

表2. 化学物質の ERβ に対する結合強度予測値

CAS 番号等	推算 logRBA	CAS 番号等	推算 logRBA	CAS 番号等	推算 logRBA
000051-24-1	-0.651	003228-02-2	-0.828	023452-05-3	0.340
000067-30-1	-0.492	003248-91-7	1.348	024305-56-4	-0.583
000085-28-9	-0.551	003301-49-3	0.775	025639-54-7	-1.334
000087-18-3	-0.591	003337-59-5	-1.786	026538-44-3	0.161
000106-02-5	-1.777	003943-89-3	-0.517	026636-32-8	-0.607
000125-20-2	0.107	004191-73-5	-0.732	029799-07-3	0.283
000133-07-3	-1.462	004191-73-5	-0.732	036861-47-9	0.118
000299-45-6	-0.659	004250-77-5	0.024	038183-04-9	0.729
000341-58-2	-0.436	005289-74-7	-0.083	040444-43-7	-0.376
000485-63-2	0.170	005402-37-9	-0.119	041796-12-7	-0.680
000500-66-3	-0.842	005817-39-0	-1.145	052222-87-4	0.039
000509-77-3	0.492	006073-20-7	-0.071	058109-40-3	-1.000
000518-45-6	0.745	006131-38-0	-0.409	059517-19-0	-0.291
000564-35-2	0.791	006468-96-8	0.444	063046-09-3	0.183
000596-01-0	1.026	006665-67-4	0.151	068047-06-3	1.743
000596-28-1	1.281	006665-83-4	-0.549	072495-97-7	-0.675
000611-99-4	-0.265	006674-39-1	-0.379	081936-33-6	0.035
000843-55-0	0.368	006948-88-5	1.253	083409-32-9	-0.219
000843-55-0	0.368	006949-73-1	-0.367	084375-71-3	-0.902
000927-67-3	-2.108	007297-86-1	0.267	084375-71-3	-0.902
001034-41-9	-2.296	007392-62-3	0.079	093602-28-9	0.003
001124-04-5	-1.497	007463-51-6	-1.005	104821-25-2	0.517
001139-46-4	0.381	010210-17-0	-1.315	105640-07-1	-0.886
001157-39-7	0.020	013728-34-2	-0.783	108238-41-1	0.069
001518-83-8	-0.784	014392-69-9	-0.513	110726-28-8	-0.665
001719-71-7	1.348	015086-94-9	-0.101	114369-43-6	-0.689
001847-63-8	0.945	015231-91-1	-0.918	EA120	-0.037
001847-63-8	0.945	015485-76-4	0.864	EA133	-0.256
001951-25-3	-0.533	015872-42-1	-2.052	EA151	-0.502
002150-43-8	-1.016	016606-47-6	-0.563	EA160	1.011
002236-52-4	-1.342	017362-17-3	-1.559	EA205	0.654
002443-58-5	-0.396	018964-53-9	0.179	EA207	1.034
003144-54-5	-0.801	020283-92-5	0.125	EA209	0.597
003144-54-5	-0.801	023210-58-4	0.184	EA214	1.466

CAS 番号等	推算 logRBA	CAS 番号等	推算 logRBA	CAS 番号等	推算 logRBA
EA228	-0.326	ED40	0.828	ER257	0.288
EA240	1.152	ED43	-0.092	ER263	0.059
EA263	0.778	ED46	0.030	ER272	0.446
EA318	0.983	ED48	0.261	ER366	-0.428
EA326	-0.726	ED49	-0.116	ER370	-0.871
ED26	0.081	ED53	-0.136	ER524	1.050
ED37	0.320	ED55	1.196	ER526	0.479
ED39	0.065	ER249	0.746		

表3. EPA 化合物の ER α に対する結合強度予測値(上位 1000 化合物)

