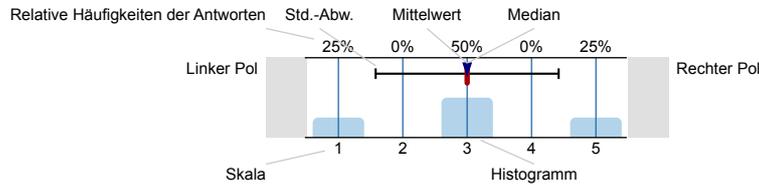


Dr. Thomas Engel
 CIC-Mitgliederumfrage ()
 Erfasste Fragebögen = 87



Legende

Frage**text**



n=Anzahl
 mw=Mittelwert
 md=Median
 s=Std.-Abw.
 E.=Enthaltung

Liebes CIC-Mitglied,

vielen Dank im voraus, dass Sie sich die Zeit für die Beantwortung der folgenden Fragen nehmen. Durch Ihr Feedback möchten wir in Bezug auf die Fachgruppe, Ihre Interessen, Bedürfnisse und Wünsche an den Vorstand in Erfahrung bringen. Weiterhin soll die Umfrage dazu dienen die jährliche CIC-Tagung (German Conference on Chemoinformatics - GCC) zu optimieren und dahingehend anzupassen, dass möglichst viele Mitglieder daran Interesse finden und teilnehmen.

Personenangaben

Bitte geben Sie Ihre Zugehörigkeit an:

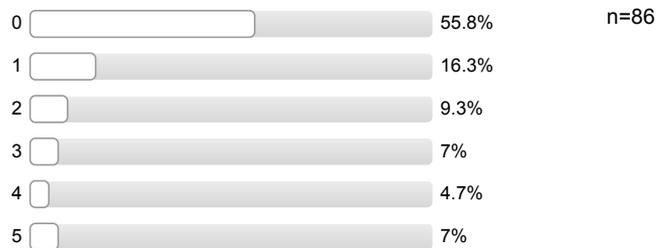


Bitte geben Sie Ihr Geschlecht an:



Fragen zur CIC-Tagung (GCC)

Wie häufig haben Sie in den vergangenen 5 Jahren an der CIC-Tagung teilgenommen?

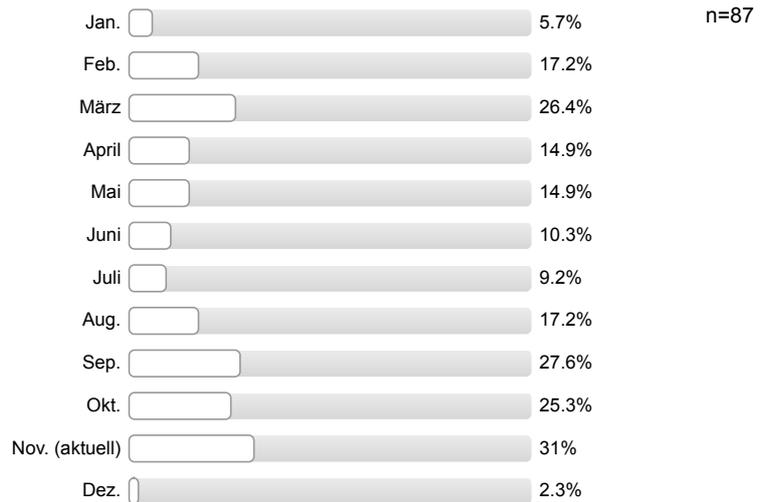


Falls Sie keine regelmäßige Teilnehmerin oder Teilnehmer sind, würden Sie bitte hierzu Ihre Gründe angeben?



Weitere Gründe:

