अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017



आइडल जॉब (निष्पादन के लिए कतार में प्रतीक्षारत जॉब)

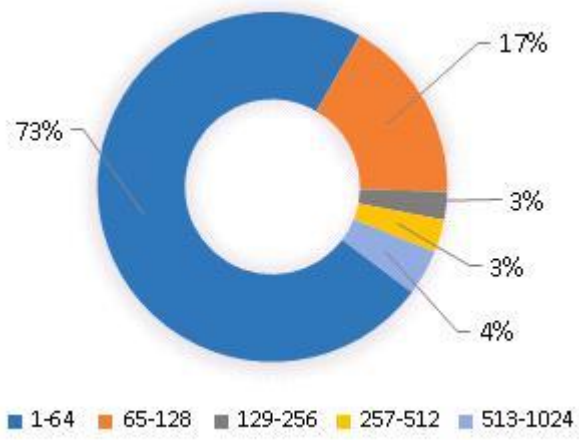
परम युवा II - आइडल जॉब अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017



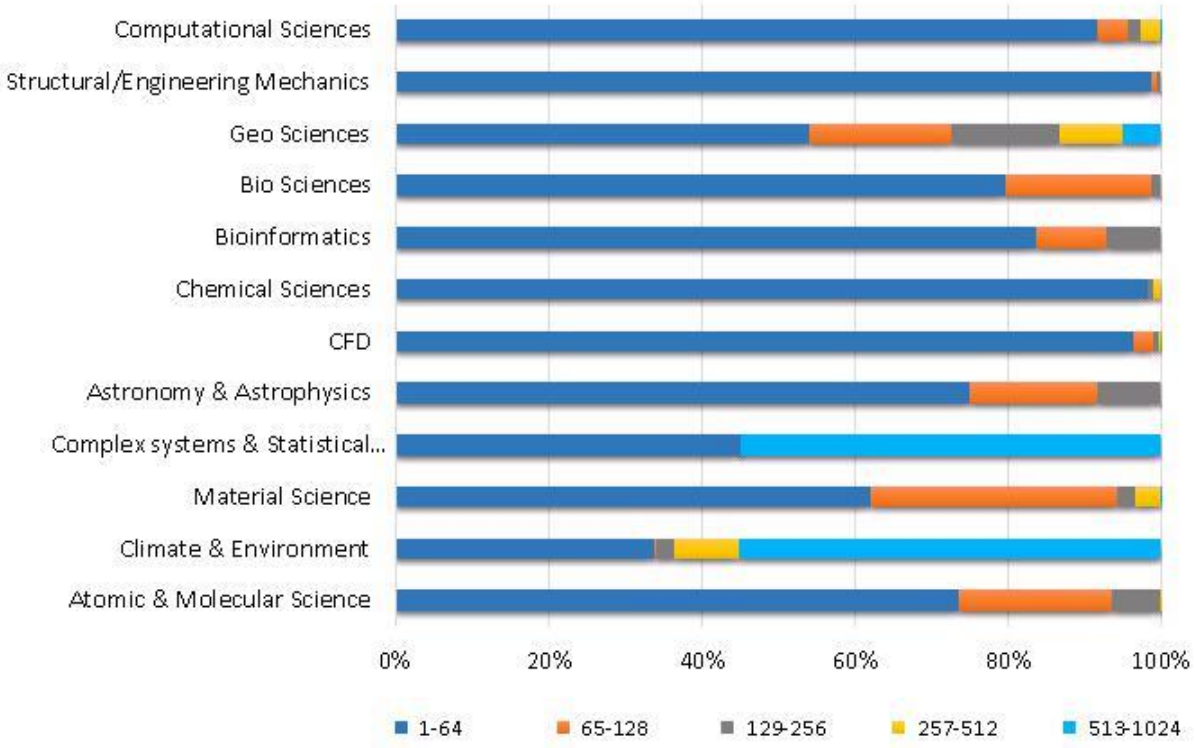
ऊपर दिए गए ग्राफ में देखा जा सकता है कि लगभग 57 जॉब रन कर रहे हैं, जबकि उनसे तीनगुना जॉब हमेशा कतार में हैं और रन करने की प्रतीक्षा में हैं। इससे पता चलता है कि ज्यादा संसाधनों की जरूरत है।

सीपीयू उपयोगिता (अवधि- अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017)

सीपीयू समय उपयोगिता बनाम कोर की संख्या

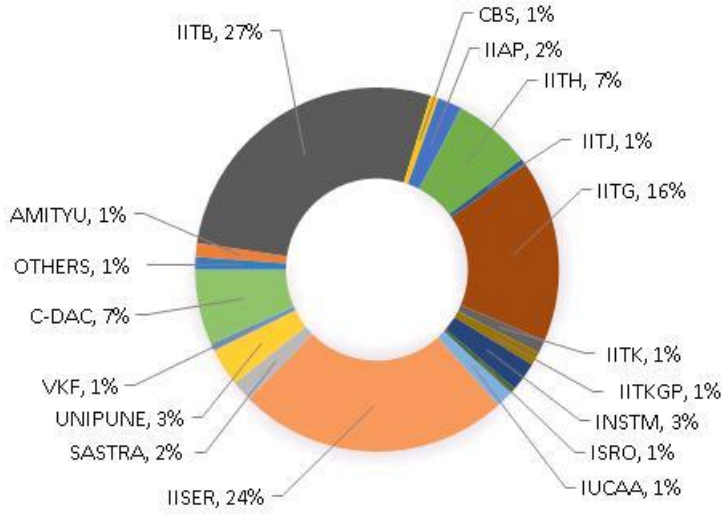


एप्लिकेशन डोमेन में जॉब साइज (सीपीयू कोर)

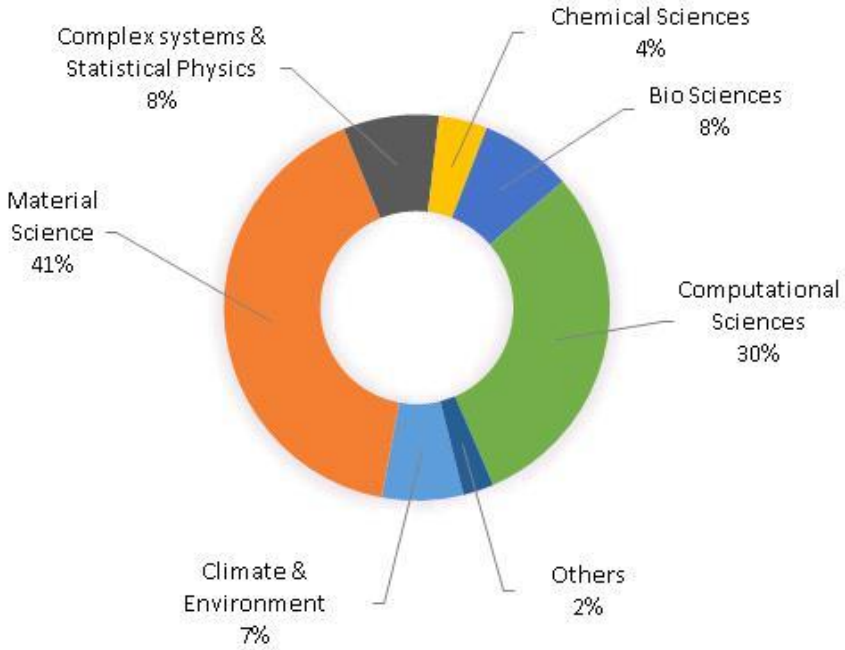


सीपीयू उपयोगिता (अवधि- अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017)

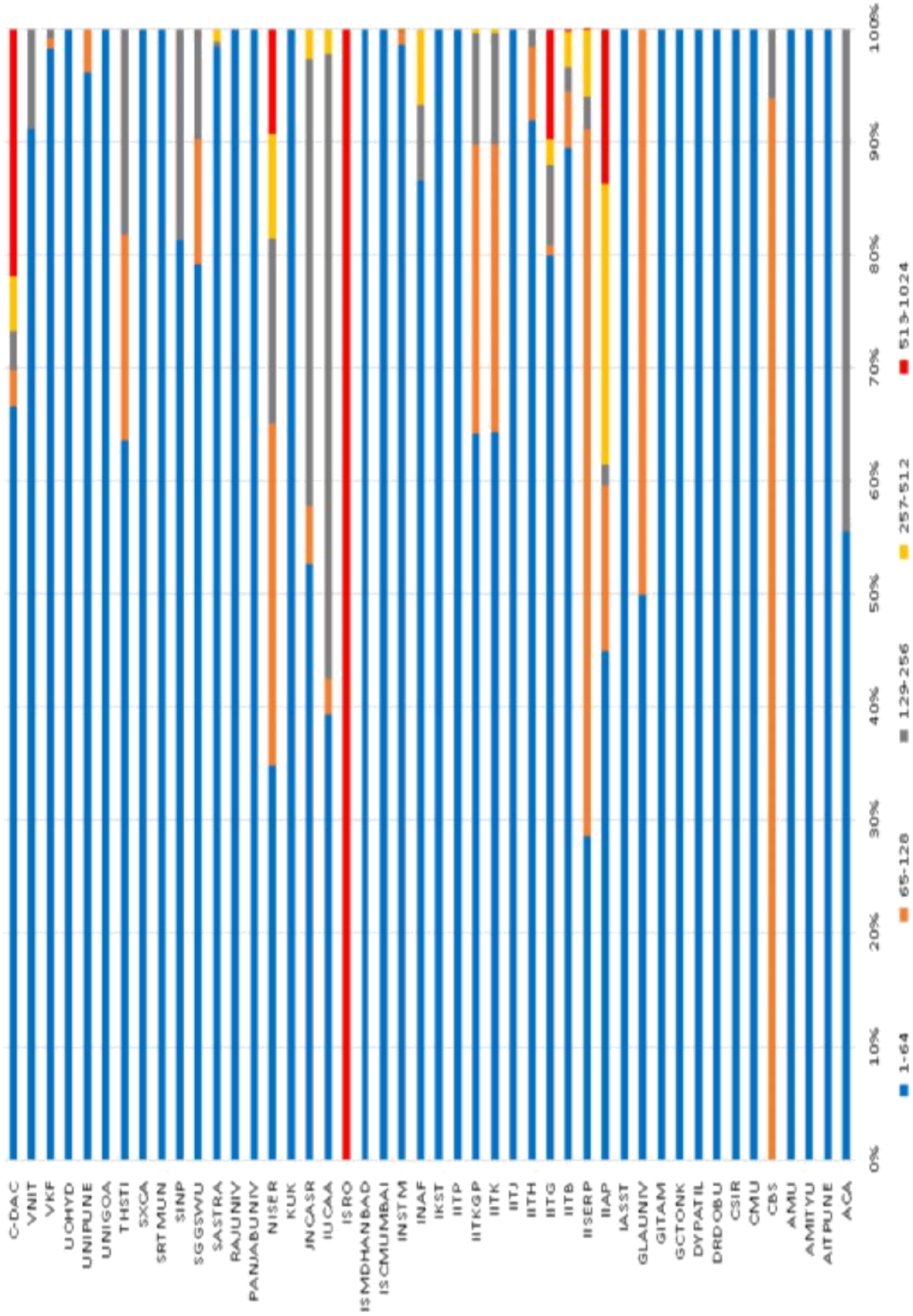
संस्था के अनुसार सीपीयू उपयोगिता (% में)



एप्लिकेशन डोमेन में सीपीयू समय उपयोगिता (% में)

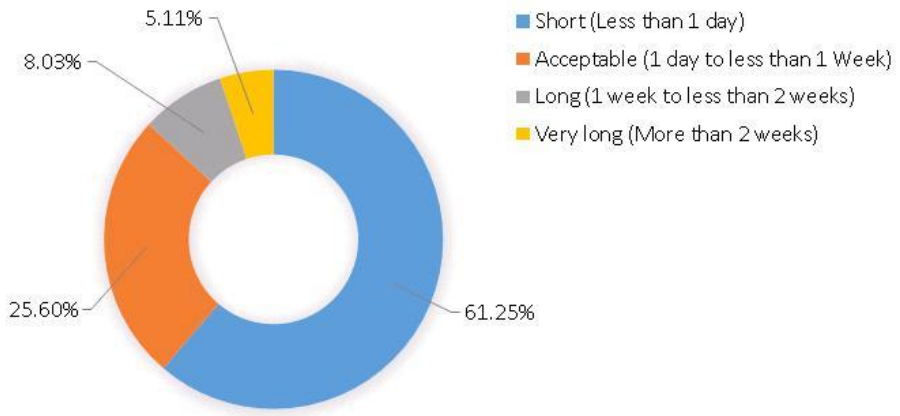


जॉब आंकड़े (अवदि- अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017)



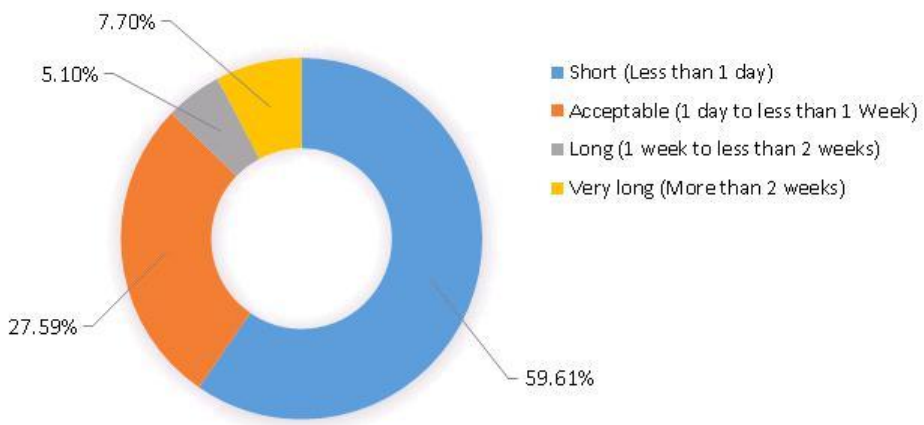
जॉब आंकड़े (अवदि- अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017)

स्माल जॉब के लिए कतार का समय (65 कोर से कम आवश्यकता वाले जॉब्स)



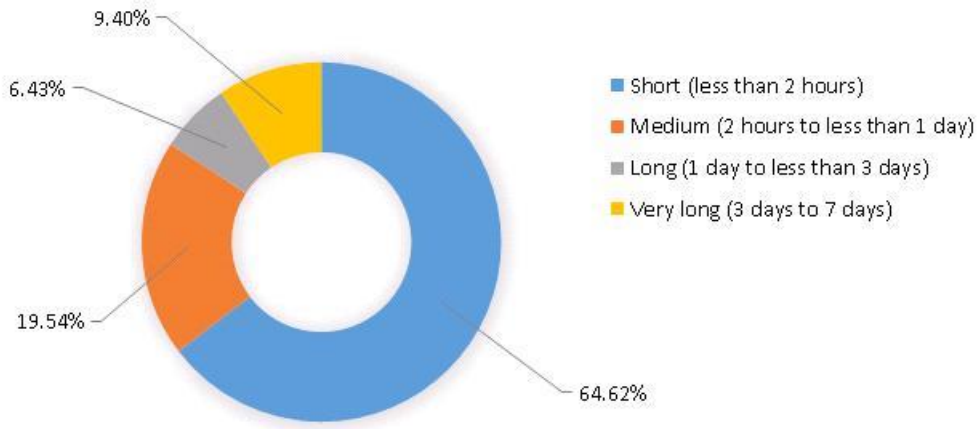
उपरोक्त ग्राफ में स्माल जॉब (65 कोर से कम आवश्यक जॉब) के क्यू टाइम (निष्पादन से पहले क्यू में जॉब में लगा समय) विश्लेषण को देखा जा सकता है। यह देखा गया है कि लगभग 60%स्माल जॉब के निष्पादन में क्यू में 1 दिन से कम समय लगता है।

बिग जॉब के लिए कतार का समय (64 कोर से अधिक आवश्यक वाले जॉब)



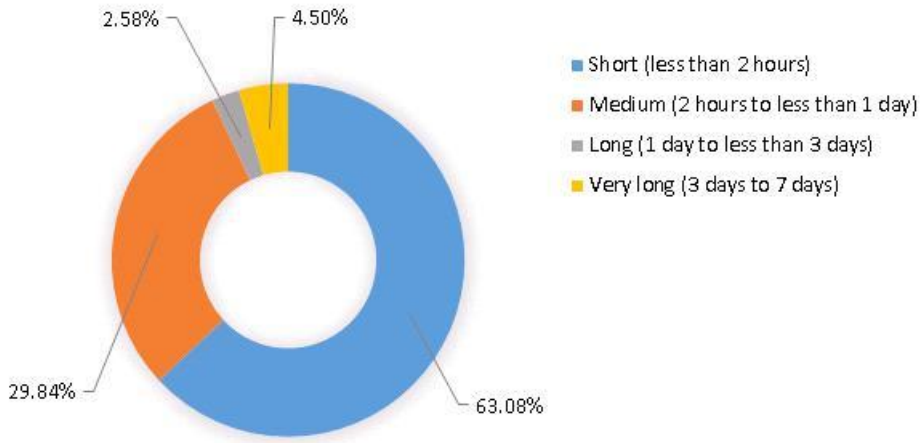
उपरोक्त ग्राफ में बिग जॉब (64 कोर से अधिक आवश्यक जॉब) के क्यू टाइम (निष्पादन से पहले क्यू में जॉब में लगा समय) विश्लेषण को देखा जा सकता है। यह देखा गया है कि लगभग 60%बिग जॉब के निष्पादन में क्यू में 1 दिन से कम समय लगता है।

स्माल जॉब के लिए निष्पादन समय (65 कोर से कम आवश्यक वाले जॉब)



ऊपर दिए गए ग्राफ में हम स्माल जॉब (65 कोर से कम आवश्यक जॉब) के निष्पादन समय (जाब का रनटाइम) विश्लेषण को देख सकते हैं। यह देखा गया है कि स्माल जॉब का 65 प्रतिशत 2 घंटे से कम समय में निष्पादित हो जाता है। डेटा जॉब के मौजूदा स्थिति के निरपेक्ष है।

बिग जॉब के लिए निष्पादन समय (64 कोर से बड़े आवश्यक वाले जॉब)



