



**Mitgliederversammlung
Fachgruppe
Chemie – Information – Computer
(CIC)**

Montag, 06.11.17, 17.00 Uhr
im Rahmen der GCC 2017

Atrium Hotel Mainz
Raum E1 + E2
Flugplatzstraße 44
55126 Mainz

TAGESORDNUNG

1. Genehmigung der Tagesordnung
2. Bericht des Fachgruppen-Vorstands 2016 / 2017
3. Beschluss über die Namensänderung / Änderung der Geschäftsordnung der Fachgruppe (*siehe Anlagen 1 + 2*)
4. Verschiedenes

Prof. Dr. Stefan M. Kast
- Vorsitzender -



**Fachgruppe
Chemie – Information – Computer
(CIC)**

An die Mitglieder der GDCh-Fachgruppe
Chemie – Information – Computer (CIC)

Der Vorsitzende

Prof. Dr. Stefan M. Kast
Technische Universität Dortmund
Fakultät für Chemie und Chem. Biologie
Otto-Hahn-Str. 4a
44227 Dortmund

Tel.: +49 231 755-3906
Fax: +49 231 755-3748
E-Mail: stefan.kast@tu-dortmund.de

Dortmund, 28.09.2017

CIC: Namensänderung / Änderung der Geschäftsordnung

Sehr geehrte Damen und Herren,

im Jahr 2015 hatten die Mitglieder der Fachgruppe „Chemie – Information – Computer“ der zur Mitgliederversammlung vorgelegten Namensänderung zu „Computer in der Chemie“, die auch mit einer Änderung bzw. Aktualisierung der zu bearbeitenden Aufgaben verbunden war, mit der erforderlichen Mehrheit zugestimmt. Diese Änderungen sind nicht wirksam geworden, da der GDCh-Vorstand diese in seiner Sitzung am 15.12.2015 nicht befürwortet hatte. Stattdessen bat er den CIC-Vorstand, die unter „§2 Aufgabe“ angegebene Formulierung „die Quantenchemie, Simulationsrechnung, Molekülmechanik und Reaktionsdynamik“ mit der AG Theoretische Chemie (AGTC) abzugleichen, um eine Überschneidung der bearbeiteten Themenfelder / Aufgabengebiete beider Strukturen zu vermeiden.

Zu diesem Zweck fanden intensive Gespräche auf Ebene der Vorstandsvorsitzenden von AGTC und CIC statt, als deren Resultat verschiedene Formulierungsvarianten den beiden Vorständen vorgestellt wurden. Die neue Fassung von §2 wurde im Vorstand der Fachgruppe CIC abgestimmt und abschließend durch den Vorstand der AGTC bestätigt. Im Ergebnis werden die folgenden zwei Unterpunkte in §2,

- die pharmazeutische Chemoinformatik und Molecular Modelling (Docking Methoden, QSAR, virtuelles Screening, in-silico ADMETox),
- die Quantenchemie, Simulationsrechnung, Molekülmechanik und Reaktionsdynamik,

ersetzt durch die neue Formulierung

- die Chemieinformatik einschließlich z.B. Docking-Methoden, QSAR, virtuellem Screening, in-silico ADMETox,
- die molekulare Modellierung von chemischen, biologischen und Materialsystemen.

Der CIC-Vorstand hat die diesbezüglich überarbeitete Geschäftsordnung wie vorliegend dem GDCh-Vorstand mit der Bitte um einen Vorratsbeschluss nochmals vorgelegt. Der GDCh-Vorstand hat die Änderungen am 12.09.2017 befürwortet. Wir möchten Sie nun bitten, diese Änderungen in der CIC-Mitgliederversammlung am 06.11.2017 in Mainz (siehe TOP 3) ebenso positiv zu entscheiden. .

Mit freundlichen Grüßen, für den CIC-Vorstand, der Vorsitzende

Prof. Dr. Stefan M. Kast



Geschäftsordnung
der Fachgruppe
"Computer in der Chemie (CIC)"
in der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Präambel

Für die nach § 17 der Satzung der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Fassung vom 07.11.2014, als Struktur der Gesellschaft vorgesehenen, juristisch nicht selbständigen Fachgruppen und Sektionen sowie ihre Mitglieder ist die Satzung der Gesellschaft bindend.

