

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
2835-98-5	-2.96	3452-07-1	-2.35	4390-04-9	-1.31
2837-89-0	-4.58	3452-97-9	-1.93	4395-92-0	-2.40
2847-30-5	-3.71	3454-29-3	-0.32	4418-26-2	-3.19
2856-63-5	-3.45	3460-44-4	-2.74	4419-11-8	-1.62
2937-54-4	-4.02	3473-63-0	-4.37	4424-03-7	-2.91
2971-36-0	-1.87	3489-28-9	-2.33	4437-22-3	-2.71
2983-36-0	-2.38	3562-84-3	-2.02	4454-05-1	-3.50
3001-15-8	-3.13	3632-91-5	-2.78	4461-52-3	-4.17
3001-61-4	-1.76	3644-11-9	-3.74	4475-95-0	-3.52
3006-86-8	-1.98	3687-13-6	-3.72	4532-64-3	-3.97
3016-19-1	-2.90	3734-48-3	-3.36	4548-27-0	-2.72
3033-23-6	-3.23	3757-76-4	-3.83	4553-62-2	-3.49
3033-77-0	-3.54	3765-57-9	-3.36	4586-22-5	-2.17
3048-64-4	-3.13	3780-50-5	-1.20	4602-84-0	-1.70
3048-65-5	-3.03	3862-73-5	-3.44	4627-22-9	-2.73
3056-93-7	-1.24	3864-99-1	-2.24	4630-07-3	-1.82
3081-01-4	-2.77	3964-52-1	-3.29	4635-87-4	-4.01
3085-35-6	-3.18	3982-91-0	-4.74	4685-14-7	-0.94
3089-17-6	-3.44	4026-20-4	-4.01	4719-04-4	-2.57
3096-70-6	-2.61	4080-98-2	-1.16	4728-82-9	-2.63
3144-54-5	-1.87	4101-68-2	-2.87	4756-19-8	-1.96
3194-55-6	-1.96	4104-14-7	-2.99	4759-48-2	-3.19
3208-40-0	-1.99	4180-23-8	-2.88	4790-71-0	-3.33
3218-49-3	-3.52	4191-73-5	-2.54	4860-03-1	-1.68
3248-91-7	-2.04	4197-25-5	-2.10	4948-29-2	-2.84
3253-39-2	-2.07	4206-61-5	-1.30	4951-48-8	-2.59
3269-90-7	-2.87	4247-02-3	-2.69	4980-54-5	-2.24
3293-47-8	-2.05	4250-77-5	-1.56	5026-62-0	-2.84
3338-24-7	-3.48	4286-23-1	-2.41	5077-67-8	-3.71
3383-96-8	-0.81	4342-61-4	-5.74	5085-00-7	-2.46
3386-33-2	-4.47	4351-10-4	-2.51	5103-71-9	-3.58
3392-97-0	-3.41	4359-54-0	-3.17	5103-74-2	-3.64
3424-82-6	-2.47	4364-06-1	-2.43	5106-98-9	-4.08
3425-61-4	-2.96	4376-20-9	-2.51	5146-66-7	-2.81

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
5153-25-3	-1.92	5903-13-9	-2.66	6623-41-2	-2.80
5153-77-5	-2.55	5959-89-7	-1.19	6638-05-7	-3.13
5188-07-8	-4.83	5986-38-9	-2.14	6645-46-1	-3.02
5208-93-5	-2.06	5989-27-5	-2.97	6652-28-4	-2.64
5232-99-5	-1.88	5989-54-8	-2.83	6665-67-4	-1.85
5259-88-1	-2.72	6020-87-7	-3.20	6665-83-4	-1.81
5281-04-9	-2.03	6028-47-3	-1.92	6665-86-7	-2.67
5289-74-7	-1.28	6070-14-0	-2.54	6674-39-1	-2.12
5317-66-8	-2.98	6104-30-9	-3.23	6789-88-4	-2.97
5320-75-2	-2.97	6106-24-7	-4.55	6790-58-5	-1.77
5331-32-8	-2.61	6126-50-7	-3.03	6807-17-6	-1.09
5331-91-9	-3.66	6144-04-3	-3.00	6812-78-8	-2.80
5394-36-5	-3.90	6165-51-1	-1.77	6838-85-3	-3.43
5402-37-9	-1.94	6196-95-8	-1.87	6851-03-2	-4.66
5406-58-6	-2.38	6196-98-1	-1.49	6876-13-7	-2.98
5421-12-5	-1.58	6197-30-4	-0.47	6893-02-3	-3.37
5421-66-9	-2.55	6222-35-1	-3.34	6911-51-9	-3.56
5423-23-4	-3.49	6283-92-7	-0.29	6915-15-7	-4.19
5443-49-2	-3.60	6294-17-3	-3.20	6938-45-0	-2.16
5444-75-7	-2.14	6314-97-2	-2.48	6939-75-9	-2.21
5452-07-3	-2.05	6358-53-8	-1.03	6940-78-9	-3.59
5466-77-3	-1.87	6359-45-1	-1.89	6948-88-5	-0.50
5500-21-0	-4.13	6362-79-4	-3.53	6949-73-1	-2.84
5522-43-0	-2.39	6368-72-5	0.54	6969-49-9	-2.55
5524-05-0	-2.76	6381-63-1	-3.12	7022-45-9	-2.71
5552-30-7	-2.22	6448-95-9	-0.74	7023-61-2	-2.91
5616-51-3	-4.09	6454-22-4	-2.25	7149-32-8	-2.81
5650-20-4	-1.96	6468-96-8	-2.07	7158-25-0	-2.34
5660-60-6	-2.93	6471-66-5	-1.94	7297-86-1	-1.06
5726-19-2	-2.95	6484-52-2	-3.41	7320-37-8	-1.32
5794-03-6	-2.82	6515-37-3	-1.55	7341-17-5	-3.36
5810-88-8	-1.76	6521-30-8	-2.03	7367-90-0	-2.13
5862-38-4	-2.84	6528-34-3	-2.90	7378-23-6	-3.02
5873-54-1	-2.67	6554-98-9	-1.88	7392-19-0	-2.93

