

surface	fcc	ua_sca	charmm_sca	availability	SMILES
TiO2_Rutile	100	ALA	ALA	True	C
TiO2_Rutile	100	ARG	ARG	True	CCCNC(N)=[NH2+]
TiO2_Rutile	100	ASN	ASN	True	CC(N)=O
TiO2_Rutile	100	ASP	ASP	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Rutile	100	AAN	ASPP	False	CC(=O)O
TiO2_Rutile	100	CYM	CYM	True	C[S-]
TiO2_Rutile	100	CYS	CYS	True	CS
TiO2_Rutile	100	GLN	GLN	True	CCC(N)=O
TiO2_Rutile	100	GLU	GLU	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Rutile	100	GAN	GLUP	True	CCC(=O)O
TiO2_Rutile	100	GLY	GLY	True	C
TiO2_Rutile	100	HIS	HIS	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	100	HID	HSD	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	100	HIE	HSE	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	100	HIP	HSP	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	100	ILE	ILE	True	CCCC
TiO2_Rutile	100	LEU	LEU	True	CC(C)C
TiO2_Rutile	100	LYS	LYS	True	CCCC[NH3+]
TiO2_Rutile	100	MET	MET	True	CC5C
TiO2_Rutile	100	PHE	PHE	True	CC1CCCCC1
TiO2_Rutile	100	PRO	PRO	True	CCC
TiO2_Rutile	100	SER	SER	True	CO
TiO2_Rutile	100	THR	THR	True	CCO
TiO2_Rutile	100	TRP	TRP	True	CC1C[NH]C2CCCCC12
TiO2_Rutile	100	TYR	TYR	True	CC1CCC(O)CC1
TiO2_Rutile	100	VAL	VAL	True	CCC
TiO2_Rutile	110	ALA	ALA	True	C
TiO2_Rutile	110	ARG	ARG	True	CCCNC(N)=[NH2+]
TiO2_Rutile	110	ASN	ASN	True	CC(N)=O
TiO2_Rutile	110	ASP	ASP	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Rutile	110	AAN	ASPP	False	CC(=O)O
TiO2_Rutile	110	CYM	CYM	True	C[S-]
TiO2_Rutile	110	CYS	CYS	True	CS
TiO2_Rutile	110	GLN	GLN	True	CCC(N)=O
TiO2_Rutile	110	GLU	GLU	True	CC(=O)[O-]
TiO2_Rutile	110	GAN	GLUP	True	CCC(=O)O
TiO2_Rutile	110	GLY	GLY	True	C
TiO2_Rutile	110	HIS	HIS	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	110	HID	HSD	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	110	HIE	HSE	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	110	HIP	HSP	True	CC1CNCN1
TiO2_Rutile	110	ILE	ILE	True	CCCC
TiO2_Rutile	110	LEU	LEU	True	CC(C)C
TiO2_Rutile	110	LYS	LYS	True	CCCC[NH3+]
TiO2_Rutile	110	MET	MET	True	CC5C
TiO2_Rutile	110	PHE	PHE	True	CC1CCCCC1
TiO2_Rutile	110	PRO	PRO	True	CCC
TiO2_Rutile	110	SER	SER	True	CO
TiO2_Rutile	110	THR	THR	True	CCO
TiO2_Rutile	110	TRP	TRP	True	CC1C[NH]C2CCCCC12
TiO2_Rutile	110	TYR	TYR	True	CC1CCC(O)CC1
TiO2_Rutile	110	VAL	VAL	True	CCC