Zur Erleichterung ihrer Arbeit hat sich die Fachgruppe "Computer in der Chemie (CIC)" eine zusätzliche Geschäftsordnung gegeben, die zuletzt durch Beschluss der Mitgliederversammlung der Fachgruppe vom 06.11.2017 nach Vorgenehmigung durch den Vorstand der Gesellschaft Deutscher Chemiker am 12.09.2017 angenommen und geändert wurde. Aus Gründen der besseren Lesbarkeit wird in dieser Geschäftsordnung nur die männliche Sprachform verwendet. Alle Aussagen gelten uneingeschränkt auch für die weibliche Form.

Die erste Geschäftsordnung ist am 22. März 1982 und nach vorheriger Genehmigung durch den Vorstand der Gesellschaft Deutscher Chemiker am 14. September 1981 angenommen, im November 1990 durch schriftliche Abstimmung geändert, sowie im November 1994 an die Bestimmungen der neuen GDCh-Satzung angepasst worden.

§ 1 Name, Sitz und Geschäftsjahr

Die Fachgruppe führt den Namen "Computer in der Chemie (CIC)" und ist eine Unterstruktur der Gesellschaft Deutscher Chemiker. Die englische Bezeichnung der Fachgruppe lautet „Computers in Chemistry (CIC)". Die Fachgruppe hat ihren Sitz bei der GDCh-Geschäftsstelle.

Geschäftsjahr ist das Kalenderjahr.

§ 2 Aufgabe

"Computer in der Chemie (CIC)" umfasst alle Aspekte der computerbasierten Gewinnung, Verarbeitung und Dokumentation von Information und Wissen in der Chemie. Die Fachgruppe CIC sieht ihre Hauptaufgabe in der Zusammenführung aller daran interessierten Wissenschaftler zum Zwecke der Pflege und Weiterentwicklung dieses Wissensgebietes. Sie fördert den Gedanken- und Erfahrungsaustausch und die Vermittlung fachlicher Anregungen, u.a. durch die:

- Förderung der Computeranwendungen in den chemischen Wissenschaften als Unterrichtsbestandteile an den Hochschulen
- in der Regel jährlich stattfindende internationalen Fachgruppenjahrestagung
- Unterstützung von Open Access und Open-Source-Entwicklungen im Themengebiet der Fachgruppe

- Zusammenarbeit zwischen Industrie und Hochschule
- Mitwirkung in einschlägigen nationalen und internationalen Arbeitskreisen
- Pflege der Beziehung zu verwandten Institutionen im In- und Ausland.

Die Fachgruppe "Computer in der Chemie (CIC)" als Fachgruppe der GDCh betrachtet als ihre besonderen Anliegen die Diskussion über:

- aktuelle Entwicklungen im Bereich von Computeranwendungen in der Chemie
- die Chemieinformatik einschließlich z.B. Docking-Methoden, QSAR, virtuellem Screening, in-silico ADMETox
- die molekulare Modellierung von chemischen, biologischen und Materialsystemen

[gelöscht nach Absprache mit der AGTC:

- *die pharmazeutische Chemoinformatik und Molecular Modelling (Docking Methoden, QSAR, virtuelles Screening, in-silico ADMETox)*
- *die Quantenchemie, Simulationsrechnung, Molekülmechanik und Reaktionsdynamik]*
- Datenbanken für chemische Information (Fakten, Spektren, Strukturen, Reaktionen, Algorithmen)
- Methoden zur Verarbeitung von Chemieinformation und zum Wissenserwerb (Statistik, Chemometrie, Evolutionäre Algorithmen, Maschinelles Lernen)
- die Verbesserung des Managements von Chemie-Information

[Redaktionelle Änderung. Gelöscht: die Verbesserung des Informationsmanagements von Chemie-Information]

§ 3 Mitgliedschaft

Die Fachgruppe hat

- a) ordentliche Mitglieder,
- b) fördernde Mitglieder,
- c) assoziierte Mitglieder der GDCh.

