

surface	fcc	ua_sca	charmm_sca	availability	SMILES
TiO2_Anatase	100	ALA	ALA	True	C
TiO2_Anatase	100	ARG	ARG	True	CCCNC(N)=[NH2+]
TiO2_Anatase	100	ASN	ASN	True	CC(N)=O
TiO2_Anatase	100	ASP	ASP	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Anatase	100	AAN	ASPP	False	CC(=O)O
TiO2_Anatase	100	CYM	CYM	True	C[S-]
TiO2_Anatase	100	CYS	CYS	True	CS
TiO2_Anatase	100	GLN	GLN	True	CCC(N)=O
TiO2_Anatase	100	GLU	GLU	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Anatase	100	GAN	GLUP	True	CCC(=O)O
TiO2_Anatase	100	GLY	GLY	True	C
TiO2_Anatase	100	HIS	HIS	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	100	HID	HSD	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	100	HIE	HSE	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	100	HIP	HSP	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	100	ILE	ILE	True	CCCC
TiO2_Anatase	100	LEU	LEU	True	CC(C)C
TiO2_Anatase	100	LYS	LYS	True	CCCC[NH3+]
TiO2_Anatase	100	MET	MET	True	CCSC
TiO2_Anatase	100	PHE	PHE	True	CC1CCCCC1
TiO2_Anatase	100	PRO	PRO	True	CCC
TiO2_Anatase	100	SER	SER	True	CO
TiO2_Anatase	100	THR	THR	True	CCO
TiO2_Anatase	100	TRP	TRP	True	CC1C[NH]C2CCCCC12
TiO2_Anatase	100	TYR	TYR	True	CC1CCC(O)CC1
TiO2_Anatase	100	VAL	VAL	True	CCC
TiO2_Anatase	101	ALA	ALA	True	C
TiO2_Anatase	101	ARG	ARG	True	CCCNC(N)=[NH2+]
TiO2_Anatase	101	ASN	ASN	True	CC(N)=O
TiO2_Anatase	101	ASP	ASP	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Anatase	101	AAN	ASPP	False	CC(=O)O
TiO2_Anatase	101	CYM	CYM	True	C[S-]
TiO2_Anatase	101	CYS	CYS	True	CS
TiO2_Anatase	101	GLN	GLN	True	CCC(N)=O
TiO2_Anatase	101	GLU	GLU	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Anatase	101	GAN	GLUP	True	CCC(=O)O
TiO2_Anatase	101	GLY	GLY	True	C
TiO2_Anatase	101	HIS	HIS	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	101	HID	HSD	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	101	HIE	HSE	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	101	HIP	HSP	True	CC1CNCN1
TiO2_Anatase	101	ILE	ILE	True	CCCC
TiO2_Anatase	101	LEU	LEU	True	CC(C)C
TiO2_Anatase	101	LYS	LYS	True	CCCC[NH3+]
TiO2_Anatase	101	MET	MET	True	CCSC
TiO2_Anatase	101	PHE	PHE	True	CC1CCCCC1
TiO2_Anatase	101	PRO	PRO	True	CCC
TiO2_Anatase	101	SER	SER	True	CO
TiO2_Anatase	101	THR	THR	True	CCO
TiO2_Anatase	101	TRP	TRP	True	CC1C[NH]C2CCCCC12
TiO2_Anatase	101	TYR	TYR	True	CC1CCC(O)CC1
TiO2_Anatase	101	VAL	VAL	True	CCC