

surface	fcc	ua_sca	charmm_sca	availability	SMILES
Fe2O3	001	ALA	ALA	True	C
Fe2O3	001	ARG	ARG	True	CCCNC(N)=[NH2+]
Fe2O3	001	ASN	ASN	True	CC(N)=O
Fe2O3	001	ASP	ASP	True	CC(=O)[O-]
Fe2O3	001	AAN	ASPP	False	CC(=O)O
Fe2O3	001	CYM	CYM	True	C[S-]
Fe2O3	001	CYS	CYS	True	CS
Fe2O3	001	GLN	GLN	True	CCC(N)=O
Fe2O3	001	GLU	GLU	True	CC(=O)[O-]
Fe2O3	001	GAN	GLUP	True	CCC(=O)O
Fe2O3	001	GLY	GLY	True	C
Fe2O3	001	HIS	HIS	True	CC1CNCN1
Fe2O3	001	HID	HSD	True	CC1CNCN1
Fe2O3	001	HIE	HSE	True	CC1CNCN1
Fe2O3	001	HIP	HSP	True	CC1CNCN1
Fe2O3	001	ILE	ILE	True	CCCC
Fe2O3	001	LEU	LEU	True	CC(C)C
Fe2O3	001	LYS	LYS	True	CCCC[NH3+]
Fe2O3	001	MET	MET	True	CC5C
Fe2O3	001	PHE	PHE	True	CC1CCCCC1
Fe2O3	001	PRO	PRO	True	CCC
Fe2O3	001	SER	SER	True	CO
Fe2O3	001	THR	THR	True	CCO
Fe2O3	001	TRP	TRP	True	CC1C[NH]C2CCCCC12
Fe2O3	001	TYR	TYR	True	CC1CCC(O)CC1
Fe2O3	001	VAL	VAL	True	CCC