

Table S1. Additional NT-proBNP protein structure validation results.

Code Name	Galaxy Web Server			MolProbity Server										SAVESv6.0	Deep UMQA	
	MolProbity Score	Poor Rotamers	Rama Favored Region	Ramachandran plot regions						Bad bonds		Bad angles		ERRAT Score	Rama Most Favoured Regions	Global IDDT
				Outliers		Allowed		Favored		N	%	N	%			
				N	%	N	%	N	%							
AlphaFold2 (2-R1_05)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	3 / 606	0.50	3 / 819	0.37	100	98.4	61.65
trRosetta (1-R1_02)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	6 / 606	0.99	9 / 819	1.10	85.7143	98.4	54.02
AlphaFold2 (1-R2_03)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	100	100	61.62
AlphaFold2 (1-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	92.5373	98.4	62.95
AlphaFold2 (2-R2_01)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	98.5294	96.7	61.48
AlphaFold2 (2-R2_05)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	3 / 819	0.37	100	96.7	60.11
AlphaFold2 (2-R2_09)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	98.5294	98.4	61.81
AlphaFold2 (3-R2_02)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	57.96
AlphaFold2 (3-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	59.55
AlphaFold2 (3-R2_06)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	59.05
AlphaFold2 (3-R2_07)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	61.02
AlphaFold2 (3-R2_08)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	100	100	62.23
AlphaFold2 (4-R2_09)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	3 / 819	0.37	95.5224	98.4	57.09
AlphaFold2 (5-R2_07)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	59.08
AlphaFold2 (5-R2_08)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	60.64
trRosetta (1-R2_02)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	90.7692	96.7	64.81
trRosetta (1-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	89.0625	96.7	67.33
trRosetta (1-R2_08)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	86.3636	96.7	66.10
trRosetta (3-R2_01)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	3 / 819	0.37	90.9091	91.8	61.98
Robetta (1-R2_02)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	98.4	69.98
Robetta (1-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	61.46
Robetta (1-R2_07)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	61.58

Code Name	Galaxy Web Server			MolProbity Server										SAVESv6.0	Deep UMQA	
	MolProbity Score	Poor Rotamers	Rama Favored Region	Ramachandran plot regions						Bad bonds		Bad angles		ERRAT Score	Rama Most Favoured Regions	Global IDDT
				Outliers		Allowed		Favored		N	%	N	%			
				N	%	N	%	N	%							
Robetta (2-R2_01)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	100	100	63.18
Robetta (2-R2_02)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	98.4	60.29
Robetta (2-R2_03)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	100	60.19
Robetta (2-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	98.5294	100	59.67
Robetta (2-R2_05)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	63.31
Robetta (2-R2_07)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	98.4	60.76
Robetta (2-R2_08)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	70.46
Robetta (2-R2_09)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	98.4	60.86
Robetta (2-R2_10)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	65.36
Robetta (3-R2_01)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	100	98.4	60.42
Robetta (3-R2_02)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	100	58.77
Robetta (3-R2_03)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	98.5294	98.4	59.59
Robetta (3-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	95.5882	98.4	61.18
Robetta (3-R2_06)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	100	98.4	62.17
Robetta (3-R2_07)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	100	98.4	60.20
Robetta (3-R2_09)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	100	62.89
Robetta (3-R2_10)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	100	100	60.43
Robetta (4-R2_10)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	92.6471	98.4	65.95
Robetta (5-R2_01)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	100	100	61.58
Robetta (5-R2_02)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	8 / 819	0.98	100	98.4	64.99
Robetta (5-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	4 / 819	0.49	100	98.4	57.48
Robetta (5-R2_06)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	100	100	58.73
Robetta (5-R2_08)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	100	98.4	59.33
Robetta (5-R2_09)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	100	98.4	60.03