- 2012 keine Zeit wegen Verfassen der Dissertation, davor regelmäßig (2010 + 2011), sobald erstmalig von Tagung erfahren
- Andere Tagungen mit höherer Priorität
- Bezug von Hartz IV
- Bisher nicht Mitglied
- CIC ist nicht mehr mein Tätigkeitsgebiet.
- Darf nur eine Konferenz pro Jahr besuchen, waere gerne gekommen, auch wenn's relativ weit weg von Basel war.
- Es gibt zu viele Tagungen. Man kann nicht jedes Jahr auf jede gehen
- Fachlich nicht ganz interessant
- Forschungsschwerpunkt
- Geld
- Habe mich beruflich weit von chemischen Themen entfernt.
- Hat nicht in meine Agenda gepasst, andere Tagungen hatten Vorrang, etc.
- Hotel für Doktoranden zu teuer. Kosten müssen selbst getragen werden.
- Ich bin forschungsmässig nicht auf dem Gebieten der CIC tätig. Meine Mitgliedschaft ist mehr der Ausdruck meines akademischen Interesses als die Konsequenz eigener Forschungstätigkeit.
- Nach drei Jahren kontinuierlichen Besuchs ist der Eindruck entstanden, dass der Abstand zwischen den Tagungen etwas länger sein dürfte. Habe deshalb ein Jahr ausgesetzt.
- Neumitglied
- Terminüberlapp etc.
- Thematik nicht treffend
- Thematisch meist ausserhalb meiner beruflichen Tätigkeit als wissenschaftlicher Bibliothekar und Fachreferent für Verfahrenstechnik an einer Uni-Bibliothek.
- Themen für mich oft randständig, Datum oft am Beginn des Semesters
- Themenschwerpunkte
- Themenschwerpunkte entsprachen zu wenig meinen Interessen
- Unpassende Themen, großes Durcheinander von Cheminformatik, Modeling und anderen Anwendungen von Computern in der Chemie
- Zeitmangel wg. Kinderbetreuung
- Zu großer Anteil an Beiträgen, die nicht mein Arbeitsgebiet betreffen.
- Zu wenig Zeit durch Berufstätigkeit. An meiner Stelle haben insbesondere jüngere Mitglieder meiner Gruppe teilgenommen.
- beruflich stark eingespannt
- fehlender Kontakt zu pot. Kunden
Kosten/Nutzen
- für mein augenblickliches Aufgabengebiet ist die CIC-Tagung nicht mehr so wesentlich
- gesunkenes persönliches Interesse, wenige wissenschaftliche Durchbrüche/gewinnbringende Diskussionen
- kein direkter Bezug zu meinem aktuellen Arbeitsschwerpunkt
- meine Tätigkeitsfelder haben sich verändert
- thematisch nicht wichtig genug.
- unpassende thematische Ausrichtung
- wenig Zeit, wenig Geld

Welche Tagungsmonate würden Sie bevorzugen?**Welches Zeitfenster für die Tagung würden Sie bevorzugen?****Sollte die Dauer der Tagung verlängert werden?****Sollte die GCC-Tagung mit anderen Tagungen auf dem Gebiet zusammengelegt werden?**

(Wenn ja, nennen Sie bitte Ihre Vorschläge im Freitext darunter)



■ Bioinformatik

■ Chemiedozententagung oder Tagung der Liebigvereinigung; alternativ im Rahmen der SEC-Tagung (auch Senioren sollten an die neueren Entwicklungen der Chemieinformatik herangeführt werden)

■ Es wäre aus meiner Sicht sinnvoll, über eine Kombination mit der Noordwijkerhout-Konferenz nachzudenken. Ggf. könnte dann auch zwei Parallelsessions eingeführt werden, so daß die Dauer der Noordwijkerhout-Konferenz nicht verlängert werden müsste.

Es sprechen jedoch auch gute Gründe gegen eine Zusammenlegung, z.B. die relativ günstigen Konditionen der CIC-Tagung. Eine eingehende Diskussion ist sicher angebracht.

Wird die CIC-Tagung als eigenständige Veranstaltung weitergeführt, sollte sie aus meiner Sicht zweijährig stattfinden, dafür jedoch länger dauern und auch einen Platz für einen "social event" bieten, was die Gelegenheit zur Interaktion stark erhöht.

■ GCB

■ Hamburg

■ ICCS

■ Nur falls es inhaltlich Sinn macht und Synergien hätte!

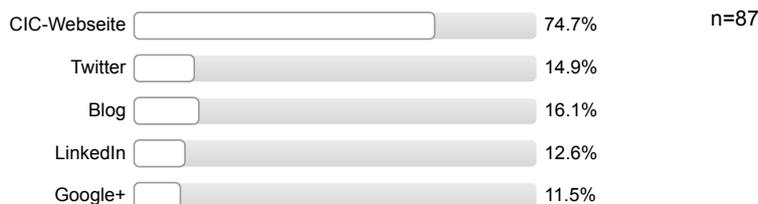
■ Symposium für Theoretische Chemie etc.

■ Thematisch passe ich eher zu "Symposium der Theoretischen Chemie". Ein Zusammenlegung waere vielleicht fuer alle interessant.

- Warum nicht, wenn es eine passende Gelegenheit gibt. Ob es allerdings sinnvoll ist, sie gänzlich mit einer anderen Tagung zusammenzulegen, kommt sicher sehr auf den Einzelfall an.
- Wissenschaftsforum Chemie
- evtl. sollte alle 3-4 Jahre eine Joint-Tagung mit der FG MedChem erfolgen
- materialwissenschaftliche Tagungen zur verbesserten Verbindung zwischen theoretischen Modellen und experimentell-analytischen Ergebnissen

Fragen zur Fachgruppe

Welche sozialen Medien der Fachgruppe kennen Sie?