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
7446-26-6	-3.17	10276-85-4	-2.06	13311-84-7	-2.26
7492-37-7	-2.03	10288-28-5	-3.84	13360-64-0	-3.40
7492-44-6	-2.40	10297-73-1	-3.07	13393-93-6	-0.49
7492-65-1	-2.51	10325-94-7	-4.23	13429-24-8	-4.41
7493-65-4	-2.12	10339-55-6	-1.81	13464-80-7	-4.55
7500-82-5	-2.82	10377-60-3	-4.23	13466-78-9	-2.64
7507-01-9	-0.91	10415-86-8	-2.42	13472-08-7	-2.47
7554-12-3	-2.39	10421-48-4	-4.23	13473-90-0	-3.41
7585-41-3	-2.54	10436-39-2	-4.42	13528-88-6	-5.91
7631-99-4	-3.41	10444-50-5	-2.16	13567-39-0	-1.71
7664-93-9	-4.55	10453-86-8	-0.77	13597-92-7	-2.94
7696-12-0	-1.90	10482-65-2	-2.58	13631-64-6	-3.08
7697-37-2	-3.41	10482-77-6	-1.64	13679-86-2	-2.73
7705-14-8	-2.83	10484-36-3	-3.17	13705-05-0	-4.02
7719-12-2	-4.99	10486-14-3	-1.95	13780-17-1	-3.99
7757-79-1	-3.41	10533-67-2	-3.49	13877-91-3	-2.92
7757-82-6	-4.55	10540-29-1	-2.11	13893-53-3	-3.34
7761-88-8	-3.41	10595-60-5	-2.13	13925-03-6	-3.35
7774-60-9	-2.55	10605-21-7	-2.96	13925-05-8	-3.46
7775-38-4	-2.42	12217-46-8	-1.51	13925-07-0	-3.38
7779-65-9	-2.48	12217-48-0	-3.64	13952-84-6	-3.83
7780-06-5	-2.97	12221-37-3	-1.79	13959-02-9	-3.69
7784-98-7	-1.88	12221-38-4	-1.82	14214-32-5	-2.16
7785-26-4	-2.99	12221-39-5	-1.98	14392-69-9	-1.57
7785-70-8	-3.04	12221-69-1	-1.64	14548-74-4	-1.91
7786-44-9	-2.96	12270-31-4	-1.09	14617-92-6	-2.91
7786-67-6	-2.49	13005-36-2	-3.03	14624-13-6	-2.37
7803-57-8	-4.81	13031-41-9	-3.37	14624-15-8	-1.50
10031-96-6	-1.52	13037-86-0	-1.72	14806-72-5	-3.25
10094-34-5	-2.20	13110-37-7	-2.28	14861-17-7	-2.80
10094-36-7	-2.52	13138-45-9	-3.41	14938-35-3	-2.39
10097-02-6	-3.95	13170-66-6	-3.43	15000-59-6	-2.66
10196-68-6	-2.54	13183-79-4	-3.45	15111-96-3	-2.70
10265-69-7	-3.30	13236-02-7	-0.78	15205-66-0	-3.03

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
15231-91-1	-2.22	17874-34-9	-2.60	21063-40-1	-2.74
15233-47-3	-2.05	17924-92-4	-0.66	21280-29-5	-1.91
15271-41-7	-2.77	18138-05-1	-2.90	21382-98-9	-3.61
15323-35-0	-1.72	18172-67-3	-3.32	21462-39-5	-1.55
15356-74-8	-1.98	18217-00-0	-3.25	21564-17-0	-3.53
15484-80-7	-2.86	18297-63-7	-5.23	21729-98-6	-3.73
15485-76-4	-3.19	18368-91-7	-1.95	21835-01-8	-3.39
15647-08-2	-1.67	18409-20-6	-2.89	22031-33-0	-2.24
15676-16-1	-1.33	18409-21-7	-2.44	22499-12-3	-2.18
15721-78-5	-1.53	18433-93-7	-2.69	22527-63-5	-2.10
15827-60-8	-3.75	18467-77-1	-2.78	22532-47-4	-2.80
15861-24-2	-3.32	18479-49-7	-1.95	22839-47-0	-2.27
15872-42-1	-1.89	18908-66-2	-2.92	22890-11-5	-1.23
15876-32-1	-2.84	19141-82-3	-1.10	23001-29-8	-1.04
16096-31-4	-1.21	19322-27-1	-3.82	23117-36-4	-1.70
16128-68-0	-4.13	19355-69-2	-3.81	23184-71-6	-3.25
16219-75-3	-3.13	19473-49-5	-4.59	23210-58-4	-0.26
16356-11-9	-3.14	19757-97-2	-3.45	23359-08-2	-2.68
16400-72-9	-1.56	19811-05-3	-2.56	23488-13-3	-4.81
16409-43-1	-3.03	19870-74-7	-1.85	23500-79-0	-2.12
16409-45-3	-2.27	19900-72-2	-1.52	23541-50-6	-1.68
16409-46-4	-1.66	20030-30-2	-3.02	23564-06-9	-3.89
16484-77-8	-3.20	20068-02-4	-3.85	23654-92-4	-3.75
16529-56-9	-3.64	20120-33-6	-2.77	23696-85-7	-2.66
16883-83-3	-1.66	20324-32-7	-2.36	23832-18-0	-2.85
16909-78-7	-2.08	20324-33-8	-1.40	24019-05-4	-4.44
16954-69-1	-3.25	20426-12-4	-2.91	24089-00-7	-2.04
17194-82-0	-2.99	20483-36-7	-2.38	24237-00-1	-2.44
17321-47-0	-2.95	20489-53-6	-1.06	24307-26-4	-3.61
17488-65-2	-2.95	20582-85-8	-3.29	24310-40-5	-3.52
17598-02-6	-2.76	20686-66-2	-2.97	24310-41-6	-3.38
17611-82-4	-3.78	20702-77-6	-1.96	24330-52-7	-4.08
17733-22-1	-3.47	20834-59-7	-2.66	24401-36-3	-2.37
17797-03-4	-3.45	20920-83-6	-3.50	24448-09-7	-2.35

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
24602-86-6	-0.82	27955-94-8	-0.26	32329-20-7	-3.17
24729-96-2	0.11	28217-92-7	-2.59	32388-55-9	-1.16
24781-13-3	-1.90	28305-25-1	-4.17	32588-76-4	-6.95
24794-58-9	-2.99	28434-01-7	-1.32	32634-37-0	-0.18
24800-25-7	-0.37	28588-73-0	-2.85	32647-67-9	-2.42
25036-13-9	-4.47	28664-35-9	-3.43	32687-77-7	-2.09
25103-58-6	-2.46	28701-67-9	-1.24	32813-95-9	-2.45
25104-55-6	-3.37	28908-00-1	-3.55	33174-74-2	-2.32
25265-78-5	-1.72	29066-34-0	-2.58	33513-44-9	-3.92
25339-17-7	-1.93	29091-21-2	-2.25	33820-53-0	-1.57
25360-10-5	-2.88	29171-20-8	-2.09	33878-50-1	-1.74
25378-22-7	-2.45	29239-07-4	-2.53	34086-51-6	-2.55
25485-88-5	-2.13	29329-71-3	-2.73	34131-99-2	-0.88
25677-40-1	-3.38	29350-73-0	-1.76	34285-88-6	-2.53
25812-30-0	-2.30	29387-86-8	-3.94	34451-19-9	-3.16
25899-50-7	-3.87	29548-14-9	-2.55	34644-00-3	-2.97
25973-55-1	-2.01	29606-79-9	-3.44	34644-03-6	-2.97
26171-78-8	-2.29	29799-07-3	-1.50	34686-71-0	-2.02
26294-98-4	-3.89	29911-27-1	-2.02	35044-68-9	-2.67
26377-29-7	-4.11	30076-98-3	-2.67	35203-06-6	-2.77
26401-27-4	-2.03	30113-45-2	-1.71	35203-08-8	-2.48
26444-49-5	-2.03	30484-77-6	-4.06	35250-53-4	-3.53
26446-31-1	-2.44	30499-70-8	-3.41	35270-09-8	-3.93
26489-01-0	-1.70	30558-43-1	-3.67	35274-05-6	-4.25
26538-44-3	-0.31	30574-97-1	-3.97	35448-31-8	-3.19
26748-47-0	-1.65	30845-78-4	-2.62	35958-30-6	-5.88
26760-64-5	-3.73	31375-17-4	-2.00	36267-71-7	-3.67
26915-97-9	-3.30	31529-46-1	-3.05	36306-87-3	-1.74
26999-29-1	-1.81	31582-45-3	-1.94	36362-19-3	-2.09
27043-36-3	-3.38	31618-90-3	-2.08	36431-72-8	-2.05
27126-93-8	-3.53	31879-05-7	-1.67	36438-54-7	-2.91
27375-52-6	-2.94	31983-27-4	-2.70	36687-82-8	-2.80
27458-92-0	-1.62	32046-75-6	-2.60	36861-47-9	-2.42
27776-21-2	-1.82	32210-23-4	-1.97	37161-74-3	-2.96