ऊपर दिए गए ग्राफ में हम बिग जॉब (64 कोर से बड़े आवश्यक जॉब) के निष्पादन समय (जाव का रनटाइम) विश्लेषण को देख सकते हैं। यह देखा गया है कि बिग जॉब का 63 प्रतिशत 2 घंटे से कम समय में निष्पादित हो जाता है। डेटा जॉब के मौजूदा स्थिति के निरपेक्ष है।

जॉब आंकड़े:

जॉब संख्या = 32,232 (अवधि: अप्रैल 1, 2016 - मार्च 15, 2017)

जॉब की कुल सं. = 2,25,003 (अवधि- फरवरी 19, 2013 - मार्च 15, 2017)

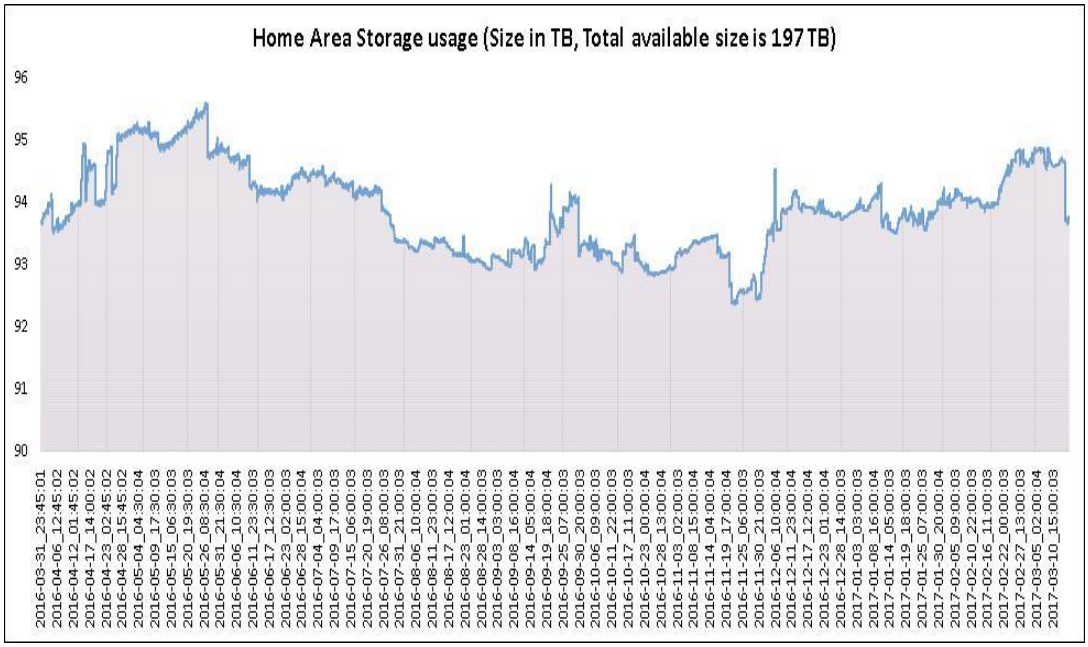
विभिन्न क्षेत्रों में जॉब

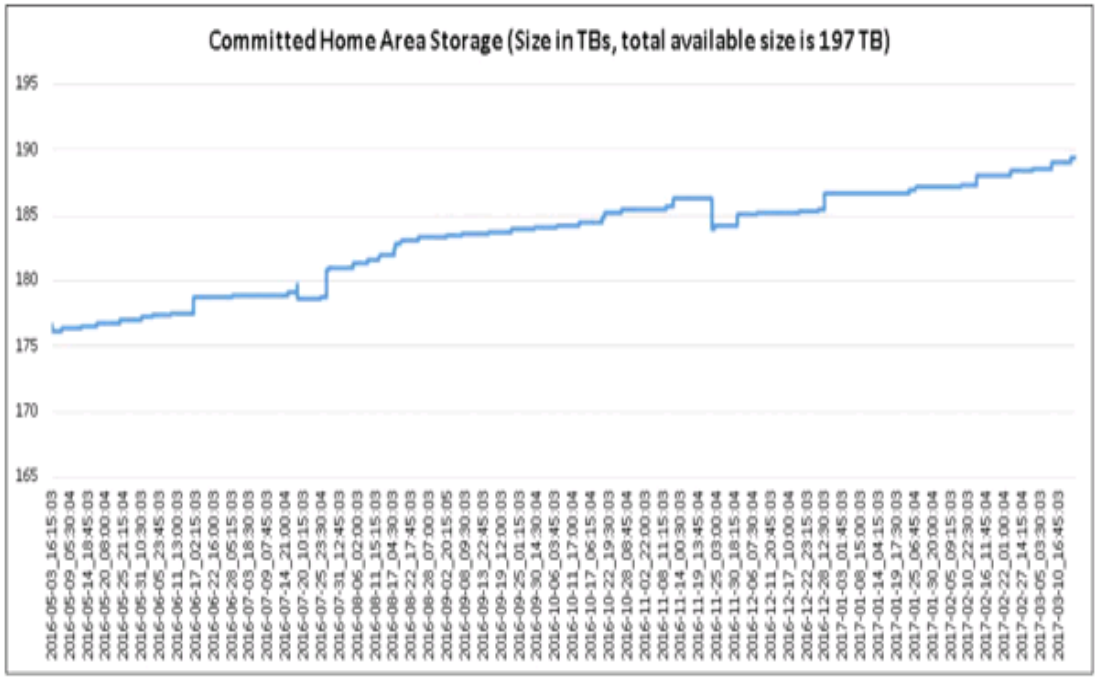
तालिका 5.3: विभिन्न क्षेत्रों में जॉब

डोमेन	जॉब
परमाणु और आणविक विज्ञान	1570
जलवायु और पर्यावरण	2135
मटेरियल साइंस	13556
जटिल प्रणाली और सांख्यिकीय भौतिकी	219
खगोल विज्ञान और खगोल भौतिकी	12
सीएफडी	480
केमिकल साइंसेज	2333
जैव सूचना	140
बायो साइंसेज	1033
जीयो साइंसेज	554
संरचनात्मक/अभियांत्रिकी मैकेनिक्स	758
कंप्यूटेशनल साइंसेज	9442
कुल	32232

स्टोरेज उपयोग के आकड़े-

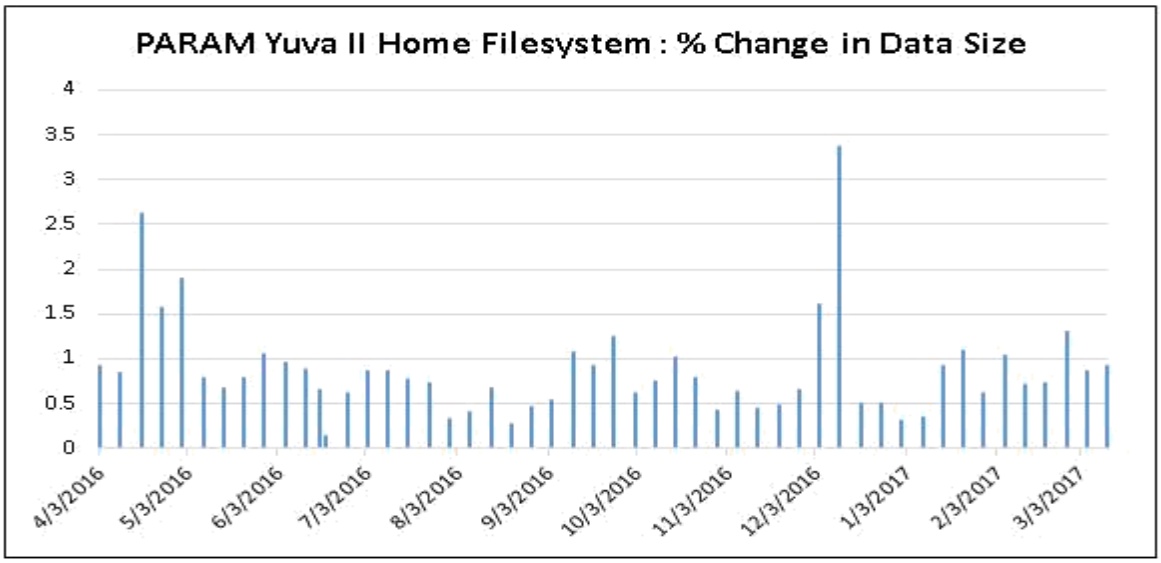
परम युवा II होम एरिया अधिभोग, प्रतिबद्ध होम एरिया और हेम एरिया में उपयोग में कम वाले संख्या के आकड़े नीचे दिए गए हैं।

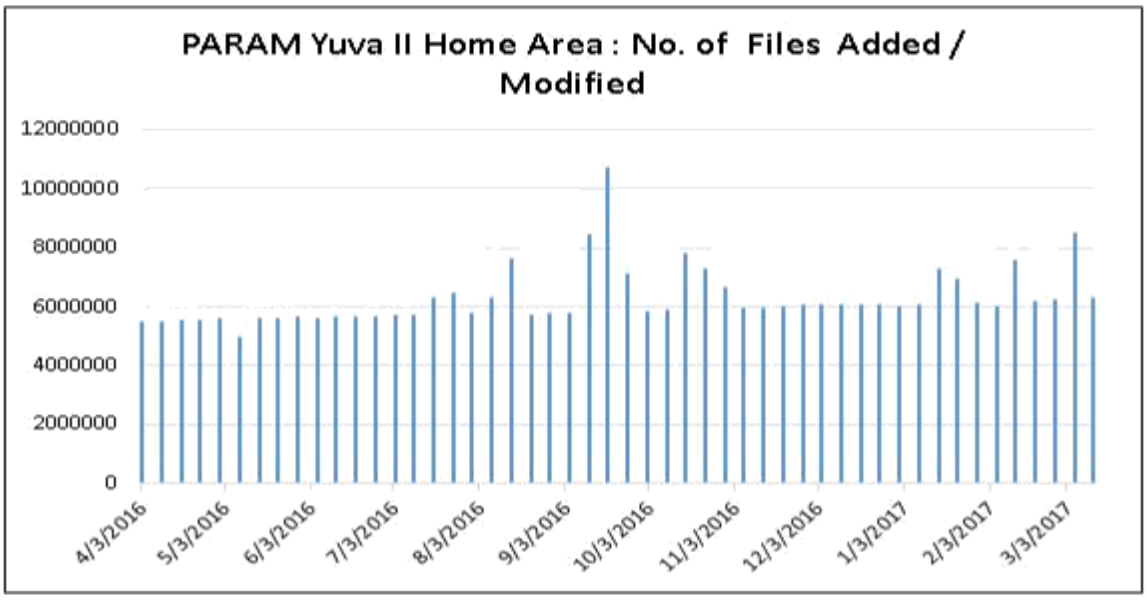

Home Area Storage usage (Size in TB, Total available size is 197 TB)
96
95
94
93
92
91
90


Committed Home Area Storage (Size in TBs, total available size is 197 TB)
195
190
185
180
175
170
165

सभी आवंटित कोटा का योग कुल संचयन का 96% से ऊपर है। पिछले 1 वर्ष में प्रतिबद्ध होम एरिया 89.51 % से 96.14% बढ़ गई है। यह स्टोरेज के विस्तार के लिए एक संकेत है। यह गतिविधि अगले वर्ष में प्रस्तावित है।

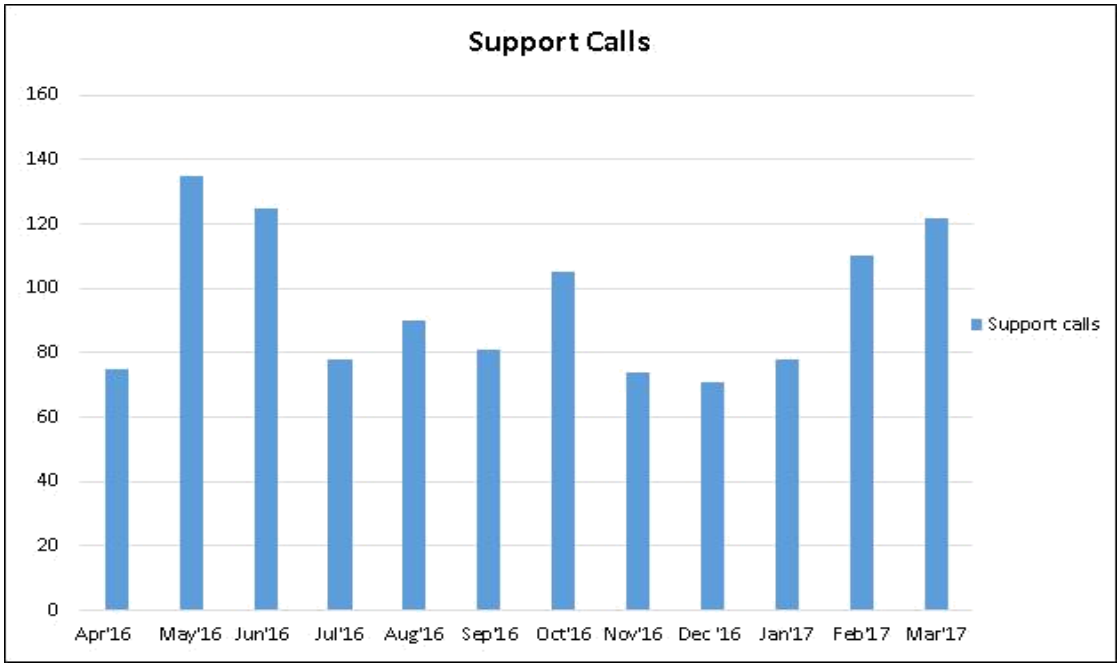
डिफाल्ट कोटा आवंटन के अलावा अनुरोध पर निश्चित समय के लिए अतिरिक्त कोटा भी दिया जाता है। स्टोरेज को होम एरिया और हाई परफार्मेंस स्क्रैच में विभाजित किया गया है, जैसा कि कंप्यूट संसाधनों में वर्णित है।





उपयोगकर्ता सहायता अनुरोध:

परम युवा सहायता टीम प्रति महीने लगभग 95 उपयोगकर्ता अनुरोध को समाधानित करती है। नीचे पिछले एक वर्ष के आंकड़े दिए गए हैं। उपयोगकर्ता सहायता अनुरोध टेलीफोन, ईमेल, स्क्रीन सत्र और उपयोगकर्ताओं के प्रत्यक्ष रूप से आने के माध्यम से दी जाती है। दर्शाया गया डेटा प्राथमिक रूप से ईमेल से लिया गया है।



6

शोध प्रकाशन की रिपोर्ट्स

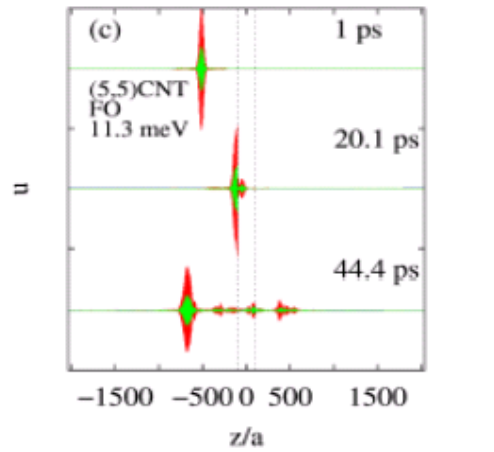
परम यूवा II पर किए गए काम से उच्च प्रभाव पत्रिकाओं में शोध प्रकाशनों के आधार पर कुछ प्रकाशन रिपोर्ट

फोनन स्केटरिंग डायनामिक्स ऑफ़ स्लाइडिंग मोशन इन कार्बन नैनोट्यूब ऑस्किलेटर्स

मुख्य अन्वेषक: डॉ. बैदुरया भट्टाचार्य
baidurya@civil.iitkgp.ernet.in

इंस्टीट्यूशन :आईआईटी खड़गपुर

अनुसंधान क्षेत्र : भौतिक विज्ञान



FO phonon with 11.3 meV interacting with (5,5) CNT-L50.|

Research Challenge

Several theoretical and experimental attempts have been made to explore the thermophoretically driven transport of molecular structures. Attaining controlled motion in nanoscale has been a challenging task, thermophoresisthermal gradient induced forceis one of the popular driving mechanism of molecular systems. The essential driver for such motions is the net current of hot phonons that are generated by the imposed thermal gradients. While interacting, these hot phonons are scattered by the moving object and some of the vibrational energy is exchanged with translational energy of the moving body. However, there have been few attempts to gain phonon level understanding of thermophoretic motion, and the exact underlying physical mechanism has remained elusive so far.

The challenge is to understand the fundamental mechanism of how individual phonons interact with the moving molecular system and how phonon characteristics influence the sliding process. Further, at the initiation of sliding process, how the phonon could able to push the molecular system over its potential barrier is extremely curious.

Approach

Under quasi-particles treatment, phonons can be modeled as wave packets by attributing position and momentum. However, for a typical wave length of the phonon, it spans over few hundreds of nanometers. Thus, our system of double walled CNT oscillator consists of (10,10)CNT of 1000 nm long as outer casing and (5,5)CNT of 50-200 nm long as inner sliding nanotube. Molecular dynamics of such a micron long system demands expensive computational resources.

In this approach, a phonon wave packet with polarization, s, and wave number, q0, at location, z0, is constructed from the linear combination of vibrational eigen modes of the lattice according to

$$u^{s}_{lk\alpha} = \frac{A}{\sqrt{M}} \sum_{q} \exp\left[\frac{(q-q0)^2}{2\sigma^2}\right] e^{s}_{k\alpha}(q) \exp\left[iq(z_l - z_0)\right]$$

where u^{s}_{lak} is the displacement from the ground state position of the kth base atom in the lth unit cell (located at z_l) along direction . A is the amplitude of the wave packet, and M is the mass of the atom. e^{s}_{ka} (q) is the phonon eigenvector corresponding to polarization, s, and wave number, q. is the broadening parameter in the Gaussian spread of the wave packet around q0. The eigenvectors, e^{s}_{ka} (q), and corresponding phonon frequencies l^{s} (q) are obtained by diagonalizing the dynamical matrix which is the Fourier transform of the force constant matrix. The phonon frequency vs. wave vector plot gives the dispersion relation l^{s}(q).