Welche (fachlichen) Projekte könnte/sollte die Fachgruppe angehen?

- Ausweitung auf Pharmazie- und Medizininformatik
- Erhöhung des Kenntnisstandes von Chemie-Professoren, Chemie-Studierenden und Chemie-Lehrern an Gymnasien und weiteren Sek-II-Schulen über das breite Gebiet von OpenSource-Chemie-Software. Dies verbunden mit spezifischen Empfehlungen für die jeweilige Benutzergruppen.
- Es ist eine gute Idee, das Medium Internet endlich mal wieder arttypisch für eine offene Diskussion zur Weiterentwicklung des Fachgebietes und der CIC zu nutzen. Eine Beschränkung auf die CIC-Tagungen grenzt den Teilnehmerkreis auf das Hochschulwesen, staatliche Institutionen und Institute sowie Großunternehmen ein. Mittelstand, Kleinunternehmen und Privatleute sind dadurch oftmals nicht einbezogen.
Schön wäre wie in den Anfangstagen der CIC mit dem E-Mail-Diskussionsforum die Möglichkeit, nicht nur Mitteilungen der Fachgruppe zu erhalten oder Mitteilungen an die Fachgruppe zu schicken, sondern auch mit der Gesamtheit der Fachkollegen eine offene Diskussion zu führen, ohne sich persönlich zu kennen oder sich persönlich, z. B. auf den CIC- oder GdCh-Veranstaltungen, zu begegnen.
- Informationskompetenz von Studenten stärken
- Klassifizierungsmethoden in der Chemie oder spezieller Bereiche
- Man sollte prüfen, ob die jährliche Tagung evtl. unter ein übergreifendes Thema gestellt werden könnte, um die Beiträge und Diskussionen zu fokussieren und zu intensivieren. Generell wäre es gut, Wege zur Intensivierung der Diskussionen zu finden.
- Zusammenarbeit mit der IUPAC und den Zeitschriftenverlagen zum Erstellen einer Qualitätskontrolle für Publikationen aus dem computerchemischen Umfeld:
 - Standardisierung bestimmter Analysen und Verfahren
 - Angaben zu den verwendeten Methoden so, dass die Arbeiten in Gänze nachvollziehbar sind
 - Hinterlegen bestimmter Daten in Online-Archiven oder als elektronisches Supplement (z.B. pdb-Dateien repräsentativer Strukturen, Analyseeskripte usw.)
- aktuelle Entwicklungen
- screening library design, clustering algorithms, scoring functions

Welche Themen sollte die Fachgruppe angehen?

- 1.) wie in den Anfangszeiten der Computerchemie, als es Chemoinformatik und Bioinformatik noch nicht gab, wieder stärkere Trennung zwischen den Teilgebieten Computerchemie, Computational Chemistry (Quantenchemie), Modelling, Chemoinformatik, Pharmazeutischer Chemie (mit z. B. Drug Design), Bioinformatik, Umweltchemie und Computer in der Lehre sowie stärkere Trennung zwischen Grundlagen und Anwendungen, um
 - auch die Nicht-Mainstream-Teilgebiete zu würdigen / nicht zu kurz kommen zu lassen / in den Blickpunkt des Interesses zu rücken / zu stärken,
 - und
 - die Computerchemie (u. a. Molekülstrukturerepräsentation, Moleküleigenschaftenrepräsentation, QSPR, Syntheseplanung, Spektreninterpretation) als Grundlage ihrer Anwendungen stärker in den Blickpunkt zu rücken, das Fachgebiet/Teilgebiet und seine theoretische Basis bewußt und systematisch weiterzuentwickeln
- 2.) einen Schwerpunkt auf die Qualitätssicherung/Verifizierung/Validierung in den computerchemischen Methoden und computerchemischer Software legen

3.) Computerchemie und Quantenchemie (Moleküleigenschaften --> Stoffeigenschaften --> Eigenschaften des Stoffgemisches, und das alles möglichst korrekt, verifiziert und validiert) nicht nur für Bioinformatik, Medizinische Chemie, Pharmazeutische Chemie oder Umweltchemie, sondern auch für klassische industrielle Fragestellungen, z. B. für

- Korrosionsinhibitoren
- Schaumregulatoren
- Schmierstoffkomponenten
- Schmierstoffe
- Tenside
- Emulgatoren
- industrielle Emulsionen (nicht nur kosmetisch, pharmazeutisch oder in der Lebensmittelchemie/-technologie)
- sonstige industrielle Vielstoffgemische

4.) Auch nach Jahren noch ist die Anzahl der Datensätze in den Chemischen Faktendatenbanken begrenzt – die Daten, die man benötigt, findet man oft nicht. Vielleicht könnte man wieder versuchen, Faktendatenbank-Projekte zu zentralisieren – daß nicht weltweit jedes Land/jedes Unternehmen/jede Arbeitsgruppe nur an seinem Projekt arbeitet, sondern alle (oder viele) an einem gemeinsamen Datenbanken-Projekt. Das würde Kosten bei der Erstellung der Daten sparen und den Anwendern leichteren Zugriff bieten.