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
37172-05-7	-2.18	42240-73-3	-2.18	52184-19-7	-2.39
37514-30-0	-1.51	42348-12-9	-3.01	52222-87-4	-1.61
37717-68-3	-1.70	42436-07-7	-2.12	52299-20-4	-3.58
37734-45-5	-3.74	42558-01-0	-1.92	52509-84-9	-2.54
37853-59-1	-2.52	42604-12-6	-1.27	52628-03-2	-3.30
37887-04-0	-3.95	43040-01-3	-3.64	52950-18-2	-2.72
37971-36-1	-4.44	43219-68-7	-2.96	53004-93-6	-1.23
38103-06-9	-1.51	44860-68-6	-2.67	53112-28-0	-2.81
38183-04-9	-2.14	46948-72-5	-3.10	53153-66-5	-3.13
38185-06-7	-3.66	49561-96-8	-3.11	53219-21-9	-2.57
38325-25-6	-2.24	49584-26-1	-3.45	53910-28-4	-2.56
38565-53-6	-2.26	49653-17-0	-2.38	54060-92-3	-0.72
38713-41-6	-3.61	50328-50-2	-2.78	54512-75-3	-3.75
39067-80-6	-3.03	50471-44-8	-2.86	54546-26-8	-2.42
39148-24-8	-3.83	50594-44-0	-1.42	54644-28-9	-3.51
39198-34-0	-1.25	50594-77-9	-2.09	54731-72-5	-2.68
39718-00-8	-3.57	50626-02-3	-2.71	55179-31-2	-1.63
40164-69-0	-2.79	50639-37-7	-2.07	55418-52-5	-2.63
40348-72-9	-2.27	50671-48-2	-1.86	55526-94-8	-1.09
40607-48-5	-2.35	50789-44-1	-2.57	55704-78-4	-2.62
40654-82-8	-2.81	50849-47-3	-1.80	55954-19-3	-0.15
40843-73-0	-2.31	50892-23-4	-3.05	56038-89-2	-2.06
40853-53-0	-2.31	51011-05-3	-3.61	56073-10-0	-0.21
41203-81-0	-0.80	51115-63-0	-2.66	56105-46-5	-1.56
41239-48-9	-2.93	51218-45-2	-2.56	56107-04-1	-1.69
41253-21-8	-4.19	51219-00-2	-2.34	56481-85-7	-3.41
41453-56-9	-2.11	51410-72-1	-3.21	56718-71-9	-2.59
41532-84-7	-2.44	51411-24-6	-0.84	56966-52-0	-3.15
41543-92-4	-2.98	51441-65-7	-3.48	57082-24-3	-2.00
41556-26-7	-0.08	51566-62-2	-2.82	57110-29-9	-2.39
41678-36-8	-1.54	51632-16-7	-2.61	57124-87-5	-3.52
41796-12-7	-1.63	51755-66-9	-2.17	57246-09-0	-1.71
41890-92-0	-1.29	51981-33-0	-2.55	57371-42-3	-1.99
42175-41-7	-1.56	52166-72-0	-4.09	57378-68-4	-2.01

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
57486-68-7	-3.64	65287-04-9	-2.35	68391-39-9	-1.62
57499-57-7	-1.27	65405-68-7	-2.01	68412-48-6	-2.80
57583-54-7	0.26	65505-24-0	-2.81	68459-99-4	-2.51
57648-55-2	-2.24	65505-25-1	-2.22	68480-17-1	-2.02
57943-67-6	-1.03	65620-50-0	-2.13	68515-48-0	-1.67
58102-02-6	-2.06	65799-47-5	-3.56	68515-50-4	-2.69
58244-29-4	-2.69	66068-84-6	-0.88	68526-79-4	-2.96
58567-11-6	-1.58	66142-15-2	-1.09	68526-83-0	-1.94
58574-03-1	-2.05	66222-24-0	-2.70	68526-84-1	-2.67
59191-78-5	-2.48	66327-54-6	-1.47	68527-79-7	-1.73
59259-38-0	-2.49	66408-78-4	-2.36	68548-08-3	-2.17
59259-90-4	-2.54	66992-27-6	-3.62	68797-70-6	-1.99
59313-58-5	-2.37	67124-09-8	-0.61	68922-11-2	-2.36
59517-19-0	-1.58	67557-76-0	-1.63	68938-79-4	-3.98
59557-05-0	-2.68	67564-91-4	-1.40	68938-80-7	-3.98
59569-67-4	-2.02	67634-15-5	-2.15	68938-81-8	-3.98
60345-97-3	-2.88	67715-80-4	-2.73	68987-51-9	-3.80
60763-41-9	-1.83	67747-09-5	-2.01	69094-18-4	-3.34
61361-18-0	-3.00	67762-27-0	-0.74	69121-78-4	-2.55
61551-69-7	-1.71	67801-46-1	-1.89	69205-13-6	-1.10
61683-99-6	-2.31	67801-47-2	-2.18	70172-00-8	-1.33
61792-11-8	-2.58	67845-26-5	-3.06	70293-55-9	-1.84
61810-55-7	-1.41	67860-38-2	-3.48	70356-09-1	-2.97
61889-11-0	-2.20	67879-60-1	-3.07	70693-50-4	0.76
61949-23-3	-2.95	67905-32-2	-1.87	70714-66-8	0.09
62346-96-7	-2.82	67906-30-3	-2.45	71077-33-3	-2.02
62561-74-4	-2.79	67953-77-9	-2.54	71441-80-0	-1.22
63046-09-3	-1.95	67989-23-5	-4.31	71672-75-8	-2.97
63133-74-4	-2.39	68047-06-3	-1.35	72207-94-4	-2.71
63149-22-4	-1.58	68258-95-7	-2.23	72541-09-4	-1.90
63449-68-3	-2.16	68334-62-3	-2.79	72928-52-0	-2.55
63943-89-5	-3.36	68345-22-2	-1.64	73566-30-0	-0.75
64577-91-9	-1.83	68359-37-5	-1.30	74094-60-3	-2.94
64988-06-3	-2.68	68366-65-4	-2.47	74367-97-8	-2.31

