|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| #Atom | atomicfluct\_byatom | #Res | atomicfluct\_byres | ATOM      1  N   GLY A 171       6.051   3.937  10.438  1.00 42.81           N1+ |
| 2 | 142.6051 | 1 | 114.1471 | ATOM      2  CA  GLY A 171       4.779   4.108   9.759  1.00 32.15           C |
| 3 | 143.4394 | 2 | 28.7242 | ATOM      3  C   GLY A 171       3.640   3.323  10.383  1.00 19.83           C |
| 4 | 142.8212 | 3 | 37.9309 | ATOM      4  O   GLY A 171       3.824   2.531  11.310  1.00 27.74           O |
| 6 | 69.2032 | 4 | 29.1104 | ATOM      5  HA2 GLY A 171       4.539   5.048   9.767  1.00 38.58           H |
| 7 | 72.6666 | 5 | 37.6553 | ATOM      6  HA3 GLY A 171       4.871   3.826   8.835  1.00 38.58           H |
| 14 | 14.1067 | 6 | 22.1069 | ATOM      7  N   ASP A 172       2.445   3.561   9.850  1.00 15.99           N |
| 15 | 19.7028 | 7 | 35.5631 | ATOM      8  CA  ASP A 172       1.216   2.928  10.304  1.00 15.83           C |
| 16 | 17.6406 | 8 | 6.8956 | ATOM      9  C   ASP A 172       1.093   1.510   9.699  1.00 12.28           C |
| 17 | 12.7972 | 9 | 20.1038 | ATOM     10  O   ASP A 172       0.821   1.376   8.501  1.00 13.61           O |
| 18 | 52.2442 | 10 | 37.7367 | ATOM     11  CB  ASP A 172       0.065   3.834   9.836  1.00 17.97           C |
| 19 | 29.3983 | 11 | 16.4365 | ATOM     12  CG  ASP A 172      -1.296   3.351  10.265  1.00 22.19           C |
| 26 | 16.7257 |  | | ATOM     13  OD1 ASP A 172      -1.395   2.210  10.733  1.00 19.08           O |
| 27 | 20.907 |  | | ATOM     14  OD2 ASP A 172      -2.281   4.118  10.119  1.00 26.85           O1- |
| 28 | 19.1486 |  | | ATOM     15  H   ASP A 172       2.319   4.109   9.199  1.00 19.19           H |
| 29 | 21.1538 |  | | ATOM     16  HA  ASP A 172       1.205   2.866  11.282  1.00 19.00           H |
| 30 | 28.0041 |  | | ATOM     17  HB2 ASP A 172       0.196   4.721  10.206  1.00 21.57           H |
| 31 | 22.5693 |  | | ATOM     18  HB3 ASP A 172       0.074   3.876   8.867  1.00 21.57           H |
| 32 | 25.1447 |  | | ATOM     19  N   GLU A 173       1.322   0.462  10.499  1.00 13.30           N |
| 33 | 64.2233 |  | | ATOM     20  CA  GLU A 173       1.308  -0.904   9.951  1.00 13.59           C |
|  |  |  | | ATOM     21  C   GLU A 173      -0.094  -1.333   9.497  1.00 13.08           C |
|  |  |  | | ATOM     22  O   GLU A 173      -0.236  -2.099   8.524  1.00 13.46           O |
|  |  |  | | ATOM     23  CB  GLU A 173       1.863  -1.920  10.953  1.00 18.28           C |
|  |  |  | | ATOM     24  CG  GLU A 173       1.623  -3.401  10.580  1.00 24.97           C |
|  |  |  | | ATOM     25  CD  GLU A 173       2.448  -3.911   9.387  1.00 49.28           C |
|  |  |  | | ATOM     26  OE1 GLU A 173       3.366  -3.192   8.927  1.00 27.07           O |
|  |  |  | | ATOM     27  OE2 GLU A 173       2.176  -5.047   8.908  1.00 30.55           O1- |
|  |  |  | | ATOM     28  H   GLU A 173       1.485   0.510  11.343  1.00 15.96           H |
|  |  |  | | ATOM     29  HA  GLU A 173       1.889  -0.924   9.162  1.00 16.31           H |
|  |  |  | | ATOM     30  HB2 GLU A 173       2.821  -1.788  11.028  1.00 21.94           H |
|  |  |  | | ATOM     31  HB3 GLU A 173       1.445  -1.763  11.815  1.00 21.94           H |
|  |  |  | | ATOM     32  HG2 GLU A 173       1.844  -3.953  11.346  1.00 29.96           H |
|  |  |  | | ATOM     33  HG3 GLU A 173       0.685  -3.515  10.357  1.00 29.96           H |