Code Name	Galaxy Web Server			MolProbity Server										SAVESv6.0	Deep UMQA	
	MolProbity Score	Poor Rotamers	Rama Favored Region	Ramachandran plot regions						Bad bonds		Bad angles		ERRAT Score	Rama Most Favoured Regions	Global IDDT
				Outliers		Allowed		Favored		N	%	N	%			
				N	%	N	%	N	%							
D-I-TASSER (4-R2_10)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	98.4	60.98
QUARK (1-R2_04)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	5 / 819	0.61	100	98.4	63.23
QUARK (1-R2_07)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	91.1765	96.7	62.60
QUARK (2-R2_01)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	98.4	57.69
QUARK (2-R2_05)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	100	96.7	57.52
QUARK (2-R2_06)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	7 / 819	0.85	91.1765	100	58.17
QUARK (2-R2_10)	0.5	0	100	0	0	74	100	74	100	0 / 606	0	6 / 819	0.73	98.5294	100	57.63

Table S2. Single-stranded DNA structure modeling method validation results.

PDB ID	Secondary Structure Software	Secondary Structure (dot-bracket notation)	MolProbity Validation		RMSD to Template
			Bad Bond	Bad Angle	
7YF7	mFold (DNA)	(.....)...	0.00%	0.74%	9.865
7YF7	RNAstructure (DNA), RNAprobing (DNA), RNAfold (DNA), RNAfold in 3dDNA, MC-Fold, RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), CentroidFold, EternaFold, CONTRAfold, IPknot, LinearFold-V, RNAProbe's Consensus	0.00%	0.74%	9.865
7YF7	mFold (RNA)	((...))...	0.00%	1.48%	3.352
8FIL	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAprobing (DNA), RNAfold (DNA), RNAfold in 3dDNA, mFold (RNA), RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), CentroidFold, EternaFold, CONTRAfold, IPknot, LinearFold-V, RNAProbe's Consensus	.((((.....)))	0.80%	0.26%	3.375
8FIL	MC-Fold	(((((.....))))	0.80%	1.05%	3.347
8X4F	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAprobing (DNA), RNAfold (DNA), RNAfold in 3dDNA, mFold (RNA), RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), CentroidFold, EternaFold, CONTRAfold, IPknot, LinearFold-V, RNAProbe's Consensus	((.(.....).))	0.00%	0.24%	6.111
8X4F	MC-Fold	(((((.....))))	0.00%	1.20%	3.835
8GZK	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	((((((((((.....))))))))	0.00%	0.49%	8.346
8GZK	RNAprobing (DNA), RNAfold in 3dDNA, mFold (RNA), RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), CentroidFold, EternaFold, CONTRAfold, IPknot, LinearFold-V, RNAProbe's Consensus	((((((((((((((.....))))))))	0.00%	0.86%	7.580
8GZK	MC-Fold	((((((((((((((.....))))))))	0.00%	0.86%	7.580
8GZL	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	((((((((((((((.....))))))))	0.00%	0.62%	8.177
8GZL	RNAprobing (DNA), MC-Fold, mFold (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), CentroidFold, EternaFold, CONTRAfold, IPknot, 2Lfc, RNAProbe's Consensus	((((((((((((((((((.....))))))))	0.00%	0.98%	6.139
8GZL	RNAfold in 3dDNA, LinearFold-V	((((((((((((((((((.....))))))))	0.00%	1.85%	7.214
8GZL	RNAstructure (RNA)	((((((((((((((((((.....))))))))	0.19%	1.85%	6.889
8GZM	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	((((((((((((((((((.....))))))))	0.00%	0.49%	6.183