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
75980-60-8	-1.60	94386-39-7	-1.84	195520-32-2	-1.73
76578-12-6	-2.26	94386-48-8	-1.80	291314-39-1	-2.78
77098-07-8	-3.50	94944-51-1	-3.38	391197-78-7	-0.56
77182-82-2	-2.32	95737-68-1	-1.18		
77635-32-6	-1.99	96478-09-0	-2.83		
78587-05-0	-3.53	96489-71-3	-1.48		
78761-38-3	-2.59	96562-58-2	-3.01		
78761-39-4	-2.93	99422-01-2	-1.64		
79127-80-3	-1.27	100760-25-6	-3.85		
79922-55-7	-0.37	104222-32-4	-0.42		
80443-63-6	-1.28	104821-25-2	-1.31		
80550-09-0	-1.63	108238-41-1	-2.32		
80844-07-1	-1.08	110235-47-7	-2.53		
80866-83-7	-2.28	110726-28-8	-1.45		
81936-33-6	-0.92	112290-07-0	-4.07		
83111-01-7	-4.15	113170-55-1	-2.46		
83623-32-9	-1.34	114040-31-2	-3.44		
84029-92-5	-2.20	114369-43-6	-0.66		
84375-71-3	-2.59	118585-13-0	-1.58		
84632-65-5	-3.19	119094-83-6	-2.80		
84787-87-1	-1.71	119168-77-3	-2.47		
85068-29-7	-3.14	119515-38-7	-2.29		
85238-31-9	-5.54	121199-28-8	-1.68		
85895-78-9	-4.13	126990-35-0	-4.44		
87061-04-9	-0.44	129136-92-1	-1.74		
87820-88-0	-1.82	129283-82-5	-2.25		
88385-22-2	-1.53	143807-66-3	-1.10		
93892-03-6	-2.56	149979-41-9	-1.76		
93892-04-7	-2.71	159011-87-7	-1.65		
93892-05-8	-1.74	160430-64-8	-2.83		
93919-04-1	-2.04	161728-47-8	-2.98		
94050-90-5	-2.91	161981-34-6	-2.13		
94089-21-1	-2.74	178813-81-5	-3.03		
94089-23-3	-2.21	195520-29-7	-1.82		

表 2. 化学物質の ER α に対する相対結合強度 (logRBA) 予測値

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
51-49-0	-2.04	75-01-4	-3.55	77-76-9	-2.98
52-01-7	-0.52	75-02-5	-3.58	77-92-9	-3.52
52-46-0	-2.42	75-05-8	-3.62	78-11-5	-4.83
55-06-1	-2.04	75-08-1	-3.68	78-34-2	-1.29
55-63-0	-3.75	75-09-2	-3.72	78-39-7	-2.65
56-23-5	-4.15	75-18-3	-3.55	78-63-7	-1.82
57-06-7	-3.27	75-21-8	-3.66	78-67-1	-2.39
57-74-9	-2.61	75-26-3	-3.31	78-77-3	-3.04
58-32-2	0.39	75-28-5	-3.14	78-79-5	-3.09
58-89-9	-3.13	75-29-6	-3.30	78-82-0	-3.10
58-95-7	1.04	75-33-2	-3.36	78-87-5	-3.35
59-43-8	0.18	75-34-3	-3.40	78-89-7	-2.76
60-29-7	-3.22	75-35-4	-3.54	78-97-7	-2.92
60-33-3	-2.38	75-38-7	-3.54	79-00-5	-3.38
60-57-1	-1.94	75-45-6	-3.72	79-01-6	-3.64
62-54-4	-3.69	75-52-5	-3.43	79-24-3	-3.36
63-91-2	-2.53	75-56-9	-3.17	79-27-6	-3.78
67-43-6	-6.47	75-57-0	-2.45	79-34-5	-3.44
67-66-3	-3.89	75-59-2	-2.45	79-38-9	-4.00
67-72-1	-3.69	75-63-8	-3.98	79-46-9	-3.02
69-79-4	-1.53	75-66-1	-3.19	79-76-5	-1.08
71-48-7	-3.69	75-68-3	-3.42	79-77-6	-0.82
71-55-6	-3.38	75-69-4	-3.83	79-92-5	-1.81
72-20-8	-1.98	75-71-8	-3.84	80-56-8	-1.74
74-83-9	-3.82	75-88-7	-3.46	80-71-7	-2.69
74-85-1	-3.92	76-01-7	-3.68	80-73-9	-3.03
74-86-2	-3.99	76-06-2	-3.77	83-59-0	-0.84
74-87-3	-3.85	76-13-1	-3.76	83-79-4	-0.26
74-93-1	-4.08	76-14-2	-3.63	85-43-8	-2.21
74-95-3	-3.99	76-15-3	-3.72	85-69-8	-1.25
74-96-4	-3.41	76-44-8	-2.26	87-44-5	-0.84
74-97-5	-3.73	77-42-9	-0.84	87-55-8	-2.37
74-99-7	-3.56	77-47-4	-3.40	87-68-3	-3.17
75-00-3	-3.45	77-73-6	-1.84	88-29-9	-0.42

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
88-66-4	-2.45	105-52-2	-1.54	108-87-2	-2.51
88-84-6	-0.59	105-57-7	-2.74	109-29-5	-1.86
89-48-5	-1.17	105-64-6	-2.76	109-53-5	-3.04
89-77-0	-2.51	105-82-8	-2.42	109-65-9	-3.25
89-80-5	-1.52	105-89-5	-1.98	109-67-1	-3.11
90-80-2	-0.97	105-95-3	-1.93	109-69-3	-3.18
91-17-8	-1.80	106-02-5	-1.78	109-70-6	-3.36
91-50-9	-0.05	106-21-8	-1.35	109-74-0	-3.41
91-51-0	0.08	106-29-6	-1.65	109-79-5	-3.29
91-60-1	-1.97	106-62-7	-2.31	109-80-8	-3.64
91-62-3	-1.88	106-88-7	-3.10	109-87-5	-3.67
93-53-8	-2.44	106-89-8	-3.10	109-88-6	-3.68
93-65-2	-2.03	106-92-3	-2.76	109-92-2	-3.39
96-18-4	-3.26	106-93-4	-3.65	109-99-9	-3.26
97-74-5	-2.16	106-94-5	-3.28	110-01-0	-3.39
97-77-8	-2.09	106-98-9	-3.26	110-05-4	-2.36
98-85-1	-1.93	106-99-0	-3.24	110-06-5	-2.22
99-49-0	-1.76	107-00-6	-3.28	110-52-1	-3.13
99-72-9	-1.90	107-01-7	-3.13	110-57-6	-3.21
99-82-1	-1.57	107-03-9	-3.54	110-67-8	-3.72
99-83-2	-1.61	107-05-1	-3.39	110-71-4	-3.40
99-85-4	-1.71	107-06-2	-3.63	110-88-3	-3.43
99-86-5	-1.61	107-12-0	-3.50	111-03-5	-2.02
100-40-3	-2.42	107-13-1	-3.47	111-24-0	-3.08
102-52-3	-2.42	107-25-5	-3.68	111-25-1	-2.76
102-58-9	-1.37	107-30-2	-3.58	111-28-4	-2.44
102-82-9	-2.20	107-39-1	-2.26	111-31-9	-2.83
103-48-0	-1.71	107-40-4	-2.18	111-44-4	-3.30
104-27-8	-1.38	107-56-2	-2.41	111-66-0	-2.56
104-45-0	-1.87	108-03-2	-3.19	111-69-3	-3.38
104-55-2	-2.28	108-20-3	-2.81	111-78-4	-2.68
104-64-3	-2.09	108-57-6	-1.98	111-83-1	-2.60
104-68-7	-1.41	108-62-3	-2.31	111-85-3	-2.38
104-95-0	-2.61	108-83-8	-2.00	111-88-6	-2.59