[Gelöscht: studentische Mitglieder und Jungmitglieder auf Zeit]

Die Mitgliedschaft in der Fachgruppe hat die Mitgliedschaft in der GDCh selbst zur Voraussetzung. Die Fachgruppen-Mitgliedschaften definieren sich über § 6 der GDCh-Satzung.

[Gelöscht: Definitionen der Mitgliedschaften a) – c)]

§ 4 Beginn und Beendigung der Mitgliedschaft

Der Antrag auf Aufnahme in die Fachgruppe ist bei der GDCh-Geschäftsstelle zu stellen. Die vollzogene Aufnahme wird dem neuen Mitglied von der GDCh-Geschäftsstelle bestätigt. Die Mitgliedschaft beginnt mit der Zahlung des ersten Jahresbeitrages. Die

Rechte der Mitgliedschaft ruhen bei Unterlassung der Zahlung der Jahresbeiträge bis zur erfolgten Zahlung.

Die Mitgliedschaft erlischt, außer durch den Tod,

- a) durch die schriftliche Austrittserklärung, die nur zum Schluss eines Kalenderjahres erfolgen kann und der GDCh-Geschäftsstelle spätestens **drei Monate vorher** zugegangen sein muss,
- b) durch Beendigung der GDCh-Mitgliedschaft nach **§ 8** der GDCh-Satzung,
- c) durch Entscheid des Fachgruppenvorstandes.

Die Beendigung der Mitgliedschaft hebt die Verpflichtung zur Zahlung fällig gewordener Beiträge nicht auf.

§ 5 Mitgliedsbeiträge

Unabhängig vom Mitgliedsbeitrag der GDCh erhebt die Fachgruppe von den ordentlichen [Gelöscht: studentischen Mitgliedern und Jungmitgliedern auf Zeit] Mitgliedern einen Jahresbeitrag, dessen Höhe vom Fachgruppenvorstand jeweils vorgeschlagen und durch die Mitgliederversammlung bestätigt wird.

Fördernde und assoziierte Mitglieder zahlen einen Beitrag an die Gesellschaft Deutscher Chemiker, die das Konto der Fachgruppe verwaltet. Die Mindesthöhe dieses Beitrages wird von der Gesellschaft Deutscher Chemiker festgelegt. Die GDCh-Geschäftsstelle unterstützt die Arbeit der Fachgruppe durch Leistungen in angemessenem Umfang.

Der Fachgruppenjahresbeitrag ist zusammen mit dem GDCh-Mitgliedsbeitrag **nach Eingang der Beitragsrechnung spätestens bis zum 31. März** gebührenfrei an die GDCh-Geschäftsstelle zu entrichten.

§ 6 Organe der Fachgruppe

Die Angelegenheiten der Fachgruppe werden wahrgenommen durch

- a) die Mitgliederversammlung,
- b) den Vorstand.

§ 7 Mitgliederversammlung

Die Mitgliederversammlung sollte mindestens alle zwei Jahre vom Vorsitzenden der Fachgruppe oder in dessen Abwesenheit von seinem Stellvertreter, **beispielsweise in Verbindung mit der Fachgruppenjahrestagung**, einberufen werden. Die Ankündigung erfolgt spätestens vier Wochen vorher. Ferner sind vom Vorsitzenden Mitgliederversammlungen einzuberufen, wenn 50 % der Mitglieder eine solche wünschen oder wenn der Vorstand dies einstimmig verlangt. In der Einladung zur Mitgliederversammlung ist die Tagesordnung bekanntzugeben.

Jedes Mitglied ist stimmberechtigt. Alle Beschlüsse werden, wenn nicht anders bestimmt, mit einfacher Stimmenmehrheit gefasst. Bei Stimmgleichheit entscheidet der Vorsitzende.

Der Mitgliederversammlung obliegen insbesondere:

- a) die Wahl des Vorstandes, sofern diese nicht durch Briefwahl **oder vergleichbare, sichere elektronische Wahlformen** erfolgt. Sie erfolgt mit einfacher Stimmenmehrheit,
- b) Entgegennahme des Jahresberichtes,

c) Festsetzung des Mitgliedsbeitrages,

d) Beschlussfassungen über Änderungen der Geschäftsordnung und Auflösung der Fachgruppe (siehe auch § 9 und § 10).

