

Next Steps in L^AT_EX: Intermediate Techniques

Substances - Chemische Datenbank

Sascha Frank

<https://www.latex-kurs.de/kurse/kurse.html>

2025

substances

Paket

```
\usepackage{substances}
```

Inhalt

Ermöglicht das

- ▶ erstellen
- ▶ einbinden und
- ▶ auslesen

einer Datenbank von chemischen Substanzen

weitere Pakete

Bindet weitere Pakete ein u.a. chemfig und ghsystem

Datenbank

Einbinden

```
\LoadSubstances{Name_der_Datenbank}
```

Default Datenbank

```
\LoadSubstances{substances-examples}
```

Eintrag

```
\DeclareSubstance{KCl}{  
  name      = Potassium|chloride ,  
  sort      = Potassiumchloride ,  
  formula    = KCl ,  
  CAS       = 7447-40-7,  
  mass       = 74.55 ,  
  mp         = 773 ,  
  bp         = 1413 ,  
  phase      = solid ,  
  density    = 1.98  
}
```

Komplettausgabe Quellcode

```
\begin{table}[!htp] \centering \ghssetup{hide}
\sisetup{scientific-notation=fixed,fixed-exponent=0,
per-mode=symbol}
\begin{tabular}{lp{.6\linewidth}}
\toprule
name & \chem{KCl} \\
formula & \chem{KCl}[formula] \\
\midrule
\textbf{CAS} & \chem{KCl}[CAS] \\
\midrule
boiling point & \chem{KCl}[bp] \\
melting point & \chem{KCl}[mp] \\
density & \chem{KCl}[density] \\
molar mass & \chem{KCl}[mass] \\
\bottomrule
\end{tabular}
\caption{Alle Eigenschaften von \chem{KCl} aus der Datenbank.}
\end{table}
```

name	Potassiumchloride
formula	KCl
CAS	7447-40-7
boiling point	1413 °C
melting point	773 °C
density	1.98 g/cm ³
molar mass	74.55 g/mol

Tabelle: Alle Eigenschaften von Potassiumchloride aus der Datenbank.

Tabellenbeispiel

name	Methane
formula	CH ₄
	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
...	
	
H statements	H220
P statements	P210, P377, P381, P410 + P403

Hinweise

Datenbank

Am besten die beiliegen Datenbank verwenden und erweitern...

Fehler beim Einbinden

Runaway argument?

```
{\AssignTemplateKeys \bool_if:nTF {\l__substances_index_alternative_name  
ETC.
```

```
! Forbidden control sequence found while scanning use of \DeclareTemplate  
<inserted text>
```

```
1.400 ... \par  
          \substances_index:nx { \c_job_name_tl  
                                -chem }
```

Lösung

[bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/
changed-deprecated-c_job_name_tl-to/diff](https://bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/changed-deprecated-c_job_name_tl-to/diff)

Hinweise forts.

Fehler beim Einbinden

```
1.669 \chemmacros_load_module:n
                                         {nomenclature}
```

Lösung

```
\documentclass{article}
%...
\ExplSyntaxOn
\cs_new:Npn \chemmacros_load_module:n #1 {}
\ExplSyntaxOff
%...
\usepackage{substances}
%...
\begin{document}
%...
```