PDB ID	Secondary Structure Software	Secondary Structure (dot-bracket notation)	MolProbity Validation		RMSD to Template
			Bad Bond	Bad Angle	
8GZM	RNAprobing (DNA), RNAfold in 3dDNA, mFold (RNA), RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), LinearFold-V	((((((((((.....))))))))))	0.00%	0.86%	6.777
8GZM	MC-Fold	(((((((((((((...))))))))))))	0.00%	0.49%	6.903
8GZM	CentroidFold, EternaFold, CONTRAfold, IPknot, RNAProbe's Consensus	((((((((((((((.....))))))))))))	0.00%	1.23%	5.218
8IF5	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA), RNAstructure (RNA), RNAfold (RNA), IPknot, RNAProbe's Consensus	(((((.....))))	0.18%	1.04%	12.791
8IF5	RNAprobing (DNA), RNAfold in 3dDNA, RNAprobing (RNA), EternaFold, CONTRAfold, LinearFold-V	(((((.....(.....)....)))))	0.18%	1.74%	12.654
8IF5	MC-Fold	((((((((((((((.....))))))))))))	0.18%	0.23%	7.917
8IF5	mFold (RNA)	(((((.....(.....)....)))))	0.18%	1.62%	12.737
8IF5	CentroidFold	(((((.....)....)))))	0.18%	0.70%	12.750
8TQS	mFold (DNA)	..((((.....))).....(.....).	0.00%	2.35%	16.579
8TQS	RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	..((((.....)))..(((.....))).	0.60%	2.35%	20.813
8TQS	RNAprobing (DNA), mFold (RNA), RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA)	..((((.....))).(((.....)))	0.00%	1.57%	16.833
8TQS	RNAfold in 3dDNA, EternaFold, LinearFold-V, RNAProbe's Consensus	..((((.....))).....	0.00%	2.05%	16.277
8TQS	MC-Fold	..((((.....)))(((((.....))))))	0.00%	1.17%	22.230
8TQS	CentroidFold, IPknot	..((((.....))).....((.....))	0.00%	1.37%	17.530
8TQS	CONTRAfold	..((((.....))).(((.....)))	0.00%	2.45%	15.621
8BM4	mFold (DNA)((..((.....))..)).....	0.00%	1.84%	13.066
8BM4	RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	((((((.....((.....))..))..)))	0.00%	0.55%	6.833
8BM4	RNAprobing (DNA), RNAfold in 3dDNA, mFold (RNA), RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), EternaFold, IPknot, LinearFold-V, RNAProbe's Consensus	(((((.....((.....))..)).....)))	0.00%	1.57%	10.384
8BM4	MC-Fold	(((((((((((((((((...))))))))))))))	0.00%	2.58%	6.509

PDB ID	Secondary Structure Software	Secondary Structure (dot-bracket notation)	MolProbity Validation		RMSD to Template
			Bad Bond	Bad Angle	
8BM4	CentroidFold, CONTRAfold	(((((...(((.(.....)).))..)))))	0.00%	0.83%	7.661
8OR8	mFold (DNA)	(((((...(((.....)).((.....))....))))))	0.13%	1.49%	7.309
8OR8	RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	(((((...(((.....((.....))))))))))	0.13%	2.31%	14.848
8OR8	RNAprobing (DNA), RNAfold in 3dDNA, RNAprobing (RNA), CONTRAfold, LinearFold-V	((((((((((((.(.....).)))))..))))))	0.89%	1.90%	17.912
8OR8	MC-Fold	(((((...(((.(.....))))))))))	0.13%	2.23%	20.369
8OR8	mFold (RNA), RNAstructure (RNA), RNAfold (RNA), CentroidFold, EternaFold, IPknot, RNAProbe's Consensus	((((((((((.....))))))..))))	0.89%	1.90%	17.912
8OR8	RfCR	(((((.(.....))))..))))	0.13%	1.24%	16.833
8BM6	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	((..((..((.....)).))..)).....	0.24%	0.63%	14.938
8BM6	RNAprobing (DNA), RNAfold in 3dDNA, RNAstructure (RNA), RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), LinearFold-V	((..((..((.....)).))..))..	0.12%	1.65%	9.018
8BM6	MC-Fold	((((((((((((.....))((.....))))))))))	0.12%	1.18%	11.983
8BM6	mFold (RNA)	((..((.....((.....)).)).....))..	0.24%	1.26%	14.477
8BM6	CentroidFold	...((.....((.....)).)).....))..	0.36%	2.28%	15.817
8BM6	EternaFold, RNAProbe's Consensus	0.12%	1.49%	21.964
8BM6	CONTRAfold	((..((.....((.....)).)).....))..	0.36%	2.20%	15.817
8BM6	IPknot((.....)).....	0.24%	0.47%	18.308
8BM7	mFold (DNA), RNAstructure (DNA), RNAfold (DNA)	((..((.....((.....)).))..)).....	0.46%	0.89%	19.864
8BM7	RNAprobing (DNA), RNAfold in 3dDNA, RNAprobing (RNA), RNAfold (RNA), LinearFold-V	((..((.....((.....)).))..))....	0.46%	0.97%	15.403
8BM7	MC-Fold	((((((((((((((.....))((.....))))))))))))	0.46%	1.12%	13.620
8BM7	mFold (RNA), CentroidFold, IPknot	...((.....((.....)).((.....)).))..	10.45%	13.93%	
8BM7	RNAstructure (RNA)	((..((.....((.....)).))..)((.....)).	0.46%	1.64%	25.718