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
000050-02-2	0.18	000057-24-9	-0.27	000074-79-3	-0.41
000050-03-3	-0.13	000057-63-6	0.87	000076-25-5	-0.15
000050-14-6	0.33	000057-67-0	0.06	000076-42-6	-0.44
000050-22-6	0.61	000057-83-0	0.30	000076-43-7	0.07
000050-23-7	-0.35	000057-85-2	0.11	000076-54-0	0.33
000050-24-8	-0.28	000057-91-0	1.08	000076-60-8	-0.25
000050-27-1	1.16	000057-97-6	-0.24	000077-08-7	0.84
000050-28-2	1.10	000058-18-4	-0.14	000077-09-8	-0.40
000050-33-9	0.02	000058-22-0	0.14	000077-40-7	-0.10
000050-34-0	0.96	000058-64-0	0.67	000077-53-2	-0.33
000050-37-3	-0.09	000058-72-0	0.18	000078-32-0	-0.09
000050-41-9	1.14	000058-74-2	-0.04	000078-33-1	0.62
000050-49-7	-0.25	000059-02-9	0.76	000079-96-9	-0.16
000050-50-0	-0.02	000060-02-6	0.40	000079-97-0	0.08
000050-53-3	-0.27	000060-81-1	-0.33	000080-02-4	-0.04
000051-60-5	-0.30	000060-99-1	-0.08	000080-04-6	0.00
000052-39-1	0.41	000061-00-7	-0.19	000080-05-7	-0.26
000052-76-6	0.39	000061-19-8	-0.36	000080-49-9	-0.25
000052-78-8	-0.24	000061-25-6	0.00	000080-75-1	-0.13
000052-88-0	-0.34	000061-73-4	-0.04	000081-14-1	-0.16
000053-02-1	0.57	000063-01-4	1.16	000081-26-5	0.89
000053-03-2	-0.03	000064-85-7	0.62	000081-37-8	-0.02
000053-06-5	0.20	000064-86-8	0.55	000081-45-8	-0.22
000053-16-7	0.60	000065-19-0	0.17	000081-92-5	-0.20
000053-36-1	0.06	000065-28-1	-0.01	000081-95-8	0.72
000053-41-8	0.32	000067-03-8	0.17	000082-08-6	1.28
000053-42-9	-0.02	000067-96-9	1.78	000082-21-3	-0.08
000053-43-0	0.27	000067-97-0	0.87	000082-22-4	0.24
000053-70-3	-0.21	000067-99-2	-0.15	000083-43-2	0.17
000053-84-9	-0.22	000068-22-4	0.19	000083-44-3	-0.15
000054-28-4	0.13	000068-26-8	0.15	000083-63-6	-0.44
000056-47-3	0.12	000069-33-0	-0.11	000083-80-7	-0.14
000056-49-5	0.03	000072-33-3	-0.07	000083-88-5	-0.05
000056-53-1	0.70	000074-31-7	-0.39	000084-15-1	-0.42

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
000084-16-2	0.22	000097-56-3	-0.27	000127-47-9	-0.21
000084-17-3	0.56	000098-29-3	-0.18	000128-20-1	0.22
000084-19-5	0.29	000100-93-6	-0.15	000128-23-4	0.25
000084-24-2	0.44	000101-01-9	-0.02	000128-62-1	0.69
000084-62-8	-0.41	000101-02-0	-0.34	000128-80-3	0.25
000084-80-0	0.13	000101-61-1	-0.38	000128-87-0	0.10
000085-00-7	0.18	000102-02-3	0.31	000128-88-1	0.77
000085-60-9	-0.06	000103-96-8	-0.17	000129-73-7	0.24
000085-83-6	-0.09	000113-52-0	-0.26	000130-80-3	0.25
000085-86-9	-0.16	000115-40-2	0.25	000131-22-6	-0.30
000086-44-2	0.10	000115-41-3	-0.38	000131-55-5	-0.31
000087-03-6	0.03	000116-31-4	0.57	000132-68-3	-0.04
000088-24-4	-0.26	000116-34-7	-0.33	000134-28-1	-0.37
000089-43-0	-0.14	000116-66-5	-0.42	000135-57-9	0.16
000089-88-3	-0.03	000116-71-2	-0.03	000135-61-5	-0.35
000090-18-6	0.97	000116-96-1	0.20	000137-52-0	-0.26
000090-66-4	0.05	000117-92-0	1.09	000139-07-1	-0.24
000090-68-6	0.96	000118-08-1	0.29	000139-60-6	-0.23
000091-53-2	-0.32	000118-56-9	-0.16	000140-57-8	0.34
000091-73-6	-0.41	000119-13-1	0.09	000140-64-7	4.06
000091-78-1	0.31	000119-47-1	-0.30	000140-66-9	-0.34
000092-06-8	-0.39	000119-90-4	-0.31	000140-72-7	0.24
000092-21-7	0.52	000119-93-7	-0.38	000143-62-4	0.79
000092-29-5	0.04	000121-06-2	0.68	000143-74-8	-0.06
000092-31-9	0.40	000121-54-0	0.32	000144-55-8	2.84
000092-32-0	-0.03	000122-11-2	0.10	000145-13-1	0.67
000092-72-8	-0.39	000123-03-5	0.24	000145-14-2	0.07
000092-75-1	-0.41	000124-94-7	-0.04	000145-15-3	0.34
000093-23-2	-0.09	000125-02-0	0.81	000145-50-6	0.54
000093-45-8	-0.15	000125-28-0	0.00	000146-48-5	0.17
000093-46-9	0.36	000125-31-5	0.83	000146-68-9	0.16
000093-69-6	1.13	000125-73-5	-0.40	000146-77-0	0.49
000096-66-2	-0.11	000126-07-8	-0.37	000150-86-7	-0.28
000096-69-5	0.03	000127-31-1	0.14	000151-73-5	1.12

