

अभिषद् की अनुशंसा पर

This file was edited using the trial version of Nitro Pro 7
Buy now at www.nitropdf.com to remove this message

विज्ञान अधिस्नातक (अनुसंधान द्वारा)

की उपाधि

#### मोनिषा रस्तोगी

## अभियांत्रिकी अनुभाग

को

10 अक्तूबर 2016 को कमांद, मण्डी जनपद में प्रदान की गयी। शोध प्रबन्धः एब इनिशियो मॉलिक्यूलर डायनामिक्स एंड डीएफटी कैल्कुलेशन्ज ऐज़ सप्पोर्ट दूल एंड प्रीडीसेस्सर दू एक्सपरीमेंटल इन्वेस्टीगेशन्ज ऑफ न्यू एनर्जी मटेरियल्ज



The Board of Governors of the

# Indian Institute of Technology Mandi

upon the recommendation of the Senate hereby confers the degree of

Master of Science (by Research)

on

#### **MONISHA RASTOGI**

### School of Engineering

Given at Kamand, Mandi District on this 10th of October 2016

Thesis: Ab Initio Molecular Dynamics And DFT Calculations As Support Tool And Predecessor to

Experimental Investigations of New Energy Materials

अध्यक्ष, अभिशासक परिषद् Chairman, Board of Governors

निदेशक एवं अध्यक्ष, अभिषद् Director & Chairman, Senate कुलसचिव Registrar