A wave packet is generated in the outer tube far away from the inner core (500 unit cells to the left of the centre, with σ= 2π/100a (where a is the lattice constant) giving a pread of 200 unit cells) and we study how the individual phonon travels through the outer CNT, interacts with the inner nanostructure, and generates a net driving force. Molecular dynamics simulations are conducted in microcanonical ensemble with a time step of 1 fs using LAMMPS. By repeating such imposition of wave packets of frequencies covering the entire spectrum of for a particular polarization, evaluate the energy transmission coefficient (the ratio of transmitted energy to the incident phonon wave packet energy) for all frequencies results the phonon transmission function.

Results

A through presentation of the results can be found in PhD thesis [M. V. D. Prasad, Phonon Scattering Dynamics of Sliding Motion in Carbon Nanotube Oscillators, PhD thesis, Indian Institute of Technology, Kharagpur, 2016] and in our publication [NanoLett, 16, 2174(2016)].

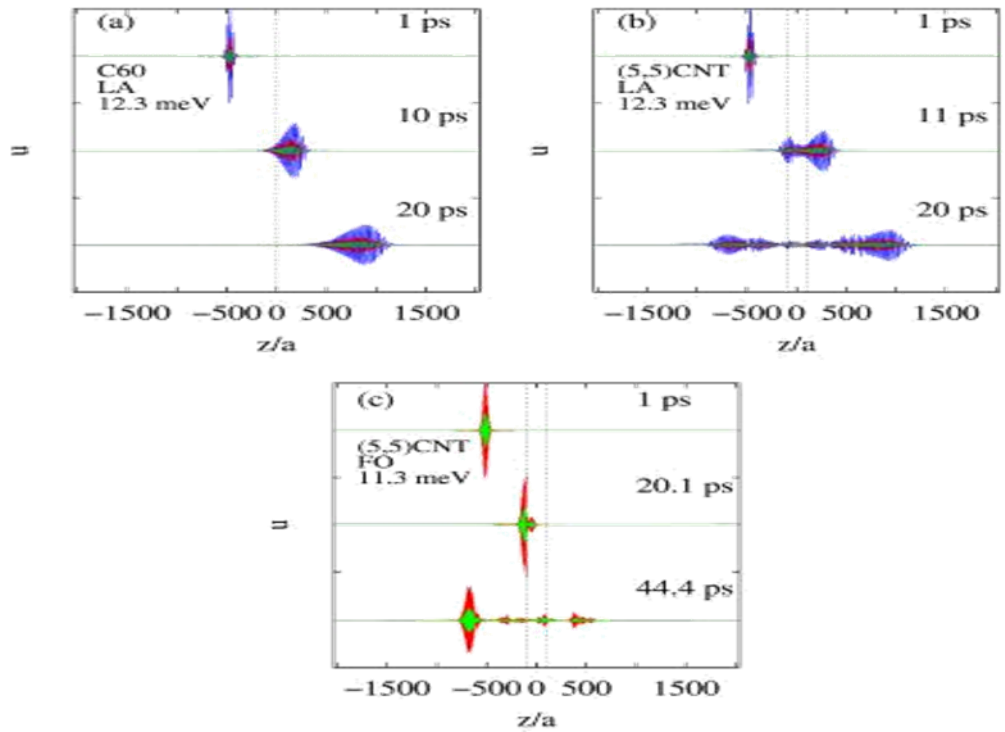


Figure: Wave packet propagation. Snapshots of the displacements for wave packets before, during and after interface scattering. LA phonon with (a) 5.76 meV interacting with a C60 (b)12.3 meV interacting with (5,5) CNT-L50 and (c) FO phonon with 11.3 meV interacting with (5,5) CNT-L50. Vertical dashed lines indicate the position of inner CNT. The axial and two transverse components of wave packet displacement are represented in blue, green and red respectively.

Impact

By showing that thermophoretic motion in coaxial CNTs is initiated by LA phonon scattering mechanism, this work builds a connection between phonon scattering dynamics and nanoscale mechanical motion. We have shown that the scattering mechanism of LA mode phonons, particularly in low to moderate energy ranges, generates a net axial force on the encapsulated nanotube. The length dependence of thermophoresis is elucidated by LA mode transmission functions.

The knowledge of precise interaction mechanism of individual phonons with the inner nanostructure would lead to nanoscale motion control in nanomechanical and biotechnological applications.

How this research work is benefited using PARAM Yuva II

Simulation of micron long atomic systems for few hundreds of nanoseconds using LAMMPS is not feasible without PARAM facility. To compute one transmission function, around 20-30 cases with wave packets at different frequencies need to be simulated each involves an expensive computational load. We have computed several such transmission functions. In total, it is a computationally demanding task and we did it with the help of PARAM YUVA II.

Experiences using PARAM Yuva II (system, support etc.)

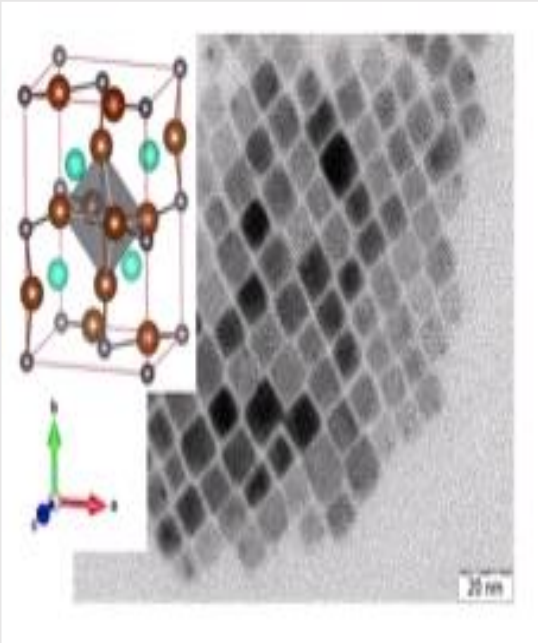
Importantly, every time when we approached npsfhelp@cdac.in, the support is very prompt and encouraging. Over the years, we observed enhanced speed of computations and, of course, the increased number of users. At present, it is exceptionally fast. Overall availability of nodes and wall time is very much satisfactory

THz कंडक्टिविटी वीथिन कोलॉइडल CsPbBr3 पेरोव्सकीट नैनोक्रिस्टल्स: रेमारकेबली हाई कैररयर मोबिलिटीज एंड लार्ज डिफ्फुज़न लेंथ्स

मुख्य अन्वेषक: डॉ. प्रसेनजीत घोष
pghosh@iiserpune.ac.in

इंस्टीट्यूशन: आईआईएसईआर पूणे

अनुसंधान क्षेत्र : भौतिक विज्ञान



Research Challenge

To investigate the carrier mobility and their diffusion lengths in CsPbBr3 perovskite and to understand the origin of the excellent photo perovskite and to understand the origin of the excellent light emitting properties.

Approach

To achieve the above mentioned challenges we used a combination of pump-probe THz experiments and first principles calculations.

Results

The ground state properties (structural and vibrational) were characterized by Transmission electron microscopy, THz time domain spectroscopy and DFT calculations. These are summarized in Fig.

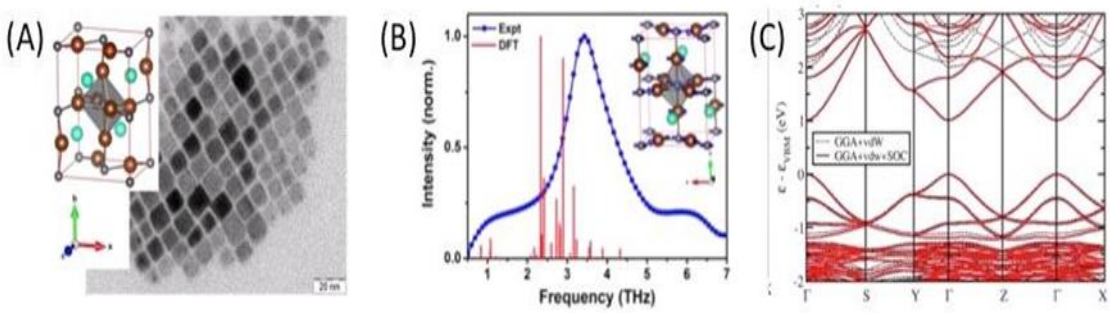


Figure 1. (A) TEM image of synthesized CsPbBr3 NCs. The inset shows the bulk orthorhombic crystal structure as obtained from the DFT calculations, (B) Normalized THz-TDS absorption spectrum (blue solid circles) of NCs and optical phonon intensities (red sticks) from DFT calculation, and (C) the band structure of bulk CsPbBr3 with and without SOC.

From our calculations we estimated the exciton binding energy. Our calculations predict that depending on the value of the dielectric constant, the exciton binding energies can vary between 6.0 meV to 90.0 meV. Further we also found that the effective masses of the holes and electrons in this material are similar and is about 0.25. These along with the THz pump-probe experimental data were used to estimate the intrinsic carrier properties in this material. We find that the electron and hole carrier mobilities are about 4500 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ while their diffusion lengths are greater than 9.2 To put our results in proper perspective, we have compared the above mentioned properties with that of other semiconducting nanocrystals and single crystals. These are given in Table 1. We find that for CsPbBr3 these values are orders of magnitude higher compared to those found in the hybrid halide perovskite films and comparable to single crystalline bulk semiconductors. These values will certainly reduce in a device configuration, but are anticipated to remain much higher compared to other semiconductor NCs. Therefore, CsPbBr3 NCs are promising candidates for applications in optoelectronic and photovoltaic devices.

Table: Comparison of mobility and diffusion length of CsPbBr3 NCs with those of other important NCs and single crystals.

Material	Mobility ($cm^2V^{-1}s^{-1}$)		Diffusion Length (μm)		Measurement technique
	Electron	Hole	Electron	Hole	
$CsPbBr_3$ NC (this work)	~4500	~4500	≥ 9.2	≥ 9.2	THz
$CsPbBr_3$ single crystal[64]	~1000				PC
$MAPbBr_3$ polycrystalline film[5]	30		0.3 – 1		THz
$MAPbBr_3$ single crystal[10]	~115	20-60	3 - 17		TOF/Hall/TA/TRPL
$MAPbI_3$ single crystal[69]	500-800	500-800			THz
CdSe NCs[42]	~1-100				THz
CdSe bulk[42]	~470	~145			THz
GaAs crystal[70]	~8000	~400	7	1.6	Hall
Si crystal[70]	~1450	~500	1000	600	Hall
PbTe crystal[70]	~6000	~4000			Hall

MA = CH3NH3, THz = terahertz spectroscopy, PC = photoconductivity, TOF = time of flight, TA = transient absorption, TRPL = time resolved photoluminescence

Impact

To the best of our knowledge this is the first study to quantify the intrinsic proper-ties of the charge carriers in this material. We show that the excitons in this material are weakly bound and hence easy to dissociate. Additionally the defect states are not optically active. All these combined give rise to excellent light emitting properties

How this research work is benefited using PARAM Yuva II

Performing DFT calculations with spin orbit coupling interactions included are expensive. Having access to PARAM Yuva II made these calculations possible.

Experiences using PARAM Yuva II (system, support etc.)

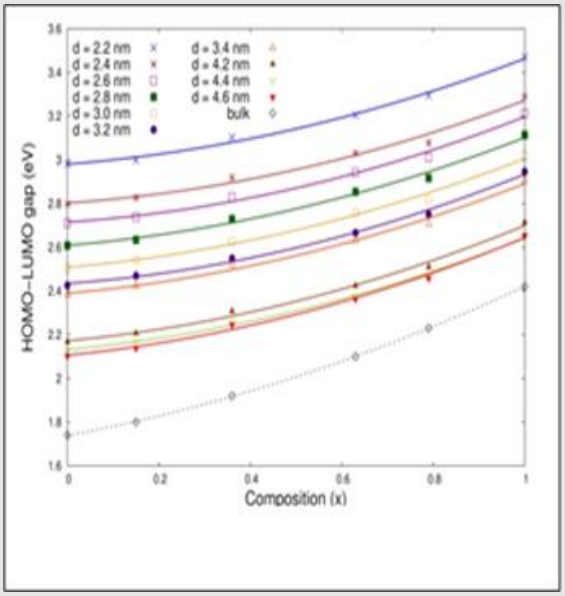
The system and support is excellent. However, the waiting time for jobs is enormously large. Hence when working with novel and interesting materials where one needs to compete with large groups abroad, this becomes a detrimental factor

इफ़ेक्ट ऑफ़ सब्स्टिट्यूशनल डोपिंग ऑन इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर ऑफ़ **II-VI** सेमीकंडक्टर क़्वांटम डॉट्स

मुख्य अन्वेषक: प्रोफ.अंजली क्षीरसागर
anjali@cms.unipune.ac.in

इंस्टीट्यूशन: सावित्रीबाई फुले पुणे विश्वविद्यालय

अनुसंधान क्षेत्र : भौतिक विज्ञान



Research Challenge

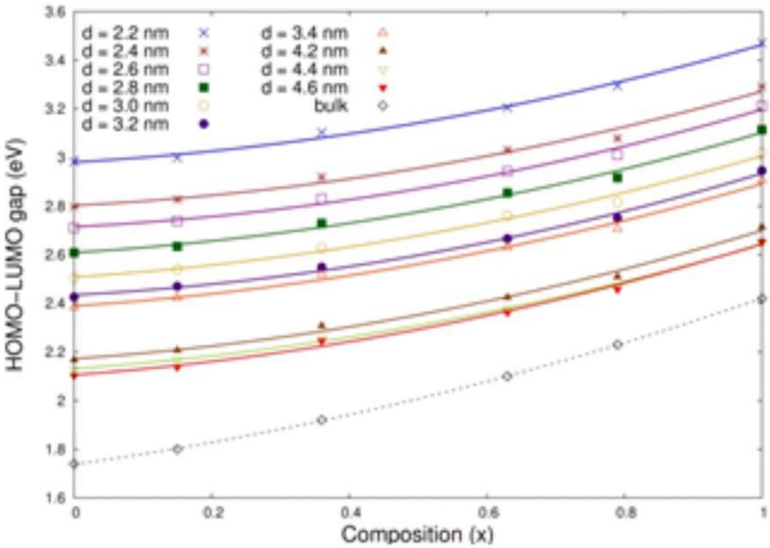
Materials, in particular, semiconductors, are found to change most of their electronic properties and related parameters at nano scale even though they show crystal structure similar to their bulk counter parts. When the size of the nanoparticles or quantum dots as they are normally termed, is comparable to the Bohr exciton radius of the bulk semiconductor, normally the size is of the order of few angstroms, the change in electronic properties is dramatic. To simulate the properties at nanoscale, we need to arrange few hundreds to few thousands of atoms (depending on size of quantum dots) in periodic order defined by their bulk structure. Challenging task is to obtain the minimum energy geometry called optimized structure for particular size to get accurate simulated electronic properties of quantum dots. Such time consuming and memory intensive computation is too di cult to be carried out on available machines.

Approach

We have used VASP package to obtain all our results. We tackle the challenging task by using parameters observed experimentally such as crystal structure, size, shape, element content i.e. doping value of quantum dots. We have used passivating atoms to satisfy the dangling bonds on the surface of the quantum dots and have not carried out geometric relaxation. We have confirmed that passivation locks the symmetry and therefore there is no need to minimize the total energy. Since parameters were experimentally observed results obtained are comparable to experiments and hence the reality. In this way we are able to generate reliable results with the available computing facility at C-DAC, Pune. In addition to the size of quantum dots, alloying provides another to vary the electronic properties. At nanoscale, sometimes, it is desirable to have certain properties like energy gaps for some given sizes of the quantum dots. In such situations, researchers prefer to carry out band gap engineering by changing the doping or alloying. In such situations, simulations are very useful to narrow down the time, money and e orts to identify the requisite materials. We have chosen CdSSe as our test materials to demonstrate the importance of this study.

Results

In the present work we have studied ten different sized (from 2.2 nm to 4.6 nm) spherical quantum dots of CdS_xSe_{1x} with six doping values for the parameter x (x = 0.0, 0.15, 0.36, 0.63, 0.79, 1.00) as shown in the graph. Fitting parameter and bowing parameter b (highlighted with red) are shown in table. It is observed that bowing parameter b is slightly higher than bulk CdS_xSe_{1x} alloy. These values will enable experimentalists to design specific sized quantum dot of CdS_xSe_{1x} with desired energy gap for a particular application with a specific value of x



Size (diameter) 'd' (*nm*)	b	b'	b"	b+b'+b"	CdSe gap (*eV*)	CdS gap (*eV*)
2.20	0.32	0.16	2.98	3.46	2.98	3.47
2.40	0.33	0.14	2.80	3.27	2.80	3.29
2.60	0.34	0.14	2.71	3.19	2.71	3.21
2.80	0.32	0.17	2.61	3.10	2.61	3.11
3.00	0.31	0.18	2.51	3.00	2.51	3.02
3.20	0.34	0.16	2.44	2.94	2.43	2.95
3.40	0.32	0.19	2.39	2.90	2.38	2.90
4.20	0.33	0.20	2.17	2.70	2.17	2.71
4.40	0.32	0.18	2.13	2.63	2.13	2.65
4.60	0.32	0.21	2.11	2.64	2.10	2.66
bulk	**0.29**	**0.38**	**1.74**	**2.41**	**1.74**	**2.42**

Table: coefficient of fitting parameter of quadratic equation in x ; $bx^2+b'x+b''$

Impact

Our work gives insight to experimental people who are working with CdS_xSe_{1x} alloy quantum dots to tune doping parameter and size to get desired HOMO-LUMO gap i.e. energy gap.

The knowledge of precise interaction mechanism of individual phonons with the inner nanostructure would lead to nanoscale motion control in nanomechanical and biotechnological applications.

How this research work is benefited using PARAM Yuva II

The calculations for size less than 3nm can be carried out on our departmental level HPC facilities, but size beyond that was not doable on our machine. Because of Param Yuva we can do calculation of quantum dots having size more than 3nm, which was the important size range for experimental people.

Experiences using PARAM Yuva II (system, support etc.)