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
000152-11-4	0.40	000382-67-2	0.32	000479-23-2	-0.35
000152-43-2	-0.42	000434-03-7	0.11	000479-33-4	0.51
000152-58-9	0.38	000434-07-1	-0.09	000479-98-1	-0.26
000153-00-4	0.22	000434-13-9	-0.34	000480-16-0	-0.35
000153-18-4	1.60	000434-22-0	0.12	000480-18-2	-0.34
000155-41-9	-0.09	000434-85-5	0.50	000480-44-4	-0.33
000189-55-9	0.00	000437-38-7	-0.26	000481-29-8	0.33
000189-64-0	-0.17	000437-50-3	-0.27	000481-30-1	0.39
000191-24-2	-0.12	000438-07-3	0.64	000481-53-8	-0.32
000191-30-0	-0.43	000442-16-0	0.05	000483-04-5	-0.39
000192-65-4	0.15	000446-72-0	-0.24	000485-72-3	-0.20
000192-97-2	-0.27	000458-37-7	-0.09	000486-66-8	-0.18
000198-55-0	-0.37	000463-79-6	2.84	000487-24-1	-0.12
000226-36-8	-0.41	000464-72-2	-0.39	000489-86-1	0.04
000298-14-6	2.84	000465-39-4	0.84	000490-46-0	0.78
000298-93-1	0.36	000466-09-1	0.79	000491-80-5	-0.26
000298-96-4	0.19	000467-62-9	-0.38	000493-77-6	-0.40
000302-79-4	-0.40	000470-55-3	0.28	000497-19-8	2.84
000302-95-4	-0.15	000471-34-1	2.84	000497-76-7	-0.12
000303-49-1	-0.24	000471-77-2	0.36	000500-38-9	0.92
000304-28-9	0.23	000472-41-3	0.02	000501-24-6	-0.22
000313-06-4	0.77	000472-54-8	-0.39	000509-34-2	0.85
000314-19-2	-0.14	000472-86-6	0.35	000510-13-4	0.06
000315-22-0	-0.25	000473-15-4	-0.41	000511-09-1	-0.08
000357-57-3	0.15	000474-07-7	0.93	000511-15-9	0.11
000362-05-0	1.91	000474-86-2	0.32	000513-77-9	2.84
000362-06-1	1.21	000475-25-2	-0.40	000513-78-0	2.84
000362-07-2	0.49	000475-91-2	-0.14	000513-79-1	2.84
000362-08-3	0.05	000476-32-4	-0.23	000514-17-0	0.11
000378-44-9	-0.17	000476-66-4	-0.38	000514-73-8	1.01
000379-68-0	0.20	000476-70-0	0.19	000514-85-2	-0.41
000379-79-3	0.82	000477-30-5	-0.21	000516-15-4	0.00
000382-44-5	-0.42	000477-73-6	2.09	000516-54-1	0.51
000382-45-6	-0.36	000479-13-0	0.25	000517-09-9	0.15