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
111-91-1	-3.44	121-45-9	-3.48	138-23-8	-1.69
111-96-6	-3.39	122-10-1	-2.84	138-25-0	-2.74
111-97-7	-3.54	122-31-6	-2.49	138-86-3	-1.58
112-00-5	-0.48	122-51-0	-3.19	138-87-4	-1.37
112-02-7	-0.54	122-52-1	-3.51	138-93-2	-2.96
112-29-8	-2.42	122-57-6	-1.75	139-33-3	-4.37
112-36-7	-3.09	122-68-9	-0.90	140-01-2	-6.47
112-41-4	-2.10	122-91-8	-2.31	140-08-9	-3.20
112-48-1	-2.61	123-35-3	-2.05	140-27-2	-1.52
112-49-2	-2.93	123-63-7	-2.26	140-60-3	-2.18
112-52-7	-1.84	123-91-1	-3.04	140-93-2	-3.04
112-55-0	-1.97	124-30-1	-1.82	141-01-5	-3.50
112-56-1	-2.90	126-98-7	-3.07	141-09-3	-1.87
112-62-9	-2.09	126-99-8	-3.22	141-11-7	-1.86
112-63-0	-1.91	127-18-4	-4.01	141-97-9	-3.05
112-71-0	-1.93	127-25-3	-0.44	141-98-0	-2.47
112-73-2	-2.23	127-42-4	-0.99	142-17-6	-2.55
112-77-6	-1.82	127-43-5	-1.13	142-29-0	-3.06
112-80-1	-1.59	127-65-1	-2.55	142-59-6	-2.20
112-82-3	-2.05	127-91-3	-1.81	142-72-3	-3.69
112-90-3	-1.58	128-04-1	-3.32	142-96-1	-2.86
112-91-4	-2.22	128-44-9	-2.39	143-14-6	-2.17
115-07-1	-3.44	128-63-2	-1.64	143-15-7	-2.03
115-10-6	-3.67	129-67-9	-2.43	143-18-0	-1.59
115-11-7	-3.16	130-89-2	-0.87	143-19-1	-1.59
115-25-3	-3.32	136-51-6	-2.55	143-28-2	-1.23
115-71-9	-0.59	136-52-7	-2.55	143-50-0	-2.97
115-80-0	-2.55	136-53-8	-2.55	144-35-4	-0.45
116-11-0	-3.42	136-99-2	-0.81	144-39-8	-1.60
116-14-3	-3.92	137-08-6	-2.73	149-44-0	-2.44
116-15-4	-3.62	137-20-2	-2.38	149-73-5	-3.48
116-25-6	-2.26	137-26-8	-2.05	150-30-1	-2.64
116-53-0	-3.31	137-41-7	-2.93	150-50-5	-2.26
119-53-9	-1.50	137-42-8	-2.93	150-60-7	-1.59

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
155-04-4	-2.35	463-82-1	-3.18	528-79-0	-1.42
156-60-5	-3.84	464-45-9	-1.61	534-15-6	-3.25
156-62-7	-3.52	469-61-4	-0.51	537-00-8	-3.69
286-20-4	-2.47	470-67-7	-1.34	537-98-4	-2.33
287-92-3	-3.15	470-82-6	-1.27	538-75-0	-1.33
294-62-2	-2.05	472-97-9	-0.54	540-07-8	-2.35
298-02-2	-2.64	473-55-2	-1.57	540-63-6	-4.06
298-04-4	-2.53	475-20-7	-0.98	540-72-7	-4.09
298-06-6	-3.10	480-41-1	-0.44	540-84-1	-2.12
299-28-5	-3.18	491-04-3	-1.39	541-15-1	-2.81
300-84-5	-2.16	491-09-8	-1.54	541-31-1	-3.03
301-00-8	-2.18	495-62-5	-0.94	541-91-3	-1.68
301-02-0	-1.09	498-81-7	-1.14	542-42-7	-2.21
301-10-0	-2.51	499-12-7	-3.47	542-55-2	-3.04
304-59-6	-2.92	499-44-5	-1.97	542-75-6	-3.35
306-83-2	-3.69	499-54-7	-1.98	542-92-7	-3.31
309-00-2	-1.71	499-69-4	-1.23	544-01-4	-2.22
311-89-7	-8.86	499-70-7	-1.50	544-17-2	-3.64
349-58-6	-2.67	500-02-7	-2.14	544-35-4	-2.14
349-76-8	-2.42	501-98-4	-2.21	544-40-1	-2.62
352-93-2	-3.02	502-61-4	-0.93	544-63-8	-2.51
353-59-3	-3.80	502-72-7	-1.80	546-68-9	-2.95
354-58-5	-3.87	504-60-9	-3.01	553-72-0	-2.55
367-65-7	-2.11	505-29-3	-3.22	553-79-7	-2.03
371-42-6	-2.89	505-57-7	-3.02	553-86-6	-2.65
374-07-2	-3.76	505-65-7	-3.21	555-31-7	-2.95
382-31-0	-2.42	505-79-3	-3.16	555-35-1	-2.21
401-95-6	-2.65	507-20-0	-3.02	555-75-9	-3.21
401-99-0	-2.71	513-35-9	-2.78	557-08-4	-2.58
427-51-0	-0.21	513-44-0	-3.20	557-34-6	-3.69
428-59-1	-3.44	513-53-1	-3.30	558-37-2	-2.77
461-82-5	-1.75	515-00-4	-1.40	563-12-2	-2.21
463-40-1	-2.93	520-26-3	0.86	563-47-3	-3.27
463-51-4	-4.04	527-62-8	-2.45	563-71-3	-4.23

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
563-72-4	-3.25	624-83-9	-3.72	693-58-3	-2.52
564-94-3	-1.90	624-89-5	-3.23	696-59-3	-2.27
583-92-6	-3.01	624-92-0	-3.50	698-76-0	-1.81
584-03-2	-2.25	626-38-0	-2.44	699-07-0	-2.48
585-24-0	-2.00	626-82-4	-2.19	699-10-5	-2.54
585-25-1	-2.52	627-70-3	-2.06	705-73-7	-1.87
586-62-9	-1.40	628-96-6	-3.72	756-80-9	-3.21
586-82-3	-1.45	629-03-8	-2.89	760-23-6	-3.19
587-26-8	-4.23	629-04-9	-2.82	762-29-8	-1.68
589-35-5	-2.27	629-19-6	-2.74	764-39-6	-3.16
589-98-0	-1.96	629-41-4	-2.48	764-40-9	-3.07
590-00-1	-3.08	629-73-2	-1.76	764-41-0	-3.23
590-18-1	-3.24	629-79-8	-1.89	764-71-6	-2.71
592-41-6	-2.91	630-20-6	-3.55	765-05-9	-2.34
592-45-0	-2.98	636-53-3	-1.83	769-78-8	-2.47
592-51-8	-3.43	637-92-3	-2.79	772-46-3	-1.26
592-84-7	-3.02	638-38-0	-3.69	782-74-1	-1.36
592-88-1	-3.40	643-38-9	-2.61	791-22-0	-1.93
593-08-8	-2.18	644-21-3	-2.05	798-61-8	-0.74
594-42-3	-3.76	644-35-9	-2.18	813-94-5	-3.22
597-82-0	-0.03	645-67-0	-2.92	814-67-5	-3.36
598-82-3	-2.96	646-06-0	-3.55	814-80-2	-3.50
604-68-2	-1.94	654-55-7	-2.68	814-89-1	-3.25
608-73-1	-3.13	654-66-0	-1.26	815-17-8	-3.07
612-00-0	-1.22	669-90-9	-3.57	816-11-5	-2.89
614-23-3	-1.94	676-46-0	-3.40	828-26-2	-1.44
616-09-1	-2.21	677-21-4	-3.40	833-66-9	-1.76
616-21-7	-3.22	683-10-3	-1.20	837-08-1	-0.19
619-15-8	-2.31	687-47-8	-2.93	867-27-6	-2.51
621-13-6	-1.51	688-82-4	-2.23	868-57-5	-2.89
621-82-9	-2.60	689-97-4	-3.33	870-23-5	-3.83
623-21-2	-2.61	691-37-2	-2.81	871-22-7	-2.40
623-22-3	-2.23	693-07-2	-3.25	872-05-9	-2.01
624-64-6	-3.13	693-21-0	-3.16	873-54-1	-2.55