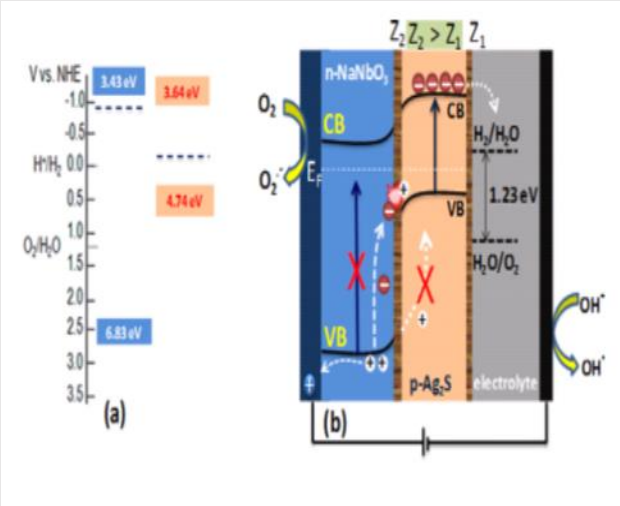
We have nice experience with PARAM Yuva II. We always get appreciable support from time to time from the user support team. Calculations in present work especially for larger quantum dots were not possible without C-DACs valuable support.

इलेक्ट्रॉनिक्स एंड थर्मल प्रॉपर्टीज ऑफ़ केल्कोजेनइड

मुख्य अन्वेषक: डॉ. अबीर डे सरकार
abir@inst.ac.in

इंस्टीट्यूशन: आईएनएसटी मोहाली

अनुसंधान क्षेत्र : भौतिक विज्ञान



Research Challenge

Research in clean energy generation is experiencing a global renaissance. The stringent environmental need for efficient and clean energy generation represents a strong pull to the scientific community. The largely improved experimental and theoretical tools to tailor materials, even on the nanometer scale, have now brought new imputes to the field, and enhanced international competition. In this proposed project we have theoretically investigate heterostructure compound for their potential in hydrogen generation and possible optimization of these materials by nanostructuring. Main challenges in this project are calculation of band structure of heterostructure and prediction of electron transfer path which is contributing in hydrogen evolving reaction.

Approach

We used density functional theory calculation to nd the band structure of bulk materials. Then we perform work function calculation and band edge position for the heterostructure. From the band edge position of heterostructure we can de ne electron transfer path.

Results

The calculated density of states (DOS) and projected density of states (PDOS) of NaNbO3 and Ag2S are shown in Figure and explain a possible interband transition. This transition depends on the coupling between the valence-band and conduction-band states. A small DOS leads to small effective masses, which lead to a strong coupling between the valence- and conduction-band states of Ag2S. For NaNbO3, electrons are transferred from the occupied O2p states to unoccupied Nb 4d states under UV light; for Ag2S, electrons are transferred mostly from Ag3d states to the d conduction band. As excited-electron transfers from d to d states also have high backward transition rates, the photogenerated electrons can only migrate rarely to the surface and perform photocatalytic reactions. Owing to the high dielectric constant of NaNbO3 (20), an electronhole or polaron pair is weakly bound at the surface of the core material and dissociates quickly to form free charge carriers before recombination can occur.

Impact

The calculation is helpful to explain the experimental observation and it elucidate the mechanism behind the photocatalytic reaction under visible light.

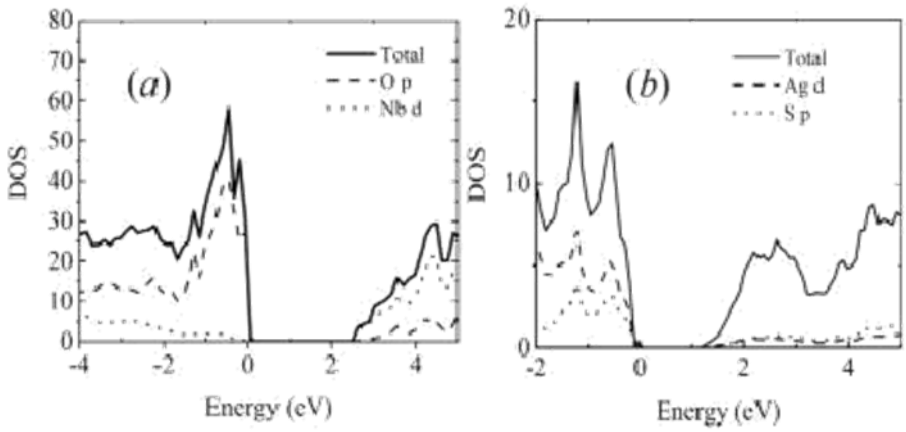


Figure: Total and projected density of states of (a) NaNbO3 and (b) Ag2S.

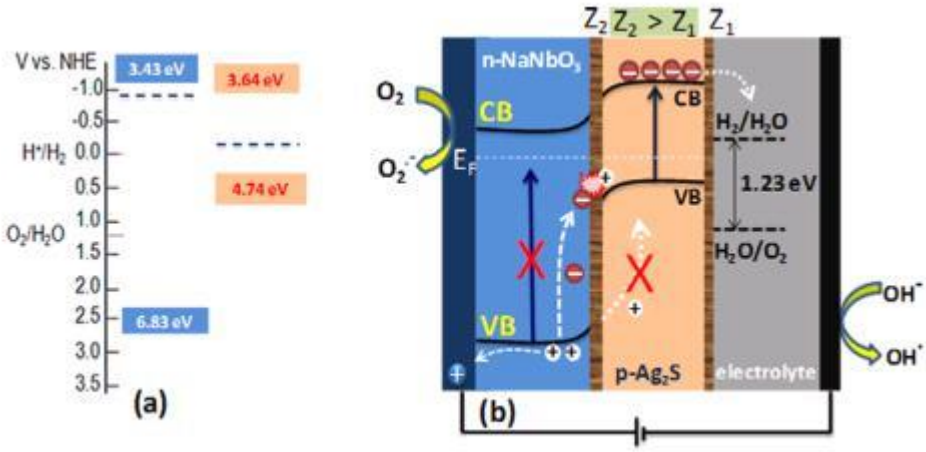


Figure: (a) Band-edge position and (b) the corresponding band diagram of the composite photoelectrode device.

How this research work is benefited using PARAM Yuva II

Support from PARAM Yuva II is very useful to perform the DFT calculation. Without PARAM Yuva II, it might not be possible to pursue the calculation

Experiences using PARAM Yuva II (system, support etc.)

We always get very supportive assistance from PARAM Yuva II team regarding installation of any software or setting and testing.

7

परम युवा II उपयोगकर्ताओ द्वारा शोध प्रबंध

वर्ष 2016-17 में पीएचडी शोधकर्ताओं की कुल संख्या :09

1. मॉलिक्यूलर सिमुलेशन स्टडी ऑफ़ ट्राइएंगल-वेल फ्लूइड्स कॉनफिनएड इनसाइड स्लिट पोर्स
पीएचडी छात्र : अंगन सेनगुप्ता, डिपार्टमेंट ऑफ़ केमिकल इंजीनियरिंग, इंडियन इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी,बॉम्बे
मुख्य अन्वेषक : डॉ. झुम्पा अधिकारी

2. रैशनल साल्वेंट डिजाईन फॉर दी एक्सट्रैक्शन ऑफ़ अ फार्मास्यूटिकल इंटरमीडिएट, आर-फेनाइलएसीटाइलकार्बीनॉल
पीएचडी छात्र : एम् एम् हरिनी, डिपार्टमेंट ऑफ़ केमिकल इंजीनियरिंग, इंडियन इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी,बॉम्बे
मुख्य अन्वेषक : डॉ. झुम्पा अधिकारी

3. एज इफ़ेक्ट ऑन इलेक्ट्रॉनिक बैंड स्ट्रक्चर ऑफ़ ग्राफेन नानोरीब्बनस: अ फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टडी
पीएचडी छात्र : दीपिका गोयल, आईआई टी रोपर
मुख्य अन्वेषक : डॉ राकेश कुमार

4. शोध प्रबंध शीर्षक: उपलब्ध नहीं है
पीएचडी छात्र : नित्यानंद साहू, आईआई टी कानपूर
मुख्य अन्वेषक : प्रोफ. श्रीधर गद्रे

5. शोध प्रबंध शीर्षक: उपलब्ध नहीं है
पीएचडी छात्र : अनमोल कुमार, आईआई टी कानपूर
मुख्य अन्वेषक : प्रोफ. श्रीधर गद्रे

6. मॉलिक्यूलर डायनामिक्स इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ फ़ास्ट आयन ट्रांसपोर्ट इन ऑक्साइड फ्रेमवर्क्स
पीएचडी छात्र : कार्तिक साहू, डिपार्टमेंट ऑफ़ फिजिक्स, आईआईटी गुवाहाटी
मुख्य अन्वेषक : डॉ. पद्म कुमार पद्मनाभन

7. फर्स्ट प्रिंसिपल्स इंवेस्टिगेशन्स ऑफ़ प्रॉपर्टीज ऑफ़ लौ डायमेंशनल सिस्टम्स एंड देअर रोल इन सेलेक्टिव

पीएचडी छात्र : इंदु कौल, आईआईएसईआर पुणे

मुख्य अन्वेषक : डॉ. प्रसेनजीत घोष

8. ऑन दी लाइकेलीहूड ऑफ़ मल्टीप्ल एररर्स ड्यू टू न्यूट्रॉन स्ट्राइक्स: अ सर्किट एंड लेआउट पर्सपेक्टिव

पीएचडी छात्र : नंदिता राव, डिपार्टमेंट ऑफ़ इलेक्ट्रिकल इंजीनियरिंग, आई आई टी बॉम्बे

मुख्य अन्वेषक : प्रोफ माधव देसाई

9. ऐब-ईनिश कैल्क्युलेशन्स ऑन इलेक्ट्रॉनिक मैग्नेटिक एंड लैटिस डायनैमिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ Ni-Fe-Ga Heusler एलाय

पीएचडी छात्र : चाबुन्ग्बम सत्यानंद सिंह, आईएएसएसटी

मुख्य अन्वेषक : डॉ. मुनिमा बी सहरियाह

8

परम युवा II उपयोगकर्ताओं द्वारा प्रकाशन

वर्ष 2016-17 में एनपीएसएफ प्रयोक्ताओं द्वारा कुल प्रकाशनों की संख्या: 61

नेनो लेटर्स (13.779)

एम वी डी प्रसाद एवम बी भट्टाचार्य, फोनन सकैटरिंग डायनामिक्स ऑफ़ थेर्मोफोरेटिक मोशन इन कार्बन नैनोट्यूब ऑसीलेटर्स, नैनो लेटर्स, 16, 2174-2180 (2016).

जी. आर. येत्तपु, डी तालुकदार , एस. सरकार, ऐ स्वर्णकार, ऐ नाग, पी घोष, एवम पी. मंडल,THz कंडक्टिविटी वीथिन कोलोइडल CsPbBr3 पेरोव्सकिते नैनोक्रिस्टल्स : रीमारकेबली हाई कैररयर मोबिलिटीज़ एवम लार्ज डिफ्फुसिन लेंग्थ्स, नैनो लेटर्स, 16, 2174-2180 (2016).

नेनोस्केल (7.76)

लक्ष्मण ताटीकोंड़ेवार एवम अंजलि क्षीरसागर, थ्योरेटिकल इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ एनर्जी गैप बोइंग इन CdSxSe1-x अलॉय क्वांटम डॉट्स. (प्रस्तुत)

केमिस्ट्री एंड ससटेनेबिलिटी (7.116)

कुमार एस, ऐ पी सिंह, चन्दन बेरा, एम तिरुमल, बी आर मेहता , ऐ के गांगुली, विज़िबल-लाइट-ड्रिवन फोटोएलेक्ट्रोकेमीक्ल एंड फोटोकैटेलैटिक परफॉरमेंस ऑफ़ NaNbO3/Ag2S कोर शैल हेटरोस्ट्रक्टर्ज़, केमिस्ट्री एंड ससटेनेबिलिटी, 9, 1850, (2016).

साइंटिफिक रिपोर्ट्स (5.228)

बेदी आर के., पटेल सी., मिश्रा वी., जीयाओ एच, यदा आर. वाय, भौमिक पी., अंडरस्टैंडिंग थीं स्ट्रक्चरल बेसिस ऑफ़ सब्सट्रेट रिकग्निशन बाय प्लासमोडियम फैलसिपेरम प्लेसमेप्सिन V to आइड इन थी डिजाईन ऑफ़ पोटेन्ट इनहिबिटर्स, साइंटिफिक रिपोर्ट्स 6, 31420, (2016).

तुषार रासकर, सागर खावणेकर, मधुसूदन होसुर, टाइम-डिपेंडेंट X-ray डिफरेकशन स्टडीज ऑन यूरिया/हेन एग वाइट ल्यसजयमे कॉम्प्लेक्सेस रिवेल स्ट्रक्चरल चेंजेस थेट इंडीकेट ऑनसेट ऑफ़ दीनातुरशन, साइंटिफिक रिपोर्ट्स 6, लेखसंख्या :32277 (2016)

दीपिका, शैलेश कुमार, अलोक शुक्ल राकेश कुमार, ओरिजिन ऑफ़ मल्टीप्ल बैंड गैप वैल्यूज इन सिंगल विड्थ नानोरीब्बनस, साइंटिफिक रिपोर्ट्स, 6, लेखसंख्या : 36168 (2016).

जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर बायोलॉजी (4.517)

राजेश कुमार कर , हुन्ग्यो खरेरीन, रंजिथ पदिनहतीरी एंड पाइके जयदेव भट, मल्टीप्ल कांफोर्मेशन्स ऑफ़ Gal3 प्रोटीन ड्राइव थी गैलक्टोज़-इंडुस्ड अलोस्टेरिक एक्टिवेशन ऑफ़ थी GAL जेनेटिक स्विच ऑफ़ सच्चरोमैसस सेरेविसिए, जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर बायोलॉजी, वॉल्यूम 429, इसयू 1, 6, जनवरी 2017, pp 158176 (2017)

जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री सी (4.509)

रोहित बाबर एंड मुकुल कबीर , ट्रांजीशन मेटल एंड वैकैंसी डिफेक्ट कॉम्प्लेक्सेस इन फोस्फोरेने: अ स्पिनट्रोनिक पर्सपेक्टिव, जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री सी, 120(27), pp 1499115000 (2016).

मानसी एस. महाबल, मृणालिनी डी. देशपांडे, तनवीर हुसैन, एंड राजीव आहूजा, सेंसिंग करेक्टेरिस्टिक्स ऑफ़ फोस्फोरेने मोनोलेर्स टुवर्ड्स PH3 एंड ASH3 गैसेस अपॉन थी इंट्रोडक्शन ऑफ़ वेकैंसी डिफेक्ट्स, जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री सी, 120, 20428 (2016).

ऍन. कुमार एंड पी. घोष, सेलेक्टिविटी एंड रिएक्टिविटी ऑफ़ Pd रिच PdGa सरफसेस टुवर्ड्स सेलेक्टिव ह्य्द्रोजनशन ऑफ़ एसिटिलीन: इंटरप्ले ऑफ़ सरफेस रफनेस एंड एन्सेम्बल इफ़ेक्ट, जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री सी, 120, 28654 (2016).

फिजिक्स केमिस्ट्री केमिस्ट्री फिजिक्स (4.449)

सीमा गौतम, अबीर दे सरकार, अ सिस्टेमेटिक इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ एसिटिलीन एक्टिवेशन एंड हैदरासायनाशन ऑफ़ एक्टिवेटिड एसिटिलीन ऑन Aun (n=3-10) क्लस्टर्स वाया डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी, फिजिक्स केमिस्ट्री केमिस्ट्री फिजिक्स, 18, 13830-13843 (2016).

संगखा बोराह एंड पी पद्म कुमार, ऐब इनीशयो मॉलिक्यूलर डायनामिक्स इन्वेस्टीगेशन ओफ स्ट्रक्चरल, डायनामिक एंड स्पेक्ट्रोस्कोपिक आस्पेक्ट्स ऑफ़ Se(VI) स्पीशीज इन थी अकेयस एनवायरनमेंट, फिजिक्स केमिस्ट्री केमिस्ट्री फिजिक्स ,18, 14561-14568 (2016).

संगखा बोराह एंड पी. पद्म कुमार, ऐब इनीशयो मॉलिक्यूलर डायनामिक्स स्टडी ऑफ़ Se(IV) स्पीशीज इन अकेयस एनवायरनमेंट, फिजिक्स केमिस्ट्री केमिस्ट्री फिजिक्स, 18, 26755-26763,(2016).

फ्रंटियर माइक्रोबायोलॉजी (4.165)

सचदेव एस, पलुर आर वी, सुधाकर के यू, राथीनवेलन टी, E. coli ग्रुप 1 कैप्सूलर पोल्यसच्चारिड एक्सपोर्टेशन नैनोमशीनरी एस अ प्लॉसिबल अंटिविरुलेंस टारगेट इन थी पर्सपेक्टिव ऑफ़ इमर्जिंग एन्टिमिक्रोबिअल रेजिस्टेंस, फ्रंटियर माइक्रोबायोलॉजी, https://doi.org/10.3389/fmicb.2017.00070 (2017).

वोटर रिसोर्सेज रिसर्च (3.792)

मधुसूधनान, सी. जी., श्रीजा, के. जी. एंड एल्दो, टी. आई., असेसमेंट ऑफ़ अनसर्टेन्टीज इन ग्लोबल लैंड कवर प्रोडक्ट्स फॉर हैड्रॉलिमटे मॉडलिंग इन इंडिया. वोटर रिसोर्सेज रिसर्च, एक्सेप्टेड ऑथर मैनुस्क्रिप्ट. . Doi: 10.1002/2016WR020193 (2017).

फिजिक्स रिव्यु बी (3.718)

एस. डैश, ऍन. जोशी, जी. दरेरा, पी. घोष, इ. मगनानो, ऐफ. बोनदिनो, पी. गेलिनेटो, एम. सी. मोज़्ज़ती, जी. सल्विनेली, वी. गकियान, एंड एल. संगालेटी, कटियन डिफ्फुसन एंड हैब्रिडजशन इफेक्ट्स ऐट थी Mn-GaSe(0001) रिएक्टेड इंटरफ़ेस: ऐब इनीशयो कैल्क्युलेशन्स एंड सॉफ्ट x-ray इलेक्ट्रान स्पेक्ट्रोस्कोपी स्टडीज, फिजिक्स रिव्यु बी, 93, 115304 (2016).