PDB ID	Secondary Structure Software	Secondary Structure (dot-bracket notation)	MolProbity Validation		RMSD to Template
			Bad Bond	Bad Angle	
8BM7	EternaFold	...((...((...((.....))..))..)).	0.46%	0.97%	10.579
8BM7	CONTRAFold	...((...(((.(.....)).....))..)).	2.30%	4.55%	15.212
8BM7	RNAProbe's Consensus	...((...((.....))..)).	0.46%	0.60%	6.906

Table S3. Aptamer truncation docking results.

No	Deleted Bases	Sequence	Secondary Structure	Length	HADDOCK Score
1	41-72	GGCAGGAAGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCG	((((((((((((...))))))(((((...))))))))))	40	-47.3 ± 10.2
2	1, 42-72	GCAGGAAGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGT	((.(((((((((((...))))))(((((...))))))))))	40	-51.9 ± 9.1
3	1-2, 43-72	CAGGAAGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTA	.((((((((((((...))))))(((((...))))))))).	40	-72.8 ± 20.6
4	1-3, 44-72	AGGAAGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAG	((((((((((((...))))))(((((...))))))))..	40	-54.4 ± 6.9
5	1-4, 45-72	GGAAGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAGA	((((...))(((.(((((((((((...))))))..))))))..	40	-45.7 ± 16
6	1-5, 46-72	GAAGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAGAC	((((((((...(((((((((((((((...))))))..)))))))))	40	-47.8 ± 16.3
7	1-6, 47-72	AAGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAGACC	.(((((((.(((((((((((((...))))))..)))))))))	40	-50.8 ± 4.8
8	1-7, 48-72	AGACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAGACCG	((((((((.(((((((((((((...))))))..)))))))))	40	-80.8 ± 24.1
9	1-8, 49-72	GACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAGACCGG((((((((((((((((...))))))..))))))	40	-60.6 ± 4.8
10	1-9, 50-72	ACAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAGACCGGT((((((((((((((((((((...))))))..))))))	40	-39.4 ± 8.9
11	1-10, 51-72	CAAACAGGTCGTAGTGGAACGTCCACCGTAGACCGGTT	..((((((((((((((((((((((((...))))))..))))))	40	-53.8 ± 14

Table S4. Secondary structure in dot-bracket notation similarity.

Apt. Name	Secondary Structure (in dot-bracket notation)	Secondary Structure Differences	Similar?	Branch Number
md3	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))))	2	TRUE	1
md11	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	2	TRUE	1
md32	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))))	2	TRUE	1
md43	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))))	2	TRUE	1
md45	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))))	2	TRUE	1
md47	((.(((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	2	TRUE	1
md6	((((.((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	4	TRUE	1
md22	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))))	4	TRUE	1
md24	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))))	4	TRUE	1
md37	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	4	TRUE	1
md41	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	4	TRUE	1
md46	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	4	TRUE	1
md49	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	4	TRUE	1
md10	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	6	TRUE	1
md27	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))).	6	TRUE	1
md20	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))).	8	TRUE	1
md25	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))).	8	TRUE	1
md34	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))).	8	TRUE	1
md50	((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))).	8	TRUE	1
md1	...(((((((((.((((((((((.(.)))))))).)))))))))))))	10		1
md2(.((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	15		1
md12(.((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	15		1
md16(.((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	15		1
md29(.((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	15		1
md39(((((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	15		1
md40(((((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	15		1
md26(.((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	16		1
md28(.(((.(.(((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	16		1
md14(.(((((((((.(.)))))))).))..)))))	17		1
md15(.(((.(.))))..)))))	17		1
md13	((((((((...(((((((((.(.)))))))))..)))))))).	13		2
md17	(((((...)))((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	13		2
md18	(((((...)))((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	14		2
md31	..(((...)))((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	14		2
md33	(((((...)))((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	14		2
md36	(((((...)))((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	14		2
md44(((((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	14		2
md4	(((((...)))((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	15		2
md30(((((((((.(.)))))))))..)))))	16		2
md35	(((((...)))((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).	16		2
md7	((((((((((((((((((((.(.)))))))))..)))))))).(((...)))	19		2