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
901-44-0	0.16	1191-62-4	-2.86	1589-47-5	-2.60
917-93-1	-3.32	1193-11-9	-2.20	1599-47-9	-2.61
918-04-7	-2.96	1193-79-9	-2.30	1599-49-1	-1.79
920-37-6	-3.32	1195-79-5	-1.72	1606-80-0	-3.38
925-83-7	-1.59	1203-17-4	-0.94	1617-23-8	-2.45
926-57-8	-3.17	1205-42-1	-1.57	1618-26-4	-3.36
927-19-5	-2.49	1208-67-9	-2.20	1632-73-1	-1.51
930-69-8	-2.84	1217-08-9	0.09	1634-04-4	-2.76
931-40-8	-2.52	1260-17-9	-1.67	1653-19-6	-2.98
931-88-4	-2.77	1319-70-6	-2.39	1653-30-1	-1.44
943-88-4	-1.66	1333-09-1	-1.92	1679-07-8	-2.93
961-11-5	-2.03	1335-72-4	-2.47	1706-12-3	-1.01
963-39-3	-1.17	1405-92-1	-0.83	1717-00-6	-3.36
971-15-3	-1.72	1435-71-8	-0.84	1725-01-5	-2.58
993-43-1	-3.22	1445-45-0	-3.02	1741-41-9	-2.41
994-05-8	-2.81	1452-15-9	-3.41	1762-95-4	-3.93
994-36-5	-3.25	1476-11-5	-3.07	1763-23-1	-3.88
999-81-5	-2.22	1489-57-2	-2.39	1772-25-4	-2.87
1000-82-4	-2.84	1497-49-0	-0.92	1773-89-3	-2.22
1002-69-3	-2.13	1497-68-3	-3.09	1786-08-9	-1.46
1024-57-3	-2.59	1504-74-1	-1.97	1800-91-5	-2.20
1070-35-5	-3.17	1506-02-1	0.05	1817-13-6	-2.82
1070-78-6	-3.40	1546-95-8	-3.74	1847-58-1	-2.91
1073-11-6	-2.66	1552-12-1	-2.68	1854-26-8	-0.89
1074-82-4	-2.47	1552-67-6	-2.60	1878-18-8	-2.96
1076-56-8	-1.41	1559-34-8	-1.91	1901-26-4	-1.59
1095-77-8	-1.04	1560-69-6	-3.29	1910-42-5	0.63
1103-38-4	-0.74	1561-92-8	-3.29	1923-99-5	-2.43
1103-39-5	-0.74	1569-60-4	-1.70	1928-45-6	-1.89
1117-41-5	-1.07	1569-69-3	-2.84	1966-58-1	-2.31
1120-36-1	-1.74	1572-52-7	-3.06	1975-78-6	-2.50
1139-30-6	-0.50	1575-61-7	-3.58	1982-69-0	-2.60
1185-57-5	-3.25	1576-77-8	-2.57	1996-88-9	-3.71
1191-43-1	-3.35	1583-58-0	-2.87	2050-09-1	-2.05

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
2050-87-5	-3.18	2425-66-3	-2.99	2847-30-5	-2.36
2051-96-9	-1.55	2426-08-6	-2.50	2851-95-8	-2.52
2084-18-6	-2.71	2431-50-7	-3.05	2856-63-5	-2.70
2084-19-7	-2.85	2432-77-1	-2.77	2922-54-5	-3.21
2084-69-7	-0.45	2435-16-7	-1.57	2937-54-4	-3.42
2090-05-3	-2.55	2436-90-0	-1.89	2971-36-0	-0.27
2094-98-6	-1.58	2437-25-4	-1.86	2983-36-0	-1.87
2095-01-4	-1.26	2437-56-1	-1.99	2983-38-2	-2.52
2102-59-2	-1.29	2444-90-8	-0.34	3001-61-4	-1.74
2110-18-1	-1.50	2445-83-2	-1.90	3006-82-4	-1.88
2114-02-5	-0.91	2463-53-8	-2.44	3006-86-8	-1.41
2114-33-2	-2.19	2463-63-0	-2.72	3016-19-1	-1.43
2142-01-0	-1.37	2463-77-6	-2.12	3033-23-6	-1.50
2153-26-6	-1.50	2492-26-4	-2.35	3033-77-0	-1.78
2163-00-0	-3.00	2495-39-8	-3.40	3039-83-6	-3.53
2179-57-9	-2.98	2497-18-9	-2.93	3048-64-4	-2.18
2179-58-0	-3.28	2524-03-0	-3.25	3048-65-5	-2.22
2179-60-4	-3.16	2524-04-1	-3.17	3056-93-7	0.48
2213-81-2	-1.62	2528-36-1	-1.31	3081-01-4	-0.26
2217-33-6	-2.16	2530-10-1	-2.23	3085-35-6	-2.41
2270-60-2	-1.85	2536-05-2	-1.69	3089-17-6	-0.95
2282-34-0	-1.08	2537-48-6	-2.87	3096-70-6	-2.29
2286-54-6	-1.44	2550-40-5	-1.46	3194-55-6	-3.02
2305-21-7	-2.50	2571-39-3	-0.91	3208-40-0	-1.49
2308-18-1	-2.54	2589-57-3	-2.03	3218-49-3	-2.68
2311-59-3	-2.19	2611-00-9	-1.10	3269-90-7	-1.30
2351-90-8	-2.31	2612-56-8	-1.36	3278-22-6	-3.00
2363-88-4	-2.34	2634-33-5	-2.47	3293-47-8	-0.34
2363-89-5	-2.76	2679-87-0	-2.90	3338-24-7	-2.97
2385-85-5	-2.88	2695-37-6	-2.27	3391-83-1	-1.81
2396-85-2	-2.74	2786-76-7	0.53	3392-97-0	-1.88
2408-37-9	-1.99	2825-82-3	-1.71	3425-61-4	-2.51
2420-98-6	-2.51	2835-98-5	-1.48	3452-97-9	-1.62
2425-54-9	-1.98	2837-89-0	-3.56	3454-29-3	-1.46