Über die Mitgliederversammlung wird ein vom Vorsitzenden zu unterzeichnendes Protokoll angefertigt, das allen Fachgruppenmitgliedern bekanntgegeben und der Geschäftsstelle zugesandt wird.

§ 8 Vorstand

Der Vorstand besteht aus dem Vorsitzenden, seinem Stellvertreter und mindestens einem, aber nicht mehr als drei Beisitzern, dabei sollten die Hochschulen und die Industrie gleichrangig an der Zusammensetzung des Vorstandes beteiligt sein. Die Vorstandsmitglieder werden von der Mitgliederversammlung durch Briefwahl oder durch vergleichbare, sichere elektronische Wahlformen gewählt. Der Vorstand bestimmt aus seiner Mitte den Vorsitzenden und den Stellvertreter. Sämtliche Vorstandsmitglieder müssen ordentliche Mitglieder der GDCh und anerkannte Fachleute sein.

Die Amtsdauer der Vorstandsmitglieder beträgt vier Jahre. Sie beginnt mit dem 1. Januar des auf die Wahl folgenden Jahres. Wenn eine Mitgliederversammlung ausfällt sowie eine Brief- oder elektronische Wahl nicht durchgeführt werden kann, verbleiben die Vorstandsmitglieder, für die auf dieser Mitgliederversammlung oder durch diese Briefwahl Nachfolger zu wählen wären, ein weiteres Jahr in ihren Ämtern. Einmalige direkte Wiederwahl ist zulässig. Der Vorsitzende, im Verhinderungsfalle dessen Stellvertreter, vertritt die Fachgruppe nach außen. Der Vorsitzende beruft die Mitgliederversammlungen ein und leitet diese. Er sorgt für die Durchführung der durch die Mitgliederversammlung gefassten Beschlüsse. Im Verhinderungsfall übernimmt dies der stellvertretende Vorsitzende.

Die Vorstandsmitglieder sind ehrenamtlich tätig. Protokolle von Vorstandssitzungen sind der GDCh-Geschäftsstelle einzureichen.

§ 9 Auflösung der Fachgruppe

Die Auflösung der Fachgruppe kann erfolgen, wenn sie vom Vorstand empfohlen und von der zu diesem Zweck einberufenen Mitgliederversammlung mit mindestens Zweidrittel Stimmenmehrheit aller ordentlichen Fachgruppenmitglieder beschlossen wird. Ist bei der Beschlussfassung die erforderliche Mehrheit nicht erzielbar, weil die Anzahl der anwesenden ordentlichen Mitglieder nicht ausreicht, so muss die Beschlussfassung durch schriftliche Umfrage bei den ordentlichen Mitgliedern herbeigeführt werden. Die Auflösung kann ferner aufgrund des § 17 und § 21 der GDCh-Satzung erfolgen.

Im Falle der Auflösung entscheidet der GDCh-Vorstand über die Verwendung des Fachgruppenvermögens innerhalb eines der in § 2 festgesetzten Zwecke der Fachgruppe.

§ 10 Änderung der Geschäftsordnung

Die vorliegende Geschäftsordnung bedarf zu ihrer Gültigkeit der Genehmigung des GDCh-Vorstandes und der vorherigen Zustimmung der Fachgruppenmitglieder. Diese gilt als gegeben, wenn sich eine Mehrheit von Zweidritteln der in einer zu diesem Zwecke satzungsgemäß einberufenen Mitgliederversammlung erschienenen ordentlichen Fachgruppenmitglieder durch schriftliche oder elektronische Abstimmung ergibt. Jede Änderung der Geschäftsordnung ist dem Vorstand der GDCh mitzuteilen und bedarf seiner Genehmigung um wirksam zu werden.

Frankfurt am Main, April 1982, November 1989 und November 1994

Letzte geänderte Fassung:

angenommen von der Mitgliederversammlung am 06.11.2017
genehmigt vom GDCh-Vorstand am 12.09.2017.

Anmerkung:

Die ersten Änderungen aus 2015 sind grau hinterlegt.

Die nach Absprache mit der AGTC und weitere erfolgte Änderungen 2016/2017 sind grün hinterlegt. Die aktuell gültige Geschäftsordnung kann unter www.gdch.de/cic eingesehen werden.