अजंता मैती, आकांशा सिंह, प्रसेनजित सेन, अनिरुद्ध कइबे, अंजलि क्षीरसागर एंड दिलीप जी. कान्हेरे, स्ट्रक्चरल, इलेक्ट्रॉनिक, मैकेनिकल, एंड ट्रांसपोर्ट प्रॉपर्टीज ऑफ़ फोस्फोरेने नेनोरीब्बनस : नेगेटिव डिफरेंशियल रेजिस्टेंस बिहेवियर, फिजिक्स रिव्यु बी, 94,075422 (2016).

कंप्यूटर फिजिक्स कम्युनिकेशन (3.635)

आर ल्पेज, जे. एफ. रीको, जी. रामरेज़, आई. एमआ, डी. ज़ोरिल्ला, ऐ. कुमार, एस. डे. येवले, एस . आर. गद्रे, टोपोलॉजी ऑफ़ मॉलिक्यूलर इलेक्ट्रान डेंसिटी एंड इलेक्ट्रोस्टेटिक पोटेंशियल विथ DAMQT, कंप्यूटर फिजिक्स कम्युनिकेशन, इन प्रेस (2017).(DOI:10.1016/j.cpc.2017.01.012)

जर्नल सेल बायोकेम (3.446)

नारंग, एस. एस., शुएब एस., गोयल डी., गोयल बी. असेसिंग थी इफ़ेक्ट ऑफ़ D59P म्युटेशन इन थी DE लूप रीजन इन अमीलोइड एग्रीगेशन प्रोपेन्सिटी ऑफ़ 2-microglobulin: अ मोलेक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी, जर्नल सेल बायोकेम, (2017) (मैनुस्क्रिप्ट आईडी : JCB-17-0125).

केमिस्ट्री फिजिक्स केमिस्ट्री (3.419)

डी. ऍन. लांदे, एस. एस. राव एंड ऐस. पी. गेज्जी, डीसायफरिन्ग नॉनकोवलेंट इंटरेक्शन्स अककंपनयिंग 7,7,8,8-टेट्रा सायनो क्विनो देमिथाईन एनकैप्सूलेशन वीथिन biphene[n]arenes: न्यूकेलिएस इंडिपेंडेंट केमिकल शिफ्ट्स एप्रोच, केमिस्ट्री फिजिक्स केमिस्ट्री, 17, 2197-2209 (2016).

एटमोस्फियरिक रिसर्च (3.377)

सुमिता केडिया, रीबू चेरियन, साहिदुल इस्लाम, सुब्रता कुमार दास, अक्षरा कागिनलकर, रीजनल सि मयूएलेशन ऑफ़ एयरोसोल रेडिएटिव इफेक्ट्स एंड थेआर एनुएन्स ऑन रैनफॉल ओवर इंडिया उसिंग WRFChem मॉडल, एटमोस्फियरिक रिसर्च, वॉल्यूम-182, 232242 (2016). RSC Advance(3.289)

आरएससी एडवांस (3.289)

संदीप कुमावत, सुदीप चक्रबोर्ती, अमोल बी. रहाणे, मृणालिनी डी. देशपांडे, राजीव आहूजा, टाइम डिपेंडेंट DFT इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ थे ऑप्टिकल रिस्पांस इन प्रिस्टिन एंड Gd डोप्ड Al2O3, आरएससी एडवांस, 6, 72537 (2016).

जी. अग्रवाल, डी. ऍन. लांदे, डी. चक्रबोर्ती, एस. पी. गेज्जी, पी. गोसावी, मिरकुटे ऐ. पाटिल एंड एस. सालुंके-गवली, ब्रोमाइन सब्स्टीट्यूटेड एमिनो नैफ्थोक्विनोन्स: सिंथेसिस, कैरेक्टराइजेशन, DFT एंड मेटल आयन बाइंडिंग स्टडीज, आरएससी एडवांस, , 6, 88010-88029 (2016).

सिद्धेश्वर चोपरा, ग्राफीन एंड ग्राफादियने: थ्योरेटिकल इनसाइट ईंटो ग्राउंड एंड एक्ससिटेड स्टेट प्रॉपर्टीज, आरएससी एडवांस, 6, 89934-89939 (2016).

जर्नल फिजिक्स केमिस्ट्री बी (3.187)

अस्वाथी ऍन. मुट्टाथूकततिल एंड गोवर्धन रेड्डी, ओस्मोलाइट इफेक्ट्स ऑन थी ग्रोथ ऑफ़ अमीलोइड फिब्रिल्स, जर्नल फिजिक्स केमिस्ट्री बी, DOI: 10.1021/acs.jpcb.6b09215, (2016).

गोवर्धन रेड्डी एंड डी. थिरुमलाई, कोलेप्स प्रेसेडेंस फोल्डिंग इन देन्तुरान्त-डिपेंडेंट असेंबली ऑफ़ यूबिक्विटीन, जर्नल फिजिक्स केमिस्ट्री बी, 121 (5), pp 9951009 (2017).

एप्लाइड फिजिक्स लेटर्स (3.142)

रेनू रानी , डिंपल , नित्यसागर जेना , अनिर्बान कुंडू , अबीर दे सरकार*, किरण शंकर हाज़रा *, कंट्रोल्ड फार्मेशन ऑफ़ नैनोस्ट्रुक्टरएस न MoS2 लेयर्स बाय फोकस्ड लेज़र इररेडिएशन , एप्लाइड फिजिक्स लेटर्स . (स्वीकार किए)

जर्नल ऑफ़ अलॉयज एंड कंपाउंड्स (3.014)

सत्यानंद चबुंगबम , पारिजात बोर्गोहैन , सुभ्रदीप घोष , नवदीप सिंह , मुनिमा बी सहरियाह, मारटेंसिटिक ट्रांसफॉर्मेशन एंड मैग्नेटिज़्म इन Ni एंड Fe-rich कॉम्पोसिशन्स ऑफ़ Ni-Fe-Ga शेप मेमोरी अलॉयज , जर्नल ऑफ़ अलॉयज एंड कंपाउंड्स 689, 199-207, (2016).

दी जर्नल ऑफ़ केमिकल फिजिक्स (2.894)

नलिनी गुरव , श्रीधर गेज्जी, लिबेरो बार्टोलोट्टी , एंड राजीव पाठक , इंकजेड मोलेक्युल्स इन एक्सटर्नल इलेक्ट्रिक फिल्डस : अ मॉलिक्यूलर टग -ऑफ़ -वॉर . दी जर्नल ऑफ़ केमिकल फिजिक्स , *145* 074302(2016), (अमेरिकन इंस्टिट्यूट ऑफ़ फिजिक्स) (2016).

एस. सापाती , ए. हसानली, आर. गेबोर, एंड पी. घोष , न्युक्लेअर क्वांटम इफेक्ट्स इन एन HIV/Cancer इन्हीबिटर : दी केस ऑफ़ एलिप्टिसिने *, *, ज. चेम. फि. , *145*, 205102 (2016).

दीपाश्री सराफ , अशोक कुमार , दिलीप कान्हेरे , एंड अंजलि क्षीरसागर , साइज डिपेंडेंट टनल डायोड इफेक्ट्स इन गोल्ड टिप्पएड़ CdSe ननोडम्बबेल्स , ज . चेम. फि. (2017) (स्वीकार किए)

कॉल एंड पी . घोष , फर्स्ट प्रिंसिपल्स इंवेस्टिगेशन्स ऑफ़ स्माल बाइमेटॉलिक PdGa क्लस्टर्स एस कैटालिस्ट्स फॉर हाइड्रोजन दिस्सोसिएशन *,चेम . फि . (2017). (स्वीकार किए)

ज. फिजिकल केमिस्ट्री ए (2.883)

देबासिश कोनर , लीजंडर बारिओस, टॉमस गोंज़ालेज़ -लेजाना, एंड आदित्या एन पांडा, स्टेट-टू-स्टेट डायनामिक्स ऑफ़ दी Ne + HeH+ (v = 0, j = 0) NeH+(v, j) + He रिएक्शन , ज. फि. चेम. ए , 120 (27), पी. पी. 47314741 (2016).

जर्नल ऑफ़ फिजिक्स डी (2.772)

वी संपथ एंड मनीष के. निरंजन, प्रेसाइज कंट्रोल ऑफ़ स्कॉटटकय बैरियर हाइट इन SrRuO3/SrTiO3 (001) हेटेरोजंक्शन्स यूसिंग उल्ट्राथिन इंटरफ़ेस पोलर लेयर्स *, जर्नल ऑफ़ फिजिक्स डी : एप्लाइड फिजिक्स, 49, (25) 255302, (2016).

जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर लिक्विड्स (2.74)

सेनगुप्ता अंगन एंड झुम्पा अधिकारी, फ्लूइड फेज इक्विलिब्रिया ऑफ़ ट्रायंगल-वेल फ्लूइड्स कॉनफ़ाइनेड इनसाइड स्लिट पोर्स : अ ट्रांजीशन मैट्रिक्स मोंटे कार्लो सिमुलेशन स्टडी जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर लिक्विड्स 221, 1184-1196, (2016).

जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री ए (2.693)

पी. एल वर्मा , एल जे बार्टोलोट्टी एंड एस पी गेज्जी , प्रोबिंग मॉलिक्यूलर इंटरेक्शन्स इन फंक्शनललाइज़्ड असिमेट्रिक काटेरनरी अमोनियम बेस्ड डिकेशनिक आयनिक लिक्विड्स , जे फि. चेम. ए, (2016). (स्वीकार किए)

एस एस राव एंड एस पी गेज्जी, इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर , एन एम् आर, स्पिन-स्पिन कपलिंग एंड नॉनकोवलेंट इंटरेक्शन्स इन एरोमेटिक एमिनो एसिड बेस्ड आयनिक लिक्विड्स जे फि चेम. अ , 120, 5665-5684(2016). (स्वीकार किए)

डी एन लांडे एंड एस पी गेज्जी, कोआपरेटिव हाइड्रोजन बॉन्डिंग, मॉलिक्यूलर इलेक्ट्रोस्टेटिक पोटेंसियाल एंड स्पेक्ट्रल कैरक्टरिस्टिक्स ऑफ़ पार्शियल थिया सब्सटिट्यूटेड कैलिक्स[4]आरएनए मैक्रोसायक्लेस, जे फि चेम अ , 120, 73857397 (2016). (स्वीकार किए)

कंप्यूटर्स जिओसाइंसेज (एल्सेवियर)(2.474)

रस्तोगी आर, लोंढे ए, श्रीवास्तव ए., सिरसला के., खोंडे के , 3D किरछो डेप्थ माइग्रेशन अल्गोरिथम : ए न्यू स्केलेबल एप्रोच फॉर पैरेललाईजेशन ऑन मल्टीकोर सी पी यू बेस्ड क्लस्टर , कंप्यूटर्स जिओसाइंसेज (एल्सेवियर) (2016). (एक्सेप्टेड)

जर्नल ऑफ़ मैटेरियल्स साइंस (2.302)

ओमकार त्रिपाठी एंड पी पद्मा कुमार , जर्नल ऑफ़ मैटेरियल्स साइंस , मॉलिक्यूलर डायनामिक्स इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ ऑक्साइड आयन ट्रांसपोर्ट इन Sr-doped LaMnO3, पब्लिश्ड ऑनलाइन (DOI: 10.1007/s10853-017-0889-9) (2017).

फिजिकल रिव्यु इ (2.288)

मिहिर दुर्वे , अहमद सईद , फर्स्ट -आर्डर फेज ट्रांजीशन इन अ मॉडल ऑफ़ सेल्फ-प्रोपेल्ड पार्टिकल्स विथ वेरिएबल एंगुलर रेंज ऑफ़ इंटरेक्शन , फिजिकल रिव्यु इ , वॉल्यूम 93, पेज 052115, (2016).

जर्नल ऑफ़ बायोमोलिक्यूल स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स (2.15)
सागर खावणेकर, अविनाश काले, कंफोर्मेशनल डायनामिक्स ऑफ़ Peb4 एक्सहिबिट मदर्स आर्म्स चैन मॉडल : ए मॉलिक्यूलर डायनामिक्स स्टडी , जर्नल ऑफ़ बायोमोलिक्यूल स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स (जे बी एस डी). (स्वीकार किए)

मैटेरियल्स केमिस्ट्री एंड फिजिक्स (2.101)

कैलाश चंद्र भामू , कौस्तुभ आर प्रिओलकर, इलेक्ट्रॉनिक एंड ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ AgAlO2: ए आरएसटी -प्रिंसिपल्स स्टडी , मैटेरियल्स केमिस्ट्री एंड फिजिक्स, वॉल्यूम 190, 1 April 2017, Pages 114119.

जे. मोल. रेकॉगनिट(2.091)

सैनी आर के ; शुएब एस; गोयल बी, मॉलिक्यूलर इनसाइट्स ईंटो A42 प्रोटोब्रिल डेस्ट्बी लाईजेशन विथ अ फ्लुओरीनेटेड कंपाउन्ड डी744: ए मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी जे मोल. रेकॉगनिट. (2017) (मैनुस्क्रिप्ट आईडी : जेएम्आर -17-0017)

सरफेस साइंस (1.931)

मनीष के. निरंजन , *थ्योरेटिकल इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ सरफेस स्टेट्स एंड एनेरजेटिक्स ऑफ़ PtSi सरफसेस*, सरफ़ेस साइंस, 649, 2733 (2016).

फिजिक्स लेटर्स ए (1.677)

मोसेस जे करथा , अहमद सईद, "फेज ट्रांजीशन इन डिफ्फयूजन लिमिटेड एग्रीगेशन विथ पैची पार्टिकल्स इन ट्व डाइमेंशन्स ", फिजिक्स लेटर्स ए , वॉल्यूम 380, पेजेज 2791(2016).

केमिकल फिजिक्स (1.55)

सेनगुप्ता अंगन एंड झुम्पा अधिकारी , प्रेडिक्शन ऑफ़ फ्लूइड फेज इक्विलिब्रिया एंड इंटरफेसियल टेंशन ऑफ़ ट्रायंगल-वेल फ्लूइड्स यूसिंग ट्रांजीशन मैट्रिक्स मोंटे कार्लो केमिकल फिजिक्स , 469470, 1624 (2016).

जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर मॉडलिंग (1.438)

वेंकटरमानं एन एस, कोऑपरेटिविटी ऑफ़ इंटरमोलेक्युलर हाइड्रोजन बांड्स इन माइक्रो सोलवटेड डीएम्एसओ एंड डीएम्ऍफ़ क्लस्टर्स: अ डीऍफ़टी, एआईएम् एंड एनसीआई एनालिसिस , जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर मॉडलिंग.

एआईपी एडवांसेज 6 (1.43)

संदीप कुमार जैन , भीमा लिंगम चित्तारि एंड विजय कुमार , ऑप्टिमम थिकनेस ऑफ़ सॉफ्ट मैग्नेटिक फेज इन FePt/FeCo परमानेंट मैगनेट सुपरलेत्तीसस विथ हाई एनर्जी प्रोडक्ट एंड लार्ज मैग्नेटिक अनिसोट्रोपी एनर्जी , एआईपी एडवांसेज 6, 025027 .(2016).

ऐबदोल्लाह नादेरी and एस वी घैसास, अ कम्प्यूटेशनल अब इनिशिओ स्टडी ऑफ़ सरफेस डिफीयूजन ऑफ़ सल्फर ऑन दी CdTe (111) सरफेस . एआईपी एडवांसेज 6, 085002 (2016).

अमेरिकन इंस्टिट्यूट ऑफ़ एरोनॉटिक्स एंड अस्ट्रोनौटिक्स (1.326)

गुप्ते आदित्या अजित , ए एम् प्रदीप एंड पी एम् मुजुमदार, न्यूमेरिकल एनालिसिस ऑफ़ सरक्यू -लर सिंथेटिक जेट इन क्रॉसफ्लो , अमेरिकन इंस्टिट्यूट ऑफ़ एरोनॉटिक्स एंड अस्ट्रोनौटिक्स .

वेदर (1.262)

एनसी थॉमस , सागर काशिद , अक्षरा कागिनाळकर एंड सहिदुल इस्लाम, 2016: हाउ एक्यूरेट आर दी वेदर फोरकास्ट्स अवेलेबल टू दी पब्लिक इन इंडिया वेदर , वॉल्यूम 71, No. 4, 84-88, (2016).

जे इंक्ल. फेनोम. मैक्रोसायक्लिक चेम (1.253)

एन एस वेंकटरमानं, ए सुविथा , स्ट्रक्चर , इलेक्ट्रॉनिक , इंकलूजन काम्प्लेक्स फोरमेशन बिहेवियर एंड स्पेक्ट्रल प्रॉपर्टीज ऑफ़ पिल्लरपलेक्स , सुब्मिटटेड टू जे. इंक्ल. फेनोम. मैक्रोसायक्लिक चेम.

जर्नल ऑफ़ केमिकल साइंस (1.085)

एस आर गद्रे , ए कुमार, बॉन्डिंग एंड रेअक्टिविटी पैटर्न्स फ्रोम इलेक्ट्रोस्टेटिक लैंड-एसकेप्स ऑफ़ मोलेक्युल्स , जे. चेम. साइंस, 128, 1519 (2016).

मेटर. रेस. एक्सप्रेस (0.968)

देबाशीष दास , श्रीमोयी गांगुली , बिप्लब सान्याल एंड सुभ्रदीप घोष, इफ़ेक्ट ऑफ़ Fe डोपिंग इन दी स्ट्रक्चरल , इलेक्ट्रॉनिक एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ CoCr 2 O 4: इनसाइट्स फ्रोम अब इनिशो कैल्क्युलेशन्स, मेटर. रेस. एक्सप्रेस, 3, 106106 (2016).

एडवांसेज इन कंडेंस्ड मेटर फिजिक्स(0.9)

प्रिया फ्रांसिस एंड एस. वी घैसास, हाइड्रोजन टर्मिनेटेड सिलिकॉन नैनोपार्टिकल्स विथ डी फेक्ट्स : अ पोटेंशियल इलेक्ट्रोड फॉर Li-ion बैटरी , एडवांसेज इन कंडेंस्ड मेटर फिजिक्स. (प्रस्तुत)

जे. फि. कंडेन्स मेटर (0.8)

देबाशीष दास, राजकुमार बिस्वास एंड सुभ्रदीप घोष , सिस्टेमेटिक एनालिसिस ऑफ़ स्ट्रक्चरल एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ स्पिनेल CoB 2 O 4 (B=Cr, Mn and Fe) कंपाउंड्स फ्रोम देयर इलेक्ट्रॉनिक, जे. फि. कंडेन्स. मेटर, 28 (2016) 446001.