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
000517-28-2	0.48	000548-73-2	-0.42	000603-45-2	0.14
000518-20-7	-0.16	000549-18-8	-0.34	000603-48-5	-0.27
000518-28-5	0.15	000550-15-2	1.63	000603-50-9	-0.32
000519-34-6	0.00	000550-33-4	0.03	000604-53-5	-0.08
000520-12-7	0.01	000550-70-9	0.03	000604-59-1	-0.35
000520-33-2	-0.36	000554-13-2	2.84	000606-86-0	-0.42
000520-34-3	-0.13	000554-73-4	-0.36	000606-91-7	-0.20
000520-85-4	-0.02	000563-04-2	0.40	000612-71-5	-0.11
000521-10-8	1.02	000565-20-8	-0.30	000612-82-8	-0.38
000521-11-9	0.18	000566-48-3	0.03	000613-35-4	-0.17
000521-17-5	0.80	000569-57-3	1.21	000620-42-8	0.02
000521-18-6	0.55	000569-61-9	0.16	000622-21-9	0.44
000521-35-7	-0.43	000571-20-0	0.83	000632-51-9	0.68
000521-78-8	-0.39	000574-45-8	-0.03	000633-65-8	0.72
000522-12-3	-0.21	000574-61-8	0.43	000634-21-9	1.08
000526-08-9	-0.12	000580-35-8	-0.06	000635-11-0	-0.08
000528-48-3	-0.06	000581-64-6	0.11	000642-04-6	-0.21
000530-14-3	-0.35	000584-08-7	2.84	000643-84-5	1.54
000531-52-2	0.47	000584-09-8	2.84	000659-22-3	-0.12
000531-91-9	0.16	000584-42-9	-0.40	000734-32-7	-0.38
000531-95-3	-0.20	000584-59-8	-0.31	000738-70-5	-0.27
000532-43-4	0.17	000587-98-4	-0.30	000739-27-5	-0.17
000533-96-0	2.84	000596-03-2	0.22	000739-71-9	-0.25
000534-17-8	2.84	000596-09-8	0.01	000749-02-0	-0.34
000537-01-9	2.84	000596-27-0	0.21	000785-30-8	-0.34
000538-28-3	0.03	000598-62-9	2.84	000791-69-5	0.24
000538-58-9	-0.26	000598-63-0	2.84	000797-63-7	-0.15
000538-71-6	-0.22	000599-64-4	-0.37	000834-24-2	-0.31
000544-47-8	-0.37	000599-79-1	-0.28	000834-28-6	0.81
000545-26-6	0.65	000600-57-7	0.00	000846-46-8	-0.36
000546-93-0	2.84	000601-57-0	0.08	000846-48-0	-0.15
000547-81-9	0.93	000602-09-5	-0.10	000846-63-9	-0.38
000548-37-8	-0.32	000602-55-1	-0.32	000853-23-6	0.00
000548-62-9	1.11	000603-34-9	-0.38	000859-65-4	-0.03

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
000862-26-0	0.08	001100-88-5	-0.32	001460-02-2	-0.26
000889-37-2	-0.42	001113-21-9	-0.07	001464-44-4	0.14
000895-37-4	0.05	001119-34-2	-0.41	001474-53-9	-0.21
000897-06-3	-0.40	001150-62-5	-0.27	001476-34-2	0.59
000897-78-9	-0.09	001153-51-1	0.71	001482-70-8	-0.12
000901-56-4	0.71	001158-94-7	0.22	001485-92-3	-0.13
000901-93-9	-0.42	001159-53-1	0.49	001498-88-0	-0.39
000905-96-4	0.70	001162-53-4	0.87	001499-10-1	0.25
000906-83-2	0.00	001162-56-7	-0.03	001520-42-9	-0.28
000908-54-3	1.51	001165-14-6	0.83	001533-45-5	0.52
000911-77-3	1.35	001166-52-5	0.36	001552-42-7	0.47
000963-74-6	-0.28	001169-54-6	0.10	001576-13-2	-0.30
000963-89-3	-0.30	001173-26-8	-0.23	001607-57-4	0.32
000974-23-2	0.54	001222-05-5	0.09	001617-90-9	-0.11
000975-17-7	-0.27	001224-92-6	0.60	001620-68-4	-0.39
000976-56-7	-0.16	001224-95-9	-0.11	001624-62-0	-0.05
000976-71-6	0.52	001225-43-0	0.36	001662-01-7	-0.09
000977-96-8	0.81	001229-24-9	0.99	001668-19-5	-0.30
000978-86-9	0.12	001229-29-4	-0.22	001672-46-4	0.26
000979-02-2	-0.22	001231-82-9	-0.04	001674-18-6	0.93
000985-13-7	0.65	001231-93-2	0.95	001675-54-3	0.03
000989-38-8	0.23	001234-35-1	0.43	001684-14-6	-0.27
001034-01-1	0.54	001236-72-2	0.74	001689-73-2	-0.45
001038-95-5	-0.30	001239-79-8	0.30	001696-60-2	0.24
001045-69-8	0.13	001249-97-4	0.46	001705-85-7	-0.33
001046-56-6	-0.08	001251-85-0	-0.03	001707-75-1	0.01
001056-77-5	0.60	001255-49-8	-0.43	001733-12-6	0.30
001058-71-5	0.26	001320-06-5	0.47	001740-19-8	0.06
001081-09-0	-0.37	001330-78-5	0.18	001742-14-9	-0.16
001087-26-9	-0.03	001424-00-6	0.62	001778-02-5	-0.09
001096-38-4	0.22	001434-54-4	0.24	001784-04-9	1.12
001096-80-6	0.19	001438-66-0	0.63	001801-42-9	0.16
001097-51-4	0.26	001446-61-3	-0.38	001806-34-4	-0.15
001099-45-2	-0.34	001450-63-1	0.92	001817-68-1	0.01

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
001830-77-9	-0.34	002387-03-3	0.09	003166-00-5	0.23
001841-19-6	-0.22	002390-54-7	-0.13	003179-89-3	-0.43
001852-53-5	0.60	002390-59-2	0.80	003230-39-5	-0.28
001919-48-8	0.96	002392-39-4	-0.25	003232-36-8	-0.14
001942-71-8	-0.27	002398-96-1	-0.36	003236-71-3	-0.12
001943-97-1	1.05	002416-30-0	-0.35	003253-39-2	-0.32
001944-12-3	-0.43	002425-85-6	-0.26	003326-32-7	-0.09
001948-92-1	-0.42	002456-45-3	0.43	003326-34-9	-0.32
001972-08-3	0.36	002486-02-4	-0.23	003351-30-2	-0.42
001973-05-3	0.02	002492-87-7	-0.32	003379-38-2	-0.17
002016-88-8	-0.01	002498-50-2	-0.33	003416-26-0	-0.14
002026-24-6	-0.38	002512-29-0	-0.12	003521-06-0	1.84
002030-63-9	-0.24	002582-07-2	0.52	003558-69-8	-0.42
002062-78-4	-0.29	002605-67-6	-0.37	003564-15-6	0.50
002079-00-7	0.26	002622-26-6	-0.25	003564-22-5	0.57
002081-08-5	-0.31	002624-43-3	0.15	003569-18-4	-0.30
002090-82-6	-0.07	002650-17-1	-0.02	003572-80-3	-0.33
002132-70-9	-0.35	002657-25-2	-0.26	003648-36-0	0.60
002135-17-3	0.14	002734-52-3	0.56	003650-09-7	-0.41
002140-67-2	0.20	002752-19-4	0.97	003682-35-7	-0.40
002150-48-3	0.39	002814-77-9	-0.37	003691-35-8	-0.42
002162-74-5	0.38	002955-38-6	-0.26	003697-24-3	-0.11
002175-90-8	-0.44	002959-74-2	-0.31	003704-09-4	0.22
002185-86-6	1.90	002985-59-3	-0.23	003717-88-2	0.25
002192-20-3	-0.21	003010-57-9	-0.19	003734-33-6	0.33
002196-14-7	-0.11	003016-97-5	-0.32	003770-82-9	-0.26
002197-01-5	0.37	003027-01-8	0.29	003808-20-6	-0.45
002208-12-0	0.24	003029-32-1	-0.32	003846-71-7	0.25
002218-94-2	-0.02	003065-79-0	0.71	003856-05-1	-0.41
002299-73-2	-0.18	003071-70-3	1.76	003864-99-1	0.39
002303-01-7	0.57	003073-87-8	-0.07	003896-11-5	-0.37
002312-35-8	-0.37	003085-82-3	-0.14	003905-64-4	-0.25
002320-96-9	0.26	003116-76-5	-0.06	003924-22-9	1.04
002381-39-7	-0.27	003147-53-3	0.00	003930-19-6	-0.43

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
004181-05-9	-0.31	005392-67-6	-0.24	006408-63-5	-0.05
004197-25-5	0.91	005418-95-1	0.44	006408-72-6	0.00
004208-80-4	1.15	005421-66-9	0.58	006421-30-3	-0.07
004213-45-0	-0.26	005442-32-0	-0.20	006441-82-3	1.11
004270-70-6	-0.21	005486-84-0	0.11	006665-86-7	-0.04
004306-88-1	0.07	005591-45-7	-0.14	006708-61-8	0.50
004403-20-7	-0.16	005613-46-7	0.12	006709-58-6	0.02
004403-89-8	0.06	005623-04-1	-0.44	006736-85-2	0.11
004424-03-7	0.27	005631-70-9	-0.42	006737-42-4	-0.20
004428-13-1	-0.23	005663-04-7	-0.32	006738-04-1	-0.35
004438-16-8	-0.44	005786-21-0	-0.16	006807-17-6	-0.07
004441-01-4	0.04	005836-29-3	0.00	006922-60-7	1.10
004449-43-8	-0.38	005957-75-5	-0.36	007200-25-1	-0.36
004477-79-6	0.01	005965-66-2	-0.23	007298-65-9	0.67
004478-76-6	-0.34	006035-94-5	0.24	007320-34-5	0.08
004546-55-8	-0.27	006044-30-0	0.53	007423-31-6	0.86
004546-72-9	-0.14	006051-87-2	-0.40	007477-67-0	0.30
004602-84-0	-0.37	006052-15-9	-0.35	007478-69-5	-0.29
004657-00-5	1.47	006054-48-4	-0.30	007507-01-9	0.40
004678-45-9	-0.29	006088-51-3	0.27	007559-04-8	-0.17
004695-14-1	-0.29	006098-53-9	-0.33	007650-89-7	-0.25
004733-39-5	0.58	006106-46-3	-0.09	007650-91-1	-0.38
004792-83-0	-0.43	006153-92-0	-0.01	007688-25-7	-0.15
004928-02-3	-0.26	006163-58-2	-0.27	007695-91-2	0.15
004940-45-8	-0.26	006219-89-2	-0.42	007727-33-5	1.03
005007-67-0	-0.36	006224-63-1	-0.02	007757-83-7	0.41
005051-62-7	0.65	006232-57-1	0.09	007757-87-1	-0.21
005102-79-4	-0.43	006253-10-7	0.06	007758-87-4	-0.21
005129-00-0	-0.21	006271-79-0	-0.11	007773-03-7	0.41
005150-50-5	-0.18	006300-37-4	-0.30	007778-53-2	-0.21
005153-25-3	-0.32	006318-17-8	0.09	007779-90-0	-0.21
005232-99-5	-0.34	006358-31-2	0.29	007782-99-2	0.41
005284-79-7	0.22	006361-29-1	0.12	007784-09-0	-0.21
005355-16-8	-0.44	006368-72-5	0.08	007784-30-7	-0.21

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
007798-23-4	-0.21	013465-98-0	0.41	018846-91-8	0.24
008003-34-7	-0.27	013477-17-3	-0.21	019074-59-0	0.28
008004-87-3	1.11	013597-44-9	0.41	019237-84-4	-0.06
010045-86-0	-0.21	013680-35-8	-0.26	019274-72-7	0.51
010048-13-2	-0.39	014132-84-4	-0.09	019356-17-3	0.35
010081-67-1	0.73	014214-32-5	-0.27	019764-96-6	2.34
010114-58-6	-0.33	014233-37-5	-0.15	019900-69-7	-0.19
010117-38-1	0.41	014263-94-6	1.25	020282-70-6	1.25
010124-31-9	-0.21	014414-32-5	0.41	020325-40-0	-0.28
010161-34-9	-0.33	014521-96-1	-0.15	020364-09-4	0.52
010191-41-0	-0.02	014590-13-7	-0.21	020426-12-4	-0.43
010192-30-0	0.41	014806-50-9	0.97	020440-93-1	-0.32
010196-04-0	0.41	014807-75-1	-0.34	020440-95-3	-0.08
010304-39-9	-0.36	014926-29-5	-0.16	020721-50-0	-0.38
010377-52-3	-0.21	014934-37-3	0.81	020725-03-5	-0.42
010418-03-8	0.72	014984-21-5	0.21	020772-23-0	-0.18
010482-79-8	-0.36	015082-28-7	-0.19	020818-25-1	0.10
010526-07-5	0.47	015185-43-0	1.83	021145-77-7	0.35
010540-29-1	1.51	015299-99-7	-0.36	021255-69-6	0.15
012270-13-2	1.21	015676-16-1	-0.26	021637-25-2	1.26
013080-86-9	1.26	015940-86-0	-0.22	021888-98-2	-0.35
013080-89-2	0.42	016178-48-6	0.67	022287-56-5	-0.36
013161-28-9	0.23	016766-09-9	-0.07	022395-24-0	-0.28
013171-00-1	-0.35	016803-97-7	-0.24	022494-42-4	-0.32
013245-90-4	0.23	017051-01-3	-0.09	022525-43-5	-0.03
013280-61-0	0.69	017230-88-5	0.69	023001-29-8	0.58
013285-10-4	0.19	017321-77-6	-0.24	023060-42-6	-0.20
013288-70-5	-0.19	017540-75-9	-0.21	023110-15-8	-0.44
013401-40-6	-0.03	017610-24-1	0.16	023239-51-2	-0.39
013403-01-5	-0.28	017615-73-5	-0.29	023582-02-7	0.07
013450-99-2	-0.21	017816-11-4	-0.29	023807-28-5	-0.07
013451-02-0	0.41	017924-92-4	-0.35	023941-48-2	1.06
013455-36-2	-0.21	018434-12-3	0.23	024136-83-2	1.11
013464-24-9	0.26	018524-94-2	0.26	024140-30-5	0.40

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
024316-19-6	-0.21	033345-17-4	0.37	051595-91-6	-0.39
024447-78-7	-0.10	033854-16-9	-0.14	052078-66-7	1.37
025152-49-2	1.60	034084-50-9	-0.15	052125-43-6	-0.20
025312-34-9	-0.41	034140-59-5	-0.27	052210-18-1	-0.40
025425-12-1	0.26	034562-31-7	-0.32	053213-82-4	1.41
025973-55-1	-0.13	034661-75-1	-0.29	053340-16-2	0.84
026002-80-2	-0.05	036148-59-1	3.82	053817-44-0	-0.40
026227-73-6	-0.26	036536-22-8	1.37	054395-52-7	1.00
026266-77-3	0.48	036557-05-8	-0.23	054464-57-2	-0.37
026444-49-5	-0.07	037248-47-8	1.25	055179-31-2	-0.35
026544-23-0	-0.19	037599-83-0	0.04	055285-14-8	-0.38
026846-41-3	-0.22	037832-65-8	0.15	055290-05-6	1.16
027580-14-9	0.19	038103-06-9	0.78	055741-10-1	-0.33
027766-45-6	-0.37	038304-91-5	-0.35	055760-09-3	-0.20
027969-56-8	-0.02	038594-96-6	0.16	056073-10-0	-0.26
028573-66-2	0.03	039123-82-5	0.70	056114-47-7	-0.41
028772-56-7	0.29	039201-42-8	-0.17	056356-15-1	-0.30
028911-01-5	-0.37	039515-40-7	-0.36	056406-50-9	0.03
029036-02-0	0.13	039604-29-0	0.16	056701-24-7	-0.29
029743-08-6	-0.37	040013-87-4	0.96	056803-37-3	-0.02
029761-21-5	-0.41	040070-59-5	0.37	057609-72-0	1.31
029854-52-2	-0.40	040427-75-6	-0.18	057808-65-8	-0.06
030203-11-3	-0.18	041294-56-8	0.50	057835-99-1	-0.17
030457-67-1	0.84	041295-28-7	-0.30	057893-27-3	-0.36
030633-94-4	-0.43	041729-43-5	1.09	057900-42-2	-0.21
031580-45-7	0.82	042373-04-6	1.23	058243-85-9	-0.34
031605-03-5	-0.31	042891-16-7	-0.24	058243-87-1	-0.44
032222-06-3	0.98	043061-75-2	0.65	058969-01-0	0.35
032383-76-9	-0.05	045016-95-3	-0.28	060241-55-6	-0.44
032388-55-9	0.34	047300-91-4	0.80	060354-76-9	-0.14
032638-88-3	0.26	050543-78-7	-0.45	060628-96-8	-0.19
033089-61-1	0.27	050679-08-8	0.50	060869-68-3	-0.35
033203-82-6	0.21	051123-09-2	0.02	062625-21-2	0.25
033229-34-4	-0.43	051325-91-8	0.03	062625-22-3	0.02

CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA	CAS 番号	推算 logRBA
062625-29-0	-0.28	068555-55-5	-0.44	106246-33-7	0.20
062669-60-7	-0.35	068716-15-4	0.72	106917-31-1	0.17
062669-66-3	-0.04	068845-02-3	-0.12	109423-33-8	1.57
062669-75-4	-0.43	068921-79-9	1.88	110488-70-5	0.56
062669-77-6	-0.39	069014-14-8	0.65	111075-94-6	-0.22
063041-90-7	-0.21	069409-94-5	-0.03	111753-62-9	-0.16
063134-09-8	0.30	070124-77-5	0.01	111812-58-9	0.31
063134-29-2	0.20	070321-86-7	0.67	111872-58-3	0.50
063148-81-2	1.12	070356-09-1	-0.27	111991-09-4	-0.41
063148-98-1	0.80	070729-59-8	-0.30	112410-23-8	0.51
063226-13-1	-0.13	070851-60-4	-0.14	119446-68-3	-0.13
063407-54-5	-0.10	071215-81-1	-0.22	127519-17-9	-0.20
063549-51-9	0.92	071561-11-0	-0.22	131860-33-8	-0.28
063675-72-9	-0.43	071626-11-4	-0.20	137085-37-1	-0.36
063837-33-2	-0.29	072814-85-8	1.46		
063870-30-4	0.54	072906-30-0	1.14		
063870-31-5	0.85	073276-70-7	0.94		
063870-45-1	1.15	073573-88-3	0.15		
063935-38-6	-0.24	074050-98-9	-0.21		
066072-38-6	-0.24	075330-75-5	0.11		
066441-23-4	-0.36	076350-90-8	-0.24		
067485-29-4	0.64	076824-35-6	0.73		
067801-08-5	-0.34	077883-43-3	0.66		
067801-20-1	-0.38	078617-12-6	-0.05		
067801-36-9	-0.14	080060-09-9	-0.18		
067859-71-6	-0.21	080844-07-1	0.29		
067952-50-5	-0.39	082211-24-3	-0.23		
068015-60-1	0.39	083164-33-4	0.00		
068140-48-7	0.15	083846-85-9	-0.02		
068189-23-1	0.22	087818-31-3	-0.40		
068359-37-5	-0.24	087820-88-0	-0.26		
068443-35-6	-0.34	088107-10-2	0.01		
068527-78-6	0.36	098319-26-7	0.37		
068527-98-0	0.28	103079-11-4	1.11		

表 4. 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