Apt. Name	Secondary Structure (in dot-bracket notation)	Secondary Structure Differences	Similar?	Branch Number
md23	(((((.(.)))))(((((.)))))	22		2
md19	...(((.)))))(((((.)))))	25		2
md21	(((((.)))))(((((.)))))	25		2
md5	.(((.)))))(((((.)))))	18		3
md8	(((((.)))))(((((.)))))	18		3
md38	(((((.)))))(((((.)))))	18		3
md48	.(((.)))))(((((.)))))	19		3
md42	(((((.)))))(((((.)))))	21		3
md9	.(((.)))))(((((.)))))	24		3
m2d10	(((((.)))))	0	TRUE	1
m2d1	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d2	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d3	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d5	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d8	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d11	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d12	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d13	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d16	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d17	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d18	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d19	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d21	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d23	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d24	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d28	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d32	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d33	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d36	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d37	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d39	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d40	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d44	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d46	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d48	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d49	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d50	(((((.)))))	2	TRUE	1
m2d4	(((((.)))))	4	TRUE	1
m2d6	.(((.)))))	4	TRUE	1
m2d7	(((((.)))))	4	TRUE	1
m2d9	(((((.)))))	4	TRUE	1
m2d20	(((((.)))))	4	TRUE	1

Apt. Name	Secondary Structure (in dot-bracket notation)	Secondary Structure Differences	Similar?	Branch Number
m2d22	((((((((.(.)))))))))	4	TRUE	1
m2d25	((((((((.(.)))))))))	4	TRUE	1
m2d30	((((((((.(.)))))))))	4	TRUE	1
m2d31	((((((((.(.)))))))))	4	TRUE	1
m2d34	((((((((.(.)))))))))	4	TRUE	1
m2d43	((((((((.(.)))))))))	4	TRUE	1
m2d45	((((((((.(.)))))))))	4	TRUE	1
m2d14	(((.(((.(.))))))	6	TRUE	1
m2d15	(((.(((.(.))))))	6	TRUE	1
m2d27	((((((((.(.))))))	6	TRUE	1
m2d29	((((((((.(.))))))	6	TRUE	1
m2d38	((((((((.(.))))))	6	TRUE	1
m2d47	((((((((.(.))))))	6	TRUE	1
m2d42	((((((((.(.))))))	8	TRUE	1
m2d26	(((.(((.(.)))	16		3
m2d35	(((.(((.(.)))	16		3
m2d41	((((((((.(.)))	22		3

Table S5. Aptamer random mutations docking results.

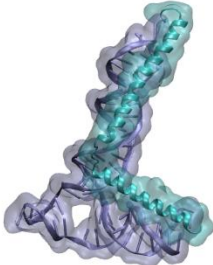
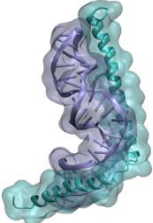


