

COMMUNICATIONS ORALES

Réunions et Ateliers à caractère National

- 2003** 1. "*Des Mécanismes Microscopiques aux Comportements Macroscopiques. Une approche associant Calculs Ab Initio et Hamiltoniens Effectifs. Exemple de composés à valence mixte.*", séminaire donné devant le LSDSMS, Montpellier, mars 2003.
- 2. "*Des Mécanismes Microscopiques aux Comportements Macroscopiques. Une approche associant Calculs Ab Initio et Hamiltoniens Effectifs. Exemple de composés à valence mixte.*", séminaire donné devant le ILL, Grenoble, avril 2003.
- 2008** 3. "*Polyoxométallates*", Journées de l'IRSAMC, Perpignan, 26 janvier 2008.
- 2009** 4. "*Propriétés magnétiques de POM*", Réunion GDR Mico, Aspet, octobre 2009.
- 5. "*Couplage magnétique entre 2 électrons induit par un champ électrique dans un ion polyoxométallate*", Réunion GDR MCM, Dourdan, décembre 2009.
- 2010** 6. "*Etude des mécanismes microscopiques des transitions de composés à effet LIESST*", Séminaire au CRISMAT, Caen, avril 2010 (invité)
- 2015** 7. « Étude théoriques des propriétés magnétiques des ions polyoxométallates », Journées TOUCAM, Toulouse, novembre 2015.
- 8. « Chimie Quantique appliquée aux Systèmes Magnétiques : les ions Polyoxométallates », Réunion GDR-MCM2, Dourdan, décembre 2015.
- 9. "Calculs ab initio de propriétés électroniques de systèmes magnétiques", Réunion commune GDR-MCM et MEETIC, Strasbourg, octobre 2017 (invité).

Conférences et Workshops Internationaux

- 2000** 1. "*Ab initio evaluation of the local effective interactions in $\alpha'NaV_2O_5$* ", **"Quantum Chemistry of the Excited States"**, Dresde (Allemagne), mai **2000**.
- 2001** 2. "*Ab initio analysis of the transfer effective integrals in the $\alpha PW_{12}O_{40}$ heteropolyoxometalate anions*", **"NATO ASI on Polyoxometalate Molecular Science"**, Ténérife (Espagne), août-septembre **2001**.
- 3. "*Ab initio analysis of the electron transfer effective integrals in the $\alpha PW_{12}O_{40}$ heteropolyoxometalate anions*", **"Mid-Term Review Meeting"** du réseau **MolNanoMag**, Dourdan (France), décembre **2001**.
- 2002** 4. "*Determination of the electronic repulsion in the $\alpha PW_{12}O_{40}$ heteropolyoxometalate anions from ab initio calculations*", réunion de travail, Tarragona (Espagne), mai **2002**.
- 5. "*Determination of the main electronic interactions in the $\alpha PW_{12}O_{40}$ heteropolyoxometalate anions from ab initio calculations*", réunion de travail du réseau **MolNanoMag**, Manchester (R.U.), décembre **2002**.
- 2003** 6. "*Electron delocalization and electrostatic repulsion at the origin of the diamagnetic properties of polyoxometalate ions reduced by an even number of electrons*", réunion de travail, Barcelone (Espagne), octobre **2003**.
- 2004**

7. "*Electron delocalization and electrostatic repulsion at the origin of the diamagnetic properties of polyoxometalate ions reduced by an even number of electrons*", **"Quantum Effects in Molecular Magnets Kick-off Meeting"**, Valence (Espagne), 28-29 mai **2004**.
8. "*The origin of the diamagnetism of 2-electron-reduced polyoxometalates : An ab initio + model Hamiltonian calculations approach*", première réunion du **COST26 "Understanding and predicting the electronic, magnetic and structural properties of polyoxometalates"**, Padova (Italie), 12-13 novembre **2004**. (invité)
- 2005 9. "*A study of the Kondo effect using localized/delocalized orbitals*", réunion **PICS**, Sitges (Espagne) janvier **2005**.
10. "*The origin of the diamagnetism of 2-electron-reduced polyoxometalates : An ab initio + model Hamiltonian calculations approach*", réunion **CECAM**, Lyon, 11-13 juillet **2005**.
11. "*An ab initio and effective Hamiltonian calculations approach of the magnetic properties of Polyoxometalates*", réunion **COSTD26 "Understanding and Prediction of Magnetic Properties in Molecules and Solids"**, Londres, 01-03 septembre **2005**.
- 2006 12. "*POMs*", réunion **PICS**, Jujols, 14-17 juin **2006**.
13. "*Mixed-valence polyoxometalates : Spin coupling and electron distribution in the decawolframate anion reduced by two electrons*", réunion du **COST26 "Understanding and predicting the electronic, magnetic and structural properties of polyoxometalates"**, Strasbourg 29-30 septembre **2006**.
- 2009 14. "*Magnetic Properties of POM*", **Jujols-4**, Zeegse (Pays-Bas), mai **2009**.
15. "*Origin of the Magnetic Properties of 2-electron POM*", **Polyoxometalate Symposium**, Bremen (Allemagne), juillet **2009**.
- 2010 16. "*Magnetic Properties of POM*", **Jujols-5**, Horta de Sant Joan (Espagne), novembre **2010**.
- 2012 17. "*Magnetic coupling in open-shell polycyclic hydrocarbons*", **Jujols-6**, Séville (Espagne), janvier **2012**.
18. "*Theoretical Study of Magnetic Properties of Reduced Polyoxometalates*", **ICCC40**, Valencia (Espagne), septembre **2012**.
19. "*POM*", *Frontiers in Metal Oxide Cluster Science 2012*, **FMOCS**, Lanzarote (Espagne), novembre **2012** (invité).
- 2013 20. "*Magnetic Properties of POM*", **1st European Conference on Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience (PoCheMon)**, Ténérife (Espagne), mai **2013**.
21. "*Origin of the Magnetic Properties of POM*", **WorkShop IDEMAT**, Centre Franco-Sibérien de Formation et de Recherche, Rennes (France), juin **2013**.
- 2014 22. "*Spectroscopy of magnetic systems : questions raised by a CASPT2 user*", **Workshop Excited states from small molecules to more complex systems**, Marne-la-Vallée (France), avril 2014.
23. "*Quantum Chemistry Evaluation of the Microscopic Parameters at the Origin of the Magnetic Properties of Reduced POMs*", **IVth International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC)**, Novossibirsk (Russie), septembre **2014** (invité).
- 2015 24. "*Effective and Model Hamiltonians*", (tutorial), **JUJOLS VIII**, Bages (France), Juin 2015.
25. "WFT and effective Model Hamiltonians applied to magnetic POM", **PoCheMon meeting**, Paris, Octobre 2015 (France), novembre 2015 (invité).
- 2017

26. “Magnetic Polyoxometalates: Microscopic Origin and Predictions”, **Symposium Blaise Pascal International Chair, Eugenio Coronado**, Orsay (France), Février 2017 (invité).
27. “Magnetic anisotropy in 3d metal complexes”, **Jujols IX**, Tortosa (Espagne), Mai 2017 (invité).

Communications orales (connues) faites par Vijay Gopal Chilkuri sur son travail de thèse

1. ESPA2012, Barcelone (Espagne) (2012)
2. EUCO-CC9, Sopron (Hongrie) (2013)
3. SIMPS2013, Ax-les-Thermes (France), (2013)
4. ESPA2014, Badajoz (Espagne) (2014).