देबाशीष दास एंड सुभ्रदीप घोष , फर्स्ट -प्रिंसिपल्स इंवेस्टिगेशन्स ईंटो दी थर्मो डायनामिक्स ऑफ़ कॉशन डिसऑर्डर एंड इट्स इम्पैक्ट ऑन इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ स्पिनेल Co (Cr 1x Mn x) 2 O 4, जे. फि. कंडेन्स. मेटर, 29 (2017) 055805

सॉफ्ट कंडेंस्ड मेटर (0.621)

इंद्रजीत वडगाओंकर, अप्रतिम चटर्जी , नेटवर्क फार्मेशन एंड जेलाटिन इन तेलेचेलिक स्टार पॉलीमर्स , सॉफ्ट कंडेंस्ड मेटर , https://arxiv.org/abs/1609.08378 कांफ्रेंस प्रोसीडिंग्स (2016-2017)

नीलेश मलतारे एंड चेतन चुडासमा, अप्पलईंग पैरेलल डिजाईन पैटर्न्स टू एम्बेरेसिंगली पैरेलल प्रॉब्लम . कोलोसल डाटा एनालिसिस एंड नेटवर्किंग (CDAN), सिम्पोजियम , DOI: 10.1109/CDAN.2016.7570888.

9

परम युवा II के दौरे

1 अप्रैल 2016 से 15 मार्च 2017 के दौरान परम युवा II को देखने आए लोगों की कुल संख्या: 3607

गणमान्य व्यक्तियों द्वारा किये गए दौरे

- श्री. पी. पी. चौधरी, माननीय राज्य मंत्री, कानून और न्याय मंत्रालय, (एमईआईटीवाई)
- श्री. अनिल शिरोले, माननीय संसद सदस्य, पुणे
- डॉ. वी. के. सारस्वत, माननीय नीति आयोग के सदस्य
- श्रीमती अरुणा सुंदरराजन, माननीय सचिव, (एमईआईटीवाई)
- डॉ. अरुणा शर्मा, माननीय (भूतपूर्व)सचिव, डीईआईटीवाई
- श्रीमती श्वेतिका सचान, सहायक सचिव, (एमईआईटीवाई)
- श्रीमती सारिका प्रधान, अतिरिक्त सचिव - मनरेगा / आरएमडीडी, सिक्किम सरकार
- श्री. उमेश प्रसाद साह, डीआईआर-आईटी, झारखंड सरकार
- श्री. सुम्नेश जोशी, सहायक महानिदेशक, यूआईडीएआई
- श्री. अनुराग तंखा, इंस्पेक्टर जनरल, एनआईए
- डॉ धनंजय घनवट, पुलिस अधीक्षक, असम
- श्रीमती रेणु बुद्धिराजा, सीनियर डायरेक्टर, (एमईआईटीवाई)
- श्री. सुजीत बनर्जी, वैज्ञानिक एफ, डीएसटी
- डॉ. सुभाष ढकाल, ओएसडी, मनरेगा / आरएमडीडी, सिक्किम सरकार
- श्री. अशिस चटर्जी, एचपीसी और रैक स्केल मैनेजर, इंटेल कॉर्पोरेशन
- श्री. अरुणव राय चौधरी, जीएम, आईआरईएल
- श्री. यू. सी. राय एनआईटी मिज़ोरम के निदेशक
- श्री. नीरज कुमार गुप्ता सीईए के निदेशक
- श्री. वी. वी. पर्लिकर, निदेशक, आरडीई, डीआरडीओ
- लेफ्टिनेंट जनरल, जे एस चीमा, डीसीओएएस (आईएसटी), भारतीय सेना
- श्री. नवीन कुमार, डीईआईटीवाई

टेबल 9.1: छात्रों के औद्योगिक दौरे का सारांश

संस्था	आगंतुकों की कुल संख्या	दौरे की तारीख
2016		
जे. के. इंस्टीट्यूट ऑफ एप्लाइड फिजीक्स.और प्रौद्योगिकी, इलाहाबाद विश्वविद्यालय	50	अप्रैल 12
पिंपरी-चिंचवड़ कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग	18	अप्रैल 13
आईएनएस हम्ला, मालाड, मुंबई	20	जून 14
दीपस्तंभ फाउंडेशन	-	जुलाई 22
अभिनव एजुकेशन सोसाइटी के सीओईटी(पॉलिटेक्निक), सातारा	57	अगस्त 25
डी.वाई.पाटील प्रतिष्ठान शैक्षणिक परिसर, आकुर्डी	80	-
एआईएसएसएमएस आईओआईटी, पुणे	67	सितम्बर 14
श्री रामचंद्र कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग, पुणे	45	सितम्बर 19
श्री ए.एन. पटेल पोस्ट ग्रेजुएट इंस्टिट्यूट, आनंद, गुजरात	53	सितम्बर 19
डॉन बोस्को इंस्टीट्यूट ऑफ टेक्नोलॉजी, मुंबई	60	सितम्बर 22
घारदा इंस्टीट्यूट ऑफ टेक्नोलॉजी, खेड, पुणे	40	सितम्बर 22
ट्रिनिटी पॉलिटेक्निक, पुणे	60	सितम्बर 23
एआईएसएसएमएस आईओआईटी, पुणे	50	सितम्बर 26
प्रतिक खरात	30	सितम्बर 26
इंपीरियल कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग एंड रिसर्च, वाघोली, पुणे	40	सितम्बर 27
एमआईटी एओई, पुणे	92	सितम्बर 27
झील एजुकेशन सोसाइटी झेडसीओईआर, नरहे, पुणे	80	सितम्बर 28
आरएमडी सिंहगड स्कूल ऑफ इंजीनियरिंग, वारजे, पुणे	90	सितम्बर 29
राजर्षि शाहू सीओई, पुणे	60	सितम्बर 30

संस्था	आगंतुकों की कुल संख्या	दौरे की तारीख
वीआईआईटी, पुणे	60	सितम्बर 30
शासकीय पॉलिटेक्निक, अवसारी	73	अक्टूबर 03
पीआईसीटी, पुणे	62	अक्टूबर 04
मारवाडी एजुकेशन फाउंडेशन	155	अक्टूबर 04
मराठवाड़ा मित्र मंडल की प्रौद्योगिकी संस्था, पुणे	64	अक्टूबर 05
जेएसपीएम का भिवरा बाई सावंत पॉलीटेक्निक, वाघोली	70	अक्टूबर 07
जे. टी. महाजन कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग, फैजपुर	40	अक्टूबर 07
सेंट जेवियर का इंजीनियरिंग कॉलेज, रांची, झारखंड	70	अक्टूबर 12
एस. एन. डी. टी. महिलाओं के लिए आर्ट्स और कॉमर्स कॉलेज , पुणे	70	अक्टूबर 13
बालासाहेब म्हात्रे पॉलिटेक्निक, बदलापुर	30	अक्टूबर 13
आर.बी.एस. इंजीनियरिंग तकनीकी परिसर, आगरा	70	अक्टूबर 14
तेरना इंजीनियरिंग कॉलेज	100	अक्टूबर 14
मराठवाड़ा मित्र मंडल पॉलीटेक्निक, पुणे	120	अक्टूबर 14
डॉ. डी. वाई. पाटिल इंस्टीट्यूट फॉर एमसीए , आकुर्डी, पुणे	100	अक्टूबर 17
एम.पी. विज्ञान और प्रौद्योगिकी परिषद (एमपी-सीओएसटी), भोपाल	130	अक्टूबर 21
गणपत विश्वविद्यालय (जीएनयू)	60	दिसंबर 14
पवार पब्लिक स्कूल	40	दिसंबर 15
वीईएस कॉलेज मुंबई	100	दिसंबर 19
वीवीएस स्कूल	60	दिसंबर 21
बी. डी. काले महाविद्यालय	100	दिसंबर 27

पीईएस, आधुनिक कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग	100	दिसंबर 28
संस्था	आगंतुकों की कुल संख्या	दौरे की तारीख
2017		
ओम इंजीनियरिंग कॉलेज	40	जनवरी 09
अभिनव कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग, सातारा	36	जनवरी 13
अंजुमन-ए-इस्लाम अकबर पीरभॉय कॉलेज ऑफ कॉमर्स और अर्थशास्त्र, मुंबई	100	जनवरी 17
कला, कॉमर्स और विज्ञान कॉलेज- मरीर, एमआईटी, कोथरूड	50	जनवरी 23
एम.एल.डहाणुकर कॉलेज	140	जनवरी 24-25
पीजी डिप्लोमा इन आईटी , एक्ट्स छात्र	60	जनवरी 19
गुरुकुल एजुकेशन सोसाइटी इंस्टीट्यूट ऑफ इंजीनियरिंग एंड तकनीकी	40	फरवरी 03
संकाय विकास कार्यक्रम	20	फरवरी 07
डा. य.स.पाटिल	15	फरवरी 08
लत्ते पॉलिटेक्निक कॉलेज	40	फरवरी 09
सिंहगड इंस्टीट्यूट ऑफ टेक्नोलॉजी और साइंस, नरहे, पुणे	60	फरवरी 14
एआईएसएसएमएस आईओआईटी पुणे	65	फरवरी 16
आर्मिएट कॉलेज	140	फरवरी 17
श्री नारायण कॉलेज, कन्नूर	12	फरवरी 24
एस. एन. कॉलेज, मुंबई	120	मार्च 02
एमआईटी, औरंगाबाद	60	मार्च 06

परिशिष्ट ए

वर्ष 2016-17 के दौरान नामांकित परियोजनाएं

परम युवा II का कंप्यूट टाइम उपयोग करने वाले विभिन्न संस्थानों की परियोजनाओं की सूची, मुख्य अन्वेषक का विवरण और उपयोगकर्ताओं की संख्या इस परिशिष्ट में शामिल है।

संस्थान	परियोजना	मुख्य अन्वेषक	उपयोगकर्ताओं की संख्या
एमिटी यूनिवर्सिटी	डी ऍफ़ टी बेस्ड केमिकल , स्ट्रक्चरल , ऑप्टिकल एंड मेग्नेटिक स्टडी ऑफ़ फंक्शनलाईज़ेड ग्राफेन नानोरीब्बनस	डॉ. सिद्धेश्वर चोपरा	1
	कम्प्यूटेशनल स्टडी ऑफ़ अर्सेनेने बेस्ड नैनो-डिवाइसेस	डॉ मनोज कुमार शर्मा	1
आर्मी इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी, पुणे	न्यूरल नेटवर्क बेस्ड इमेज कैप्शनिंग	डॉ. नंदकुमार बनसोडे	5
सेंट्रल यूनिवर्सिटी ऑफ़ हरियाणा	अब इनिशिओ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन ऑफ़ आयनिक लिक्विड डोप्ड पॉलीमर इलेक्ट्रोलाइट मैमब्रेन्स एंड प्लैटिनम इलेक्ट्रोड इंटरफ़ेस	डॉ. अनुराग सुंदा	3
डीआरडीओ-बीयू ,सेंटर फॉर लाइफ साइंसेज ,कोयम्बटूर	डेवलपमेंट ऑफ़ मॉलिक्यूलर सिमुलेशन मॉडल्स फॉर बायोलॉजिकल थेरपीयूटीक ऍप्लिकेशन्स अगेंस्ट टारगेट टोक्सिन एजेंट्स	डॉ. वेंकटरमन. एम्	4

डी. वाय. पाटिल यूनिवर्सिटी, नवी मुम्बई	इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ सेल डिवीज़न प्रोटीन्स इन थेर्मोफिल्स	डॉ. देबजानी दासगुप्ता	3
गीतम स्कूल ऑफ़ टेक्नोलॉजी, हैदराबाद कैंपस	थ्योरेटिकल एंड ओब्सेर्वेशनल स्टडी ऑफ़ कॉस्मिक मोलेक्युल्स	डॉ. महादेव नागनथप्पा	1
जीएलए यूनिवर्सिटी, मथुरा	थ्योरेटिकल इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ नॉवेल मैटेरियल्स एप्पली - केशन्स इन दी फील्ड ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक्स एंड ऑप्टोइलेक्ट्रोनिक देविसेस	डॉ. ब्रम्हा प्रसाद पांडेय	1
एचपीटी आर्ट्स एंड आरवायके एस. कॉल., नासिक	थ्योरेटिकल स्टडी ऑफ़ स्ट्रक्चरल , इलेक्ट्रॉनिक एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ नैनोमटेरिअल्स	डॉ. मृणालिनी देशपांडे	2
	इलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ टीएम् डोप्ड ZnO शीट:डेंसिटी फंक्शनल स्टडी	डॉ मृणालिनी देशपांडे	3
आई ए एस एस टी , गुवाहाटी	न्यू एन-टाइप आर्गेनिक सेमीकंडक्टर्स फॉर ऑप्टोइलेकट्रॉनिक्स : सिंथेसिस,करेक्टेराइज़ेशन एंड डिवाइस फेब्रिकेशन	डॉ. सागर शर्मा	1
आईआईए, बैंगलोर	न्यूमेरिकल सिम्युलेशन्स ऑफ़ हैडरोमेग्नेटिक टर्ब्यू-लेंस फ्रोम गैलेक्सीज टू सन	डॉ. शरण्य सूर	2
आई आई आई टी , हैदराबाद	सिमुलेशन ऑफ़ फाल्ट मोशन एनालिसिस , सिमुलेशन ऑफ़ कोलेप्स	डॉ. रामांचराला प्रदीप कुमार	3

	बिहेवियर ऑफ़ बिल्डिंग्स सब्जेक्टेड टू अर्थकाक्स		
आई आई एस इ आर, पुणे	मॉलिक्यूलर मॉडलिंग एंड डायनामिक्स ऑफ़ पॉलीमर्स ,गैस हाईड्रेट्स एंड आयनिक लिक्विड्स : एन अल्टरनेटिव एन-रजि इनिशिएटिव	प्रोफ. अरुण वेंकटनाथन	8
	मैटेरियल्स मॉडलिंग एट डिफरेंट लेंथ एंड टाइम स्केल्स	डॉ. मुकुल कबीर	5
	स्टडी ऑफ़ CdS एंड CdTeS क्वांटम डॉट्स डेकोरेटेड ऑन TiO2 नोवायर्स	डॉ. प्रसेनजित घोष	7
	सेलेक्टिव हाइड्रोज़िनेशन ऑफ़ एसिटिलीन ऑन Pd/Ga इंटरमेटॉलिक कंपाउंड्स	डॉ. प्रसेनजित घोष	3
	कैटेलिस्ट डिजाईन फॉर मोलेक्यूलर-एच स्प्लिटिंग	डॉ. मुकुल कबीर	3
	वेकैंसी डिफयूज़न इन ग्राफेन	डॉ. मुकुल कबीर	2
	माइक्रोस्कोपिक मैकेनिज्म फॉर मीथेन हाइड्रेट फॉर - मेशन	डॉ. मुकुल कबीर	3
	O2 मॉलिक्यूल स्प्लिटिंग एंड डिफयूज़न ऑन LaMnO3 सरफेस	डॉ. मुकुल कबीर	3
आई आई टी गुवाहाटी	अटॉमिस्टस सिमुलेशन ऑफ़ फ़ास्ट आयन ट्रांसपोर्ट इन सॉलिड्स	डॉ. पद्मा कुमार पद्मनाभन	3

	कम्प्यूटेशनल स्टडीज ऑफ़ अलोस्टेरिक मैकेनिज्म ऑफ़ SAMHD1	डॉ. स्वाती भट्टाचार्य	2
आई आई टी हैदराबाद	स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ RMA डुप्लेक्सेस कॉम्प्रीजिंग ऑफ़ ट्राईनियोक्लीओटाइड रिपीट एक्सपेंशन	डॉ. थेनमलरसेल्वी रथिनावेलन	1
	स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ इ.कोली आउटर मेम्ब्रेन लेक्टिन	डॉ . थेनमलरचेल्वी रथिनावेलन	2
	कैलोरीमीट्रिक डिटेक्शन ऑफ़ UCHLI	डॉ . अनिंद्य रॉय	2
	फर्स्ट प्रिंसिपल्स इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ नैनो मैटेरियल्स डॉ .	अमित आचार्य्य	3
इंडियन इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी , इंडियन स्कूल ऑफ़ माइंस ,धनबाद	थ्री डायमेंशनल मॉडलिंग ऑफ़ मैग्नेटोटेलउरिक डाटा ओवर दलमा एंड धनजोरी वोल्कानिक्स	प्रोफ . शालिवाहन	2
आई आई टी जोधपुर	केमिकल डायनामिक्स सिम्युलेशन्स ऑफ़ काम्प्लेक्स आर्गेनिक रिएक्शन्स : मेकैनिस्टिक इनसाइट्स एंड माइक्रो - सॉल्वेशन इफेक्ट्स	डॉ . मणिकंदन परंजोतय	2
	न्यूमेरिकल सिमुलेशन ऑफ़ लार्ज स्केल इंडस्ट्रियल बायोरिएक्टर उसिंग जी पी यू पैरेलल अल्गोरिथम	डॉ . बी . रविन्द्र	2