Mutated Aptamer	Sequence	Seq. Differences to Parent Aptamer	Secondary Structure	SS Differences to Parent Aptamer	HADDOCK Score
tN20a-fm1	AGACAAACAGTTCCTTAGTGGAAGTTCAGCGTAGATAG	6	...((((((((((((((((((...))))))))))))))	10	-
tN20a-fm2	AGACAAACAGGTCGTAGTGTAGTACCACAAAAGACCG	7(.((((((((((((((((((...))))))))))))))	15	-
tN20a-fm3	CGGCATGCAGGTCGTAGTGGAAACTGTCCACCGTAGACTG	5	(((((((((.((((((((((((.(...))))))))))))))	2	-44.5 ± 9.5
tN20a-fm4	AGTCAACCCGGTCGTAGGGGAAACTGTCCATCGTAGACCG	5	(((.)))(((((((((((((((((((...))))))))))))	15	-
tN20a-fm5	AGACAAACAGGTCGTACTGGAAGTCAACACCGTACACAG	6	.((((...)))((((((((((((((((((...))))))))))	18	-
tN20a-fm6	TGACAAACGGGTCGCAGTGGAACTGTCCACCGTAGACCG	4	(((((.(((((((((((((((((((...))))))))))))))	4	-21 ± 14.1
tN20a-fm7	AGACAATTAGGTCGTAGGGCAAAGTGTCCACCGTAGACCG	4	((((((((((((((((((((((...))))))))))))))	19	-
tN20a-fm8	AGACAAACAGGTCGTGGCGAAACTCTCCAACGTAGACGG	6	(((((...)))((((((((((((((((((...))))))))))	18	-
tN20a-fm9	ATACAGACAGGTCGTAGTGGAAACTGTCCACCGTAGACCG	2	.(((.((((...))))))((((((((((((((((((...))))	24	-
tN20a-fm10	AGACTAACAGGTCGAGTGGATGCTGTCTACGTAGACCG	7	((((((((((((((((((((((((...))))))))))))))	6	-35.6 ± 16.3
tN20a-fm11	AGACAAACAGGTCGAAGTGGAAACTGTCCACCGTAGACCG	1	(((((.(.((((((((((((((((((...))))))))))))))	2	-34.7 ± 11.7
tN20a-fm12	ATACAAACAGGTCCTTAGTGGAAGTGTCTACCGAAGACCG	4(.((((((((((((((((((...))))))))))))	15	-
tN20a-fm13	AGACAAACAATTCGTAGAGGAAACGGTTCACCGCAGACAG	7	(((((...((((((((((((((((((...))))))))))))))	13	-
tN20a-fm14	AAACAAACAGGTCGGAGTGGAAACTGTCTCCGTAGACCG	3(.((((((((((((((((((...))))))))))))	17	-
tN20a-fm15	ATACAAACAGGTCGTACTGGAAGTGTCCACCGTAGACCG	3(.(((.((((...))))))(.)))))	17	-
tN20a-fm16	AAACACGCAGGTCGTAGTGGAAAGTGTCCACCGTAGACCG	4(.((((((((((((((((((...))))))))))))	15	-
tN20a-fm17	AGGCAAACAAGTCGTAGTGGAAAGTTACACCGTAGACCG	5	(((.)))(((((((((((((((((((...))))))))))))))	13	-
tN20a-fm18	AGGCAAACAGGTAGGTGTGGAAAGTGTCCACCGTAGACCG	7	(((.)))(((((((((((((((((((...))))))))))))))	14	-
tN20a-fm19	AGACAAACAGCTGGTAGAGGACACTGTCCACCGTAGACCT	5	...((((((((((((((((((((...))))))))))))))	25	-
tN20a-fm20	AGACAATGAGGTCGTAGTGGTAAATGTCCACCGTGTAGCG	6	((((((((((((((((((((((((...))))))))))))))	8	-61.2 ± 12.6
tN20a-fm21	AGACAAACAAGTCGTTGTGGAAAGGTATGCACCGTAGACCG	6	((((((((((((((((((((((((...))))))))))))))	25	-
tN20a-fm22	AGGCCGACAGTTCATAGTGGAAACTGGCCACCGTAGGCCG	7	((((((((((((((((((((((((...))))))))))))))	4	-50.1 ± 11.7
tN20a-fm23	AGACAGACAGGTCGTAGTGGTATCTGTCCACCGTAGACCG	3	(((((.((((...))))))((((((((((((((((((...))))	22	-
tN20a-fm24	AGACAAACAGGGCGTