

SM01_pKa1

SM02_pKa1

SM03_pKa1

SM04_pKa1

SM05_pKa1

SM06_pKa1

SM06_pKa2

SM07_pKa1

SM08_pKa1

SM09_pKa1

SM10_pKa1

SM11_pKa1

SM12_pKa1

SM13_pKa1

SM14_pKa1

SM14_pKa2

SM15_pKa1

SM15_pKa2

SM16_pKa1

SM16_pKa2

SM17_pKa1

SM18_pKa1

SM18_pKa2

SM18_pKa3

SM19_pKa1

SM20_pKa1

SM21_pKa1

SM22_pKa1

SM22_pKa2

SM23_pKa1

SM24_pKa1

-10

0

10

20

 Δ pKa error (calc - exp)