आई आई टी खरगपुर	कम्प्यूटेशनल स्टडी ऑफ़ एंजाइम कटैलिसीस	डॉ . सब्यसाची मिश्र	3
	एनालिसिस ऑफ़ नैनो - कंपोजिट्स यूसिंग मॉलिक्यूलर डायनामिक्स	डॉ . मुहम्मद राबिस सनी	2
आई आई टी पटना	डेवलपमेंट ऑफ़ स्मार्ट मटेरियल यूसिंग मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन	डॉ . संदीप खान	2
आई के एस टी (आई एन डी ओ कोरिया साइंस एंड टेक्नोलॉजी सेण्टर)	डिजाईन ऑफ़ III-V सेमीकंडक्टर अलॉयज फॉर नेक्स्ट जनरेशन इलेक्ट्रॉनिक्स	डॉ . सेउंग चेओल ली	1
आई एन ए ऍफ़	फ्लाइट डायनामिक्स ऑफ़ अनपॉवरड ग्लाइडर	एयर मार्शल शिरीष देव	1
आई एन एस टी, मोहाली	एटॉमिक स्केल डिजाईन ऑफ़ नावेल नैनोमटेरिअल्स फॉर क्लीन एनर्जी एंड देविसेस	प्रोफ . अबीर दे सरकार	5
	अब इनिटीओ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स (AIMD) सिम्युलेशन्स	डॉ. मो. एहसान अली	1
	इलेक्ट्रॉनिक्स एंड थर्मल प्रॉपर्टीज ऑफ़ चॉकोजनीदे	डॉ . चन्दन बेरा	2
	फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टडी ऑफ़ पेरोव्सकिते कंपाउंड्स , अ प्रोब फॉर सोलर सेल मैटेरियल्स	डॉ . दिब्या प्रकाश राय	1
	क्वांटम कैपसिटेंस कैलकुलेशन ऑफ़ कारबोनकेयस	डॉ . रामेन्द्र सुन्दर दे	2

	मैटेरियल्स		
कुरुक्षेत्र यूनिवर्सिटी , कुरुक्षत्र , हरियाणा	सिम्युलेशन्स ऑफ़ रेयर अर्थ फ्री मैग्नेटिक इनऑर्गेनिक हॉलिडे पेरोव्स्कीट्स फॉर फोटोवोल्टाइक ऍप्लिकेशन्स , अकादमिक	डॉ . मनीष कुमार कश्यप	3
	एन आई एस ई आर न्यूमेरिकल स्टडीज ऑफ़ कोरिलेटेड फेसेस एंड ट्रांसिशन्स इन फ्रसट्रेटेड मैग्नेट्स	श्री. वी. रवि चंद्रा	1
पाछुंगा यूनिवर्सिटी कॉलेज , मिजोरम यूनिवर्सिटी	अ फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टडी ऑफ़ पेरोव्सकिते कंपाउंड्स ,अ प्रोब फॉर सोलर सेल मैटेरियल्स	डॉ. दिब्या प्रकाश राय	1
सस्त्रा यूनिवर्सिटी	इंकलूजन कॉम्प्लेक्सेस ऑफ़ सिस्प्लैटिन एंड इट्स अनलॉग्ज़	डॉ. ए. सुविथा	1
श्री गुरु ग्रन्थ साहिब वर्ल्ड यूनिवर्सिटी , फतेहगढ़ साहिब , पंजाब	कम्प्यूटेशनल स्क्रूटिनी ऑफ़ दी मैकेनिज्म ऑफ़ अमीलोइड बी -पेप्टाइड एग्रीगेशन	डॉ. भूपेश गोयल	4
एस पी पुणे यूनिवर्सिटी	फर्स्ट -प्रिंसिपल्स इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ सेमीकंडक्टर नैनोस्तरकचर	प्रोफ. अंजलि क्षीरसागर	2
	वाटर क्लस्टर एंड मॉलिक्यूल इंटरेक्शन्स इन इलेक्ट्रिक फील्ड	प्रोफ. राजीव पाठक	2

	प्रोबिंग नॉनकॉवलेन्ट इंटरेक्शन्स यूसिंग डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी	प्रोफ. श्रीधर पी गेज्जी	3
	प्रोबिंग नॉनकॉवलेन्ट इंटरेक्शन्स इन आयनिक लिक्विड्स यूसिंग डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी	प्रोफ. श्रीधर पी गेज्जी	3
	अब इनिटीओ इंवेस्टिगेशन्स ऑन नैनो -बॉयोमैटेरिअल्स एंड टर्नरी अलॉयज	डॉ. वैशाली शाह	5
	इफ़ेक्ट ऑफ़ सब्स्टिटूशनल डोपिंग ऑन इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर ऑफ़ II-VI सेमीकंडक्टर क्वांटम डॉट्स	प्रोफ. अंजलि क्षीरसागर	2
	फ्रैक्शनल ऑर्डर्ड डायनैमिकल सिस्टम्स	प्रोफ. वर्षा गेज्जी	2
सेंट. ज़ेवियर'स कॉलेज , अहमदाबाद	क्वांटम ट्रांसपोर्ट इन एलेमेंटल डोप्ड बोरोन नाइट्राइड मोनोलेयर	डॉ. संजीव कुमार गुप्ता	1
दी इंस्टिट्यूट ऑफ़ साइंस , मुम्बई	मैटेरियल्स फॉर हाइड्रोजन स्टोरेज	प्रोफ. अजय चौधरी	2
टी एच एस टी आई , डी डी आर सी, गुडगाँव	फंक्शनल कैरेक्टराइजेशन ऑफ़ फिंगर लूप विथ /विथआउट इनहिबिटर्स इन HCV RNA-डिपेंडेंट RNA पॉलीमर्स	डॉ. शैलेन्द्र अस्थाना	4
यूनिवर्सिटी ऑफ़ हैदराबाद	कार्बोडिऑनइड कैप्चर एंड स्टोरेज : एक्सचेंज विथ मीथेन इन क्लाथ्रेटस	डॉ. मंजू शर्मा	1

वी एन आई टी नागपुर	क़्वांटम इनफार्मेशन स्टडीज ऑफ़ कंडेंस्ड मैटर मेनी -बॉडी सिस्टम्स	डॉ. एम् .एस. रामकार्तिक	2
	अंडरस्टैंडिंग एंड इम्पलिमेंटिंग न्यूमेरिकल आस्पेक्ट ऑफ़ फ्लूइड फ्लो एंड हीट ट्रांसफर इन दी कॉन्टेक्स्ट ऑफ़ CFD फॉर वेरियस ऍप्लिकेशन्स	डॉ. तृषार बी. गोहिल	5
	फर्स्ट प्रिंसिपल स्टडी ऑफ़ सम टोपोलोजिकल मैटेरियल्स	डॉ. पूर्वा सिंह	2

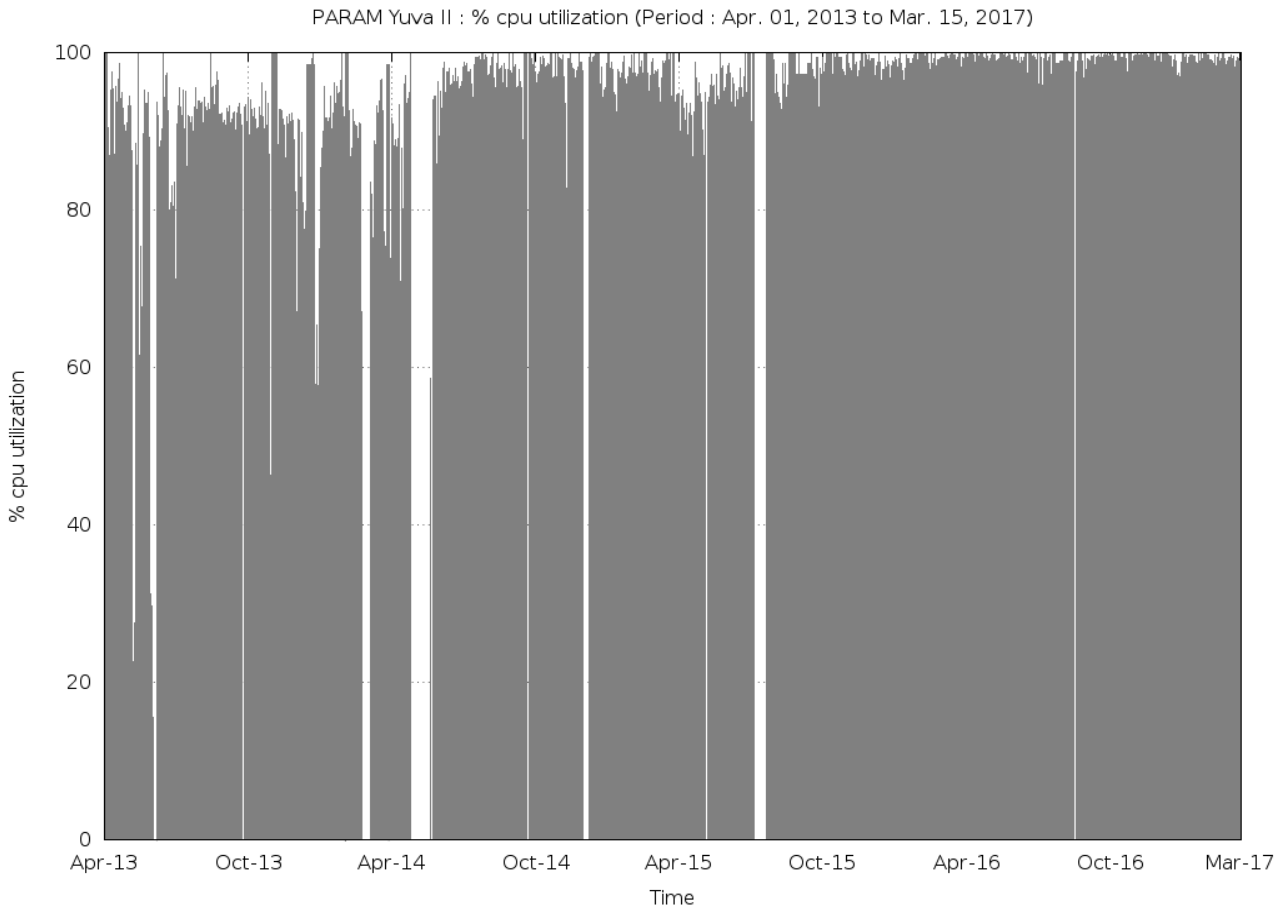
परिशिष्ट बी

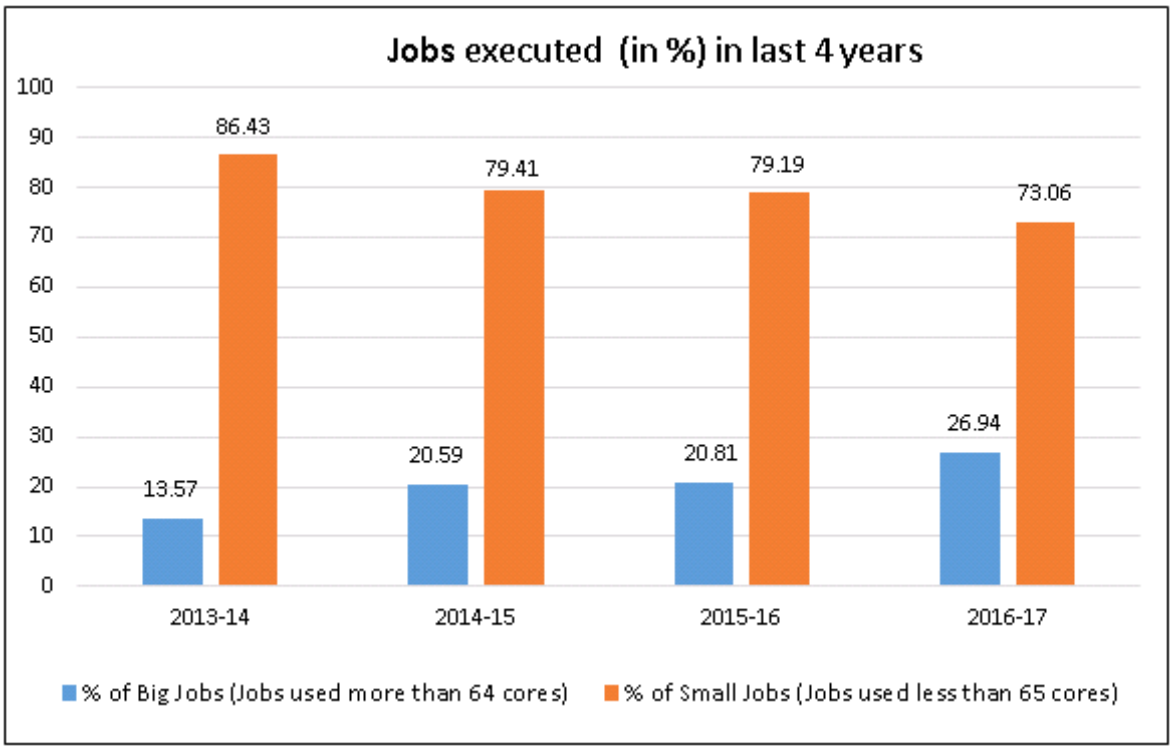
वर्ष 2013-17 के परम युवा II के सांख्यिकी

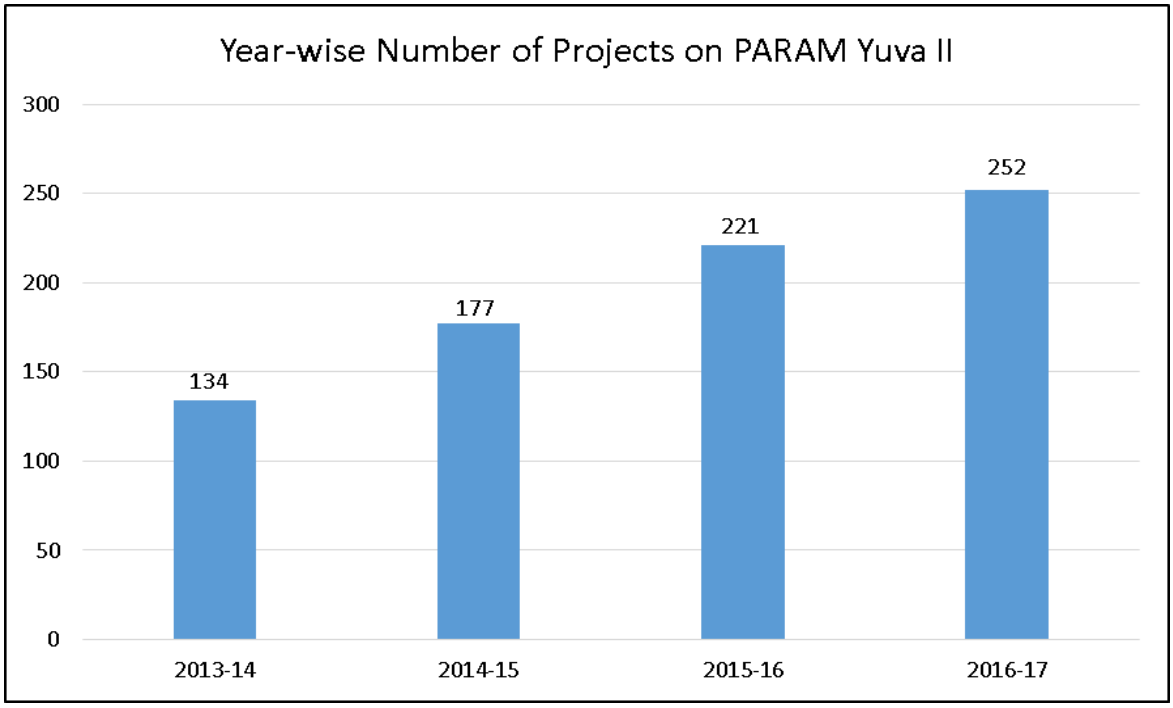
पिछले चार वर्षों (वर्ष 2013-17) के परम युवा II के कुछ सांख्यिकी नीचे दिए गए हैं।

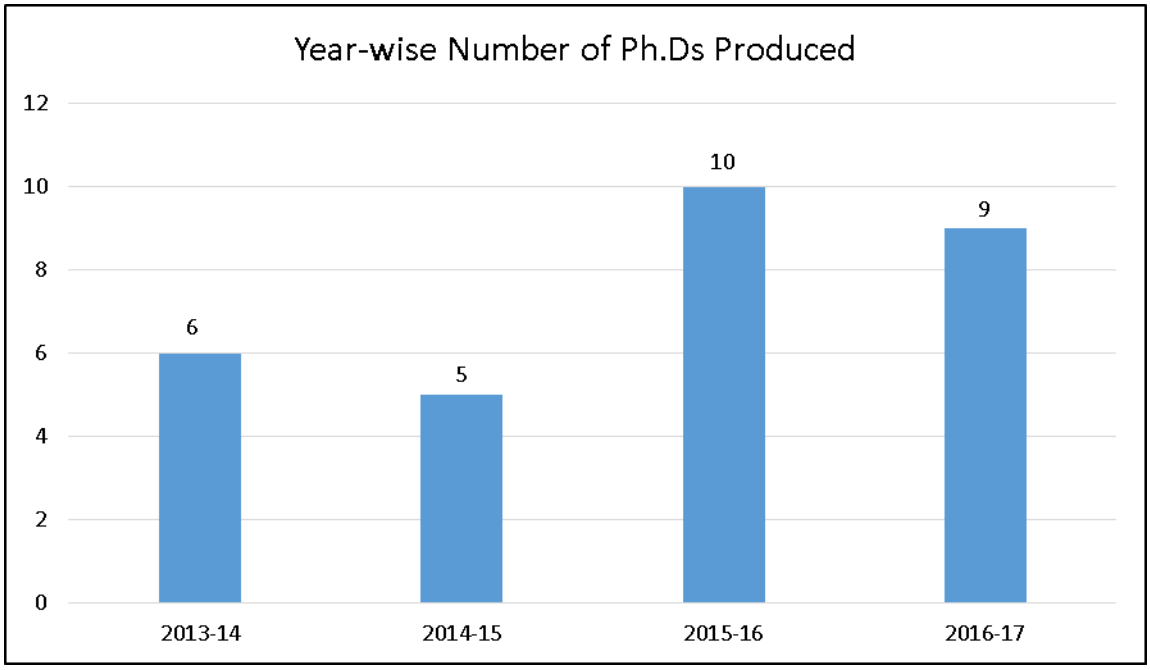
सांख्यिकी में क्लस्टर उपयोग में बदलाव, वर्षानुरूप जॉब्स प्रसंस्कृत की संख्या, परम युवा II का उपयोग करके प्रोजेक्ट की कुल संख्या, पीएचडी और प्रकाशन की संख्या शामिल है।परिशिष्ट बी