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
3460-44-4	-1.67	4080-98-2	-0.82	4634-89-3	-3.11
3473-63-0	-3.43	4101-68-2	-2.34	4635-87-4	-3.22
3489-28-9	-2.58	4104-14-7	-1.18	4643-25-8	-2.89
3600-24-6	-3.19	4170-30-3	-3.43	4685-14-7	0.63
3613-33-0	-1.77	4175-66-0	-2.75	4706-78-9	-2.56
3618-72-2	-0.43	4180-23-8	-1.77	4719-04-4	-1.89
3632-91-5	-3.18	4206-61-5	-2.02	4728-82-9	-2.30
3644-11-9	-2.96	4247-02-3	-0.96	4744-08-5	-2.94
3658-79-5	-2.49	4253-89-8	-2.43	4756-19-8	-0.97
3658-80-8	-3.51	4265-97-8	-2.13	4790-71-0	-2.04
3658-93-3	-2.59	4282-34-2	-2.54	4826-62-4	-2.23
3658-95-5	-2.59	4286-23-1	-1.53	4860-03-1	-1.96
3681-78-5	-2.18	4337-75-1	-2.09	4887-30-3	-2.21
3682-42-6	-2.70	4351-10-4	-1.52	4906-24-5	-2.91
3687-13-6	-2.65	4356-60-9	-2.13	4927-10-0	-2.83
3698-95-1	-2.47	4359-54-0	-1.91	4948-29-2	-1.67
3699-66-9	-1.76	4364-06-1	-1.92	4951-48-8	-1.11
3724-61-6	-1.89	4390-04-9	-0.45	4980-54-5	-1.96
3724-65-0	-3.28	4395-92-0	-2.18	5026-62-0	-1.60
3734-48-3	-1.88	4418-26-2	-2.34	5039-78-1	-1.93
3744-02-3	-2.92	4419-11-8	-1.25	5077-67-8	-2.81
3757-32-2	-2.86	4433-36-7	-1.83	5080-50-2	-1.86
3757-76-4	-2.28	4437-22-3	-1.74	5085-00-7	-1.35
3765-57-9	-2.21	4445-07-2	-1.04	5102-83-0	1.74
3842-03-3	-2.48	4454-05-1	-2.47	5103-71-9	-2.38
3862-73-5	-2.02	4461-52-3	-3.13	5103-74-2	-2.43
3913-71-1	-2.29	4475-95-0	-3.01	5106-98-9	-2.74
3913-85-7	-2.50	4532-64-3	-2.94	5128-29-0	-1.76
3964-52-1	-1.99	4548-27-0	-2.28	5146-66-7	-2.08
3967-54-2	-3.54	4553-62-2	-2.98	5153-77-5	-2.30
3982-91-0	-3.87	4568-28-9	-2.65	5188-07-8	-4.08
4016-24-4	-2.54	4586-22-5	-0.79	5208-93-5	-0.35
4026-20-4	-2.43	4627-22-9	-0.51	5281-04-9	-1.37
4075-81-4	-3.29	4630-07-3	-0.56	5317-66-8	-2.16

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
5320-75-2	-1.10	5970-45-6	-3.69	6448-95-9	1.10
5331-32-8	-1.56	5986-38-9	-1.40	6454-22-4	-1.37
5392-40-5	-1.98	5988-91-0	-2.23	6471-66-5	-1.49
5394-36-5	-2.25	5989-27-5	-1.65	6484-52-2	-3.95
5405-58-3	-1.91	5989-54-8	-2.02	6515-37-3	-0.48
5406-58-6	-0.88	6020-87-7	-2.17	6528-34-3	0.18
5421-12-5	-1.22	6028-47-3	-1.86	6554-98-9	-0.50
5421-46-5	-3.62	6028-61-1	-2.83	6561-39-3	-2.06
5423-23-4	-1.61	6046-93-1	-3.69	6623-41-2	-1.18
5434-57-1	-2.04	6070-14-0	-1.19	6638-05-7	-1.68
5435-64-3	-2.23	6080-56-4	-3.69	6645-46-1	-3.17
5443-49-2	-2.55	6104-30-9	-2.10	6750-03-4	-2.20
5452-07-3	-1.91	6106-24-7	-3.61	6789-80-6	-3.10
5458-59-3	-2.40	6126-50-7	-2.74	6789-88-4	-1.54
5461-02-9	-2.22	6144-04-3	-1.99	6790-58-5	-0.51
5500-21-0	-3.26	6147-53-1	-3.69	6812-78-8	-1.78
5524-05-0	-1.68	6156-78-1	-3.69	6838-85-3	-2.69
5552-30-7	-0.75	6165-51-1	-0.69	6851-03-2	-4.23
5577-44-6	-2.42	6196-95-8	-0.72	6863-58-7	-2.34
5616-51-3	-2.80	6196-98-1	-0.57	6876-13-7	-1.82
5650-20-4	-2.18	6221-93-8	-1.72	6911-51-9	-2.53
5660-60-6	-1.62	6222-35-1	-2.33	6915-15-7	-3.06
5719-73-3	-3.75	6283-92-7	-1.25	6938-45-0	-1.68
5726-19-2	-1.91	6284-46-4	-2.49	6939-75-9	-2.44
5760-50-9	-2.10	6294-17-3	-2.91	6940-78-9	-3.25
5794-03-6	-1.90	6294-31-1	-2.29	6969-49-9	-1.79
5810-18-4	-2.83	6314-97-2	-1.68	6976-72-3	-1.98
5810-88-8	-1.77	6321-45-5	-2.83	7022-45-9	-2.56
5862-38-4	-1.02	6358-53-8	-0.48	7023-61-2	-1.04
5873-54-1	-1.56	6358-85-6	1.35	7095-16-1	-3.31
5903-13-9	-1.37	6359-45-1	1.03	7142-84-9	-2.72
5905-47-5	-3.33	6362-79-4	-3.89	7149-32-8	-1.85
5933-87-9	-1.84	6381-63-1	-2.71	7158-25-0	-0.95
5959-89-7	-0.59	6423-43-4	-3.27	7289-52-3	-2.32

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
7320-37-8	-1.38	7778-87-2	-2.51	10325-94-7	-3.26
7341-17-5	-2.61	7778-96-3	-1.60	10339-55-6	-1.62
7367-90-0	-2.01	7779-41-1	-1.92	10377-60-3	-3.26
7378-23-6	-2.25	7779-67-1	-2.26	10387-40-3	-3.86
7392-19-0	-1.43	7779-72-8	-2.56	10402-47-8	-1.84
7423-32-7	-1.30	7780-06-5	-1.38	10415-86-8	-1.60
7446-26-6	-2.71	7784-98-7	-0.86	10421-48-4	-3.26
7492-37-7	-1.62	7785-26-4	-1.79	10436-39-2	-3.31
7492-41-3	-1.84	7785-70-8	-1.76	10444-50-5	-0.97
7492-44-6	-1.85	7785-87-7	-2.59	10482-65-2	-1.43
7492-55-9	-2.98	7786-29-0	-2.36	10482-77-6	-0.70
7492-65-1	-1.29	7786-44-9	-2.10	10484-36-3	-0.75
7492-66-2	-1.94	7786-67-6	-1.42	10486-14-3	-1.10
7493-58-5	-2.81	7786-81-4	-2.59	10533-67-2	-2.94
7493-65-4	-1.82	7803-57-8	-3.97	10544-63-5	-2.84
7500-82-5	-1.92	10022-28-3	-2.30	10548-15-9	-2.65
7549-37-3	-1.78	10024-64-3	-1.31	10595-60-5	-1.56
7554-12-3	-2.49	10025-67-9	-4.19	10599-70-9	-2.31
7580-31-6	-2.67	10031-96-6	-1.87	11138-60-6	-2.54
7585-41-3	-1.40	10032-00-5	-1.58	12217-45-7	-0.05
7601-89-0	-4.25	10032-05-0	-2.37	12217-46-8	0.31
7620-75-9	-1.59	10032-11-8	-2.17	12217-48-0	0.99
7631-99-4	-3.95	10032-13-0	-2.34	12221-37-3	0.06
7664-93-9	-3.69	10094-36-7	-1.90	12221-38-4	0.73
7697-37-2	-3.95	10094-41-4	-2.00	12221-39-5	0.97
7704-73-6	-3.35	10097-02-6	-2.37	12221-69-1	-0.01
7705-14-8	-1.58	10108-80-2	-2.46	12262-03-2	-2.11
7719-12-2	-3.66	10193-95-0	-3.24	12270-31-4	0.84
7757-79-1	-3.95	10196-68-6	-1.94	13002-08-9	-1.96
7757-82-6	-3.69	10233-13-3	-2.11	13002-09-0	-1.76
7761-88-8	-3.95	10265-69-7	-3.06	13002-11-4	-2.37
7774-47-2	-1.70	10276-85-4	-1.67	13005-36-2	-2.75
7774-60-9	-1.71	10288-28-5	-2.59	13031-41-9	-2.29
7775-38-4	-2.43	10297-73-1	-2.01	13071-79-9	-1.96