Vielleicht könnte man auch Chemische Datenbanken als (internationale?) Open-Innovation- und Open-Source-Projekte realisieren.

- Aus meiner persönlichen Sicht vermehrtes Einbeziehen von nicht Fachleuten, denen die CIC Aktivitäten von Nutzen sind.
- Ausbildung in Comp. Chem.
Comp. Chem. im Schulunterricht
- Außendarstellung: Was kann Computerchemie - was kann sie nicht?
- Bereits heute sind die Themen breit gestreut und decken die wichtigen Bereiche des Computereinsatzes in der Chemie ab. Wichtige Themen für die nähere Zukunft sind sicher der Umgang mit der Proteinflexibilität, Solvateinfluss und Free Energy.
- Computeranwendungen in der Chemie.
- Drug Target Identification/Genomics
Metabolism/Metabolic Modelling
- Festkörper-Modelling
- Krankheit und Medikament: eine übergreifende Datenbank
- Markushdatenbanken
- Mehr fachliche Breite, damit alle ein Teil verstehen und von einem Teil etwas neues lernen.
- Standardisierung von Strukturen, Darstellung von Festkörperstrukturen, Standardisierung von Modifikationsbezeichnungen
- Umgang mit Informationen
- eine Art WikiChemica
- screening library design, clustering algorithms, scoring functions
- stärkerer Bezug zu klass. Themengebieten der Chemie (Synthese, Katalyse)
Wissensmanagement

Welche weiteren/neuen Themen sollten auf der Tagung eingebracht werden?

- -aktuelles aus Nachbardisziplinen zB Bioinformatik
-Expertensysteme
- Chemieinformatik in der Öffentlichkeit
- Chemogenomics
- Computeranwendungen, die z.B. für die Chemiewirtschaft interessant sind (auch mit betriebswirtschaftlichen Aspekten).
Anwendungen für die Materialwissenschaften (Kunststoffe).
Anwendungen für unbemannte Raummissionen.
- Einsatz von Tools wie SAP HANA, z.B. im Pattern Search oder DNA Vergleich
- Quantenchemie
- Web-basierte Programmtechniken
- mir fehlt ein Themenkreis, der in früheren Jahren Bestandteil der CIC-Tagungen war (z.B. Tübingen, Hochfilzen): Simulation von Reaktions-Diffusionsvorgängen (z.B. in der Elektrochemie häufig benutzt), in den letzten Jahren aber kaum noch in den Ankündigungen aufgetaucht ist.

- screening library design, clustering algorithms, scoring functions
- semantic web, chemical ontology, Chemie Information

Weitere Anregungen und Wünsche an den CIC-Vorstand:

- Bessere Auswahl der Keynote Speaker (vorher überlegen, ob der Speaker überhaupt gute Übersichtsvorträge halten kann, und die Erwartungshaltung an den Vortrag mit dem Speaker absprechen) Wenn, wie im Falle der Paderborner Festkörperphysikerin, da ein absoluter Spezialistenvortrag über ein Nieschenthema herauskommt, dann ist das verlorene Zeit für alle.
 - Bin Erstjahrmittglied/Erin....
 - Ein passender Tagungsort und ein Zeitpunkt, zu dem auch Leute von der Universität ein paar Tage erübrigen können, machen eine Tagung attraktiv. Leute mit interessanten Themen kommen dann von selbst und der CIC-Vorstand kann sich darauf beschränken, die GCC-Tagung zu organisieren, anstatt von sich aus neue Themen einbringen zu wollen.
 - Ich bin in einer pharmazeutischen Firma tätig und für Informationsbeschaffung, -strukturierung u.ä. zuständig. Auf der CIC Tagung sind aus meiner Sicht die Schwerpunkte sehr auf theoretische Chemie und Modelling gesetzt, was der Grund dafür ist, daß ich nicht (oder nur sehr selten) teilnehme.
 - Umfrage ziemlich belanglos
- Wo sind die intensiven Diskussionen von Gemen und Hochfilzen nur geblieben ? Offensichtlich der 'Schatten' einer One-Man-Show der letzten Dekade - aus dieser Umklammerung sollte sich die FG 'CIC' schön langsam lösen.
- Zusammenarbeit mit anderen Organisationen ähnlicher Art (in Deutschland), z.B. MGMS-DS (Hinweis auf Tagungen etc.)

Vielen Dank für Ihr Feedback!