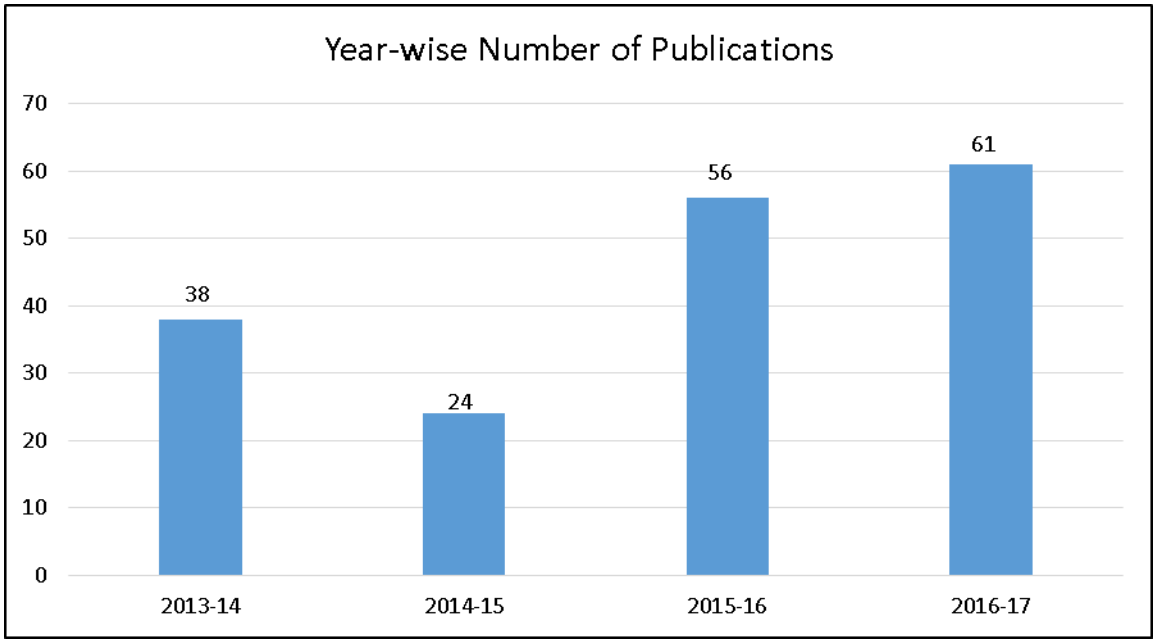
नीचे सांख्यिकी क्लस्टर के औसत उपयोग को साल के अनुसार वृद्धि में दर्शाता है।




Jobs executed (in %) in last 4 years
100
90
80
70
60
50
40
30
20
10
0
86.43
79.41
79.19
73.06
13.57
20.59
20.81
26.94
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17
% of Big Jobs (Jobs used more than 64 cores)
% of Small Jobs (Jobs used less than 65 cores)


Year-wise Number of Projects on PARAM Yuva II
300
250
200
150
100
50
0
134
177
221
252
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17


Year-wise Number of Ph.Ds Produced
12
10
8
6
4
2
0
6
5
10
9
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17


Year-wise Number of Publications
70
60
50
40
30
20
10
0
38
24
56
61
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17

परिशिष्ट सी

उपयोगकर्ताओं से प्रशंसनीय सन्देश

परम युवा II उपयोगकर्ता के कुछ प्रशंसा उद्धरण

"As my students who are accessing PARAM Yuva gave me a positive feed back on the computing resources"

डॉ. गोपालन राजारामन,
प्रो. अमिताभ भट्टाचार्य (मुख्य अन्वेषक)
आईआईटी बॉम्बे

"I thank you from the bottom of my heart for all your help, guidance and patience. It is all your team's effort that researchers like me are able to do quality research."

डॉ. सिद्धेश्वर चोपड़ा (मुख्य अन्वेषक),
एमिटी यूनिवर्सिटी, नोएडा

"Our poster won the best poster award at Indian Biophysical Society conference which included work from PARAM YUVA II- dedicated slot."

श्री. सागर खावणेकर,
डॉ. अविनाश काले (मुख्य अन्वेषक)
सीबीएस, मुम्बई

"Another good news is that one more paper has accepted. I will furnish its details in a short span of time. All credit to you all. Thank you for supporting our research."

डॉ. सिद्धेश्वर चोपड़ा (मुख्य अन्वेषक),
एमिटी यूनिवर्सिटी, नोएडा

"I am highly obliged to C-DAC, Pune for providing the supercomputing facility. I have accessed the Gaussian-09 from C-DAC from August 2015-November, 30, 2015. Based upon that recently we have published results in PCCP successfully. Now I am doing my all research work using VASP in C-DAC's PARAM Yuva-II"

डॉ. सीमा गौतम,
डॉ. अबिर डी सरकार (मुख्य अन्वेषक)
आईएनएसटी, मोहाली

”I am thankful to CDAC people for their kind help. I also appreciate their efforts and support for helping scientific community.”

श्री. डिंपल शर्मा,

डॉ. अबिर डी सरकार (मुख्य अन्वेषक)

आईएनएसटी, मोहाली

”Congratulations to NPSF team. It is all your patience and support that has let us run all these jobs. Keep up the good work.”

डॉ. सिद्धेश्वर चोपड़ा (मुख्य अन्वेषक),

एमिटी यूनिवर्सिटी, नोएडा

”Our experience of using PARAM-YUVA-II was very satisfactory during the period of MoU. We received good computational services and a very nice support from the CDAC staff. We greatly appreciate the services provided by CDAC.”

श्री. वाई. पी. राणा,

एसएसी, इसरो

”It gives us enormous pleasure in communicating to you that a research Publication based on our recent research work has been accepted for publication in The Journal of Chemical Physics, published by the American Institute of Physics. The computations involved in the research work were carried out under the research scheme granted to us by C-DAC that employed the PARAM-YUVA high performance computing facility. The support by C-DAC has been crucial, without which the research would never have been materialized. We look forward to having your continued support.”

सुश्री. नलिनी गुरव,

डॉ. राजीव पाठक (मुख्य अन्वेषक)

एस पी पुणे विश्वविद्यालय, पुणे

”I feel happy to inform you all that I have got one more paper published recently. I thank all of you for helping us day in and day out. It is all possible due to your team’s support.”

डॉ. सिद्धेश्वर चोपड़ा (मुख्य अन्वेषक),

एमिटी यूनिवर्सिटी, नोएडा

”Over the past several years, the service I received by NPSF is immense and indispensable.My research, involving micron long atomic systems, would not have been possible without PARAM facility. I am extremely grateful for this and I have this feeling that, in future,I would like to contribute to PARAM in any possible way.”

श्री. प्रसाद मतुकुमिल्ली,

डॉ. बैदूर्य भट्टाचार्य (मुख्य अन्वेषक)

आईआईटी खड़गपुर

”We have recently published an article in Scientific Reports of Nature Publications. We have acknowledged your HPC facility as without it this work would not have been possible.
I thank you again. Keep up the good work!”

डॉ. चंदन पटेल,

प्रो अमिताभ भट्टाचार्य (मुख्य अन्वेषक)

आईआईटी बॉम्बे

”Thanks for your immediate assistance in this regard. Your help in extending my home area quota for this academic year also is greatly appreciated. I also thank the entire NPSF team for providing the required computational resources for scientific research and timely support during queries.”

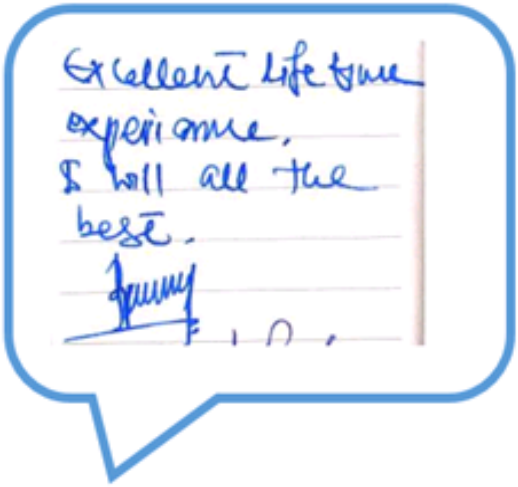
श्री. योगेश प्रसाद एम एस,

प्रो अमिताभ भट्टाचार्य (मुख्य अन्वेषक)

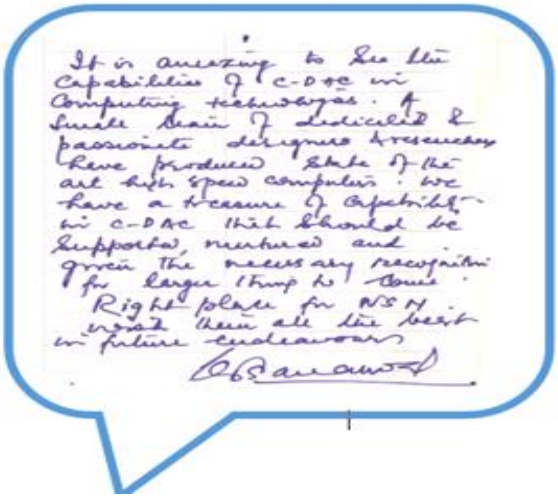
आईआईटी बॉम्बे

परिशिष्ट डी

आगंतुकों के विचार

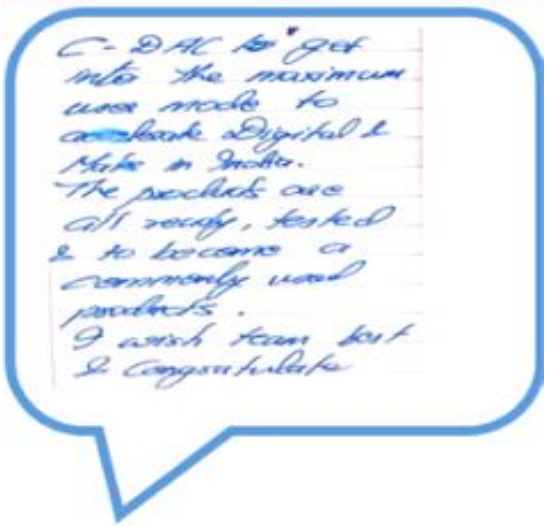


श्री. पी. पी. चौधरी, माननीय राज्य मंत्री,
कानून और न्याय मंत्रालय, (एमईआईटीवाई)



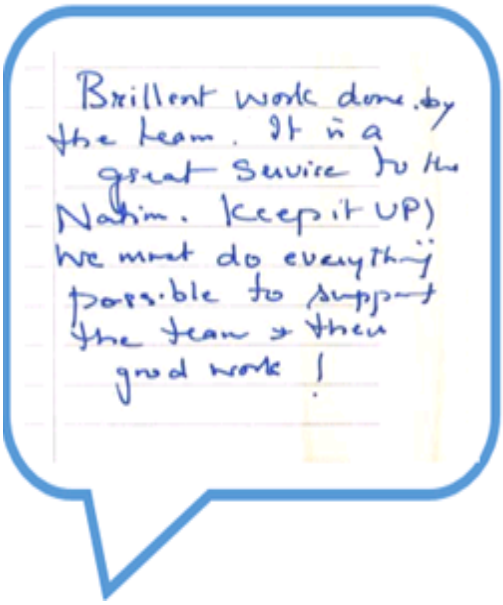
डॉ. वी. के. सारस्वत,
माननीय नीति आयोग के सदस्य

श्रीमती अरुणा सुंदरराजन, माननीय सचिव,
(एमईआईटीवाई)

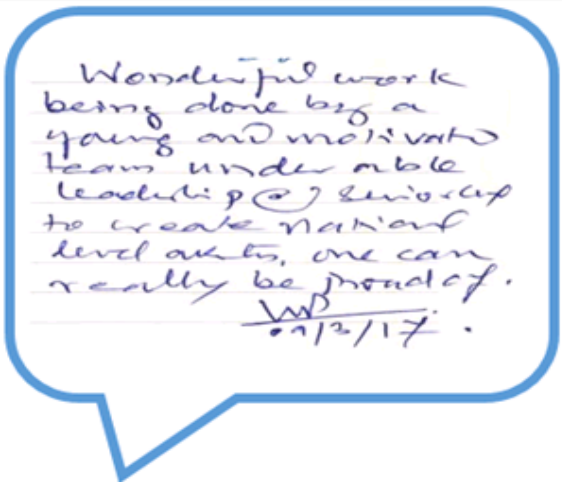


डॉ. अरुणा शर्मा, माननीय (भूतपूर्व)सचिव,
डीईआईटीवाई

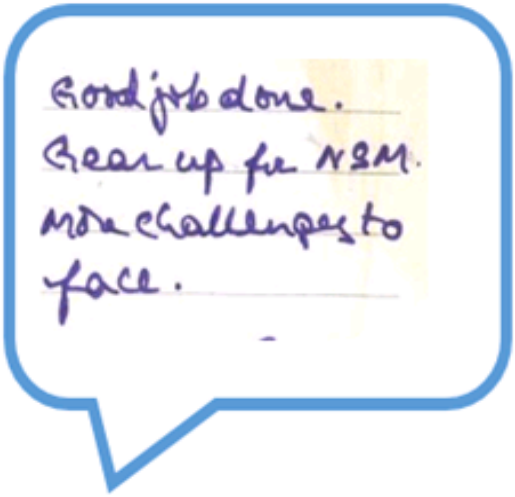
श्रीमती श्वेतिका सचान, सहायक सचिव, (एमईआईटीवाई)



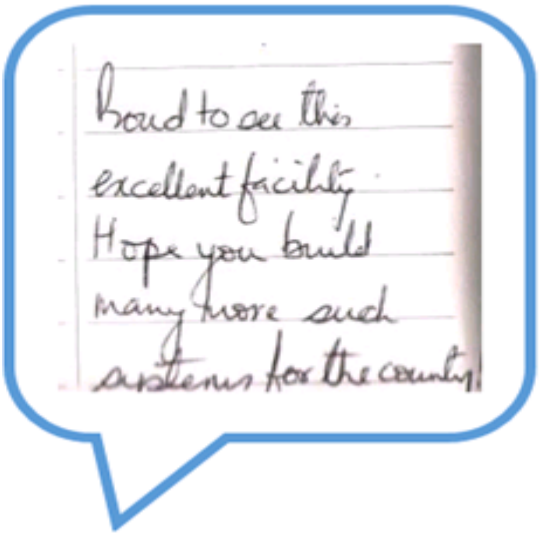
श्रीमती रेणु बुधराज, सीनियर डायरेक्टर, (एमईआईटीवाई)



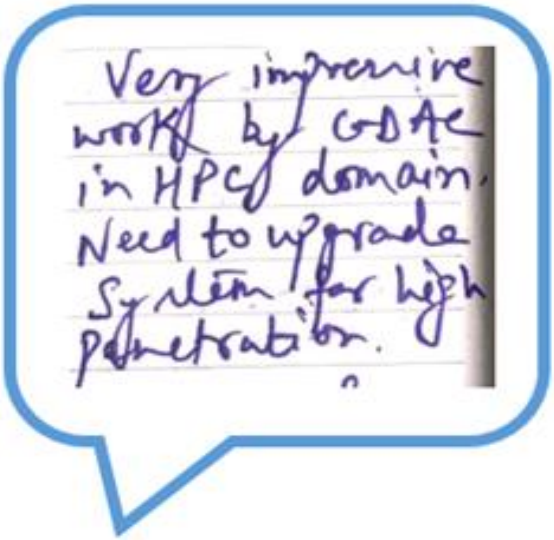
श्री. वी. वी. पर्लिकर, निदेशक, आरडीई, डीआरडीओ



श्री. एस. ए.कुमार,
वैज्ञानिक एफ, एम ई आई टी वाई,
भारत सरकार



श्री. सुजीत बनर्जी, वैज्ञानिक एफ,
डीएसटी



श्री. नवीन कुमार,
डीईआईटीवाई

परिशिष्ट ई

चित्रशाला

श्री पी पी चौधरी (बाईं ओर से छठे व्यक्ति), माननीय राज्य मंत्री, कानून और न्याय मंत्रालय, (एमईआईटीवाई) परम युवा II का दौरा करते हुए।

श्री. अनिल शिरोले(बाईं ओर से तीसरे व्यक्ति), माननीय संसद सदस्य, पुणे, परम युवा II का दौरा करते हुए।

डॉ. वी. के. सारस्वत, माननीय नीति आयोग के सदस्य

श्रीमती अरुणा सुंदरराजन, माननीय सचिव, (एमईआईटीवाई)

डॉ. अरुणा शर्मा (बाईं ओर से तीसरे व्यक्ति), माननीय (भूतपूर्व) सचिव, डीईआईटीवाई परम युवा II का दौरा करते हुए।

श्रीमती श्रद्धा जानी, सी-डैक, पुणे, राष्ट्रीय विज्ञान दिवस के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए।

श्री आकाश डुम्बरे, सी-डैक, पुणे राष्ट्रीय विज्ञान दिवस के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए।

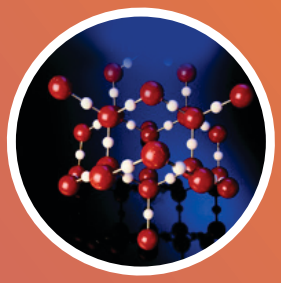
श्री. पंकज डोर्लीकर, सी-डैक, पुणे, राष्ट्रीय विज्ञान दिवस के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए।

कु. निशा अग्रवाल,सी-डैक, पुणे राष्ट्रीय विज्ञान दिवस के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए।

राष्ट्रीय विज्ञान दिवस, सी-डैक, पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के स्वयंसेवक।

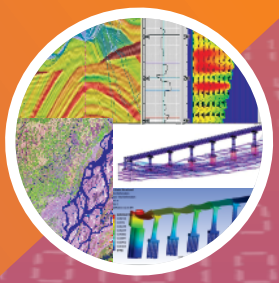
एनपीएसएफ़ संचालन टीम, सी-डैक, पुणे

Space Applications



Basic Sciences

Data Sciences



Engineering Applications

Defence & Atomic Energy Applications

Earth Sciences

सी डैक
CDAC
www.cdac.in

प्रगत संगणन विकास केंद्र
CENTRE FOR DEVELOPMENT OF ADVANCED COMPUTING
पुणे विश्वविद्यालय परिसर, गणेशखिंड, पुणे - 411 007, भारत
Pune University Campus, Ganeshkhind, Pune 411 007, India.
फ़ोन / Tel: +91-20- 2570 4100, फैक्स / email: npsfhelp@cdac.in