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
13138-45-9	-3.95	13959-02-9	-3.16	16484-77-8	-2.25
13162-46-4	-1.87	14097-03-1	0.62	16529-56-9	-3.12
13170-66-6	-2.75	14436-32-9	-2.51	16627-68-2	-3.36
13183-79-4	-2.64	14548-74-4	-2.03	16883-83-3	-1.02
13189-00-9	-3.31	14617-92-6	-1.71	16909-78-7	-0.68
13236-02-7	-1.80	14620-52-1	-1.87	16954-69-1	-1.99
13246-52-1	-3.02	14624-13-6	-2.05	16957-70-3	-2.61
13257-44-8	-2.38	14624-15-8	-1.49	16996-40-0	-2.67
13360-64-0	-2.24	14806-72-5	-2.83	17194-82-0	-2.04
13393-93-6	0.61	14861-17-7	-0.72	17321-47-0	-2.89
13429-24-8	-3.50	15000-59-6	0.96	17488-65-2	-1.51
13429-27-1	-2.69	15111-96-3	-1.54	17597-95-4	-2.65
13442-90-5	-2.26	15205-66-0	-3.19	17609-32-4	-2.24
13464-80-7	-3.69	15233-47-3	-0.53	17611-82-4	-3.15
13466-78-9	-1.38	15271-41-7	-1.85	17619-36-2	-3.10
13472-08-7	-1.97	15323-35-0	0.21	17733-22-1	-2.50
13473-90-0	-3.95	15356-74-8	-1.76	17797-03-4	-2.71
13494-07-0	-2.49	15484-80-7	-1.76	17874-34-9	-0.82
13567-39-0	-0.46	15545-97-8	-0.91	18138-05-1	-2.08
13597-92-7	-2.79	15586-11-5	-2.65	18172-67-3	-2.06
13623-11-5	-2.57	15647-08-2	-0.39	18217-00-0	-2.16
13631-64-6	-1.91	15679-19-3	-2.91	18277-27-5	-2.38
13678-58-5	-3.09	15861-24-2	-1.89	18318-83-7	-2.86
13679-86-2	-1.61	15876-32-1	-1.46	18368-91-7	-1.58
13705-05-0	-3.22	16042-21-0	-2.96	18409-20-6	-1.88
13780-17-1	-2.93	16096-31-4	-1.87	18409-21-7	-1.51
13877-91-3	-1.54	16128-68-0	-3.18	18433-93-7	-1.78
13893-39-5	-1.91	16219-75-3	-2.09	18467-77-1	-1.23
13893-53-3	-2.53	16356-11-9	-1.98	18469-44-8	-2.79
13925-03-6	-2.37	16400-72-9	-1.42	18479-49-7	-1.75
13925-05-8	-2.08	16409-43-1	-1.64	18760-44-6	-1.56
13925-07-0	-2.06	16409-45-3	-1.04	18824-63-0	-2.05
13939-25-8	1.60	16409-46-4	-0.49	18908-66-2	-2.31
13952-84-6	-2.98	16424-35-4	-2.21	19141-82-3	-1.27

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
19322-27-1	-2.64	22031-33-0	-2.06	25053-12-7	-3.22
19355-69-2	-3.12	22128-62-7	-4.05	25085-02-3	-3.53
19473-49-5	-3.69	22527-63-5	-0.48	25103-58-6	-1.82
19757-97-2	-2.54	22532-47-4	-2.11	25104-55-6	-2.15
19811-05-3	-1.22	22890-11-5	-1.73	25265-78-5	-1.17
19870-74-7	0.08	22915-49-7	-2.80	25339-17-7	-1.55
19900-72-2	0.19	23117-36-4	-1.46	25360-10-5	-2.35
19910-65-7	-2.38	23184-71-6	-2.83	25378-22-7	-2.01
20030-30-2	-1.85	23328-62-3	-3.64	25409-08-9	-2.44
20068-02-4	-2.90	23359-08-2	-2.59	25485-88-5	-1.57
20120-33-6	-1.87	23488-13-3	-3.97	25496-72-4	-1.90
20324-32-7	-1.90	23500-79-0	-1.17	25567-76-4	-3.01
20324-33-8	-1.38	23541-50-6	0.46	25597-16-4	-2.88
20483-36-7	-1.32	23654-92-4	-2.61	25637-84-7	-2.36
20489-53-6	-0.68	23696-85-7	-1.27	25677-40-1	-1.99
20567-59-3	-2.18	23747-45-7	-2.70	25899-50-7	-2.97
20582-85-8	-2.61	23832-18-0	-1.62	25952-53-8	-2.50
20686-66-2	-1.64	24019-05-4	-1.07	26074-52-2	-3.37
20702-77-6	0.69	24089-00-7	-2.03	26171-78-8	-0.56
20780-49-8	-1.70	24237-00-1	-1.52	26266-57-9	-2.04
20834-59-7	-1.56	24307-26-4	-1.69	26266-58-0	-2.32
20920-83-6	-2.14	24310-40-5	-1.55	26294-98-4	-2.96
21063-40-1	-2.21	24310-41-6	-2.20	26303-90-2	-2.45
21129-18-0	-3.29	24330-52-7	-3.28	26353-42-4	-3.01
21188-60-3	-2.75	24401-36-3	-2.15	26377-29-7	-3.08
21280-29-5	-0.49	24448-09-7	-1.67	26401-27-4	-0.11
21382-98-9	-2.70	24460-74-0	-2.37	26446-31-1	-2.62
21462-39-5	-0.90	24509-88-4	-2.34	26464-05-1	-3.46
21539-58-2	-2.82	24602-86-6	-1.06	26489-01-0	-1.70
21564-17-0	-2.50	24781-13-3	-1.36	26651-96-7	-1.71
21662-16-8	-1.90	24794-58-9	-2.57	26748-41-4	-1.73
21729-98-6	-2.98	24800-25-7	-0.86	26748-47-0	-1.49
21835-01-8	-2.56	24851-98-7	-1.47	26750-50-5	-3.16
21884-26-4	-2.76	25036-13-9	-3.03	26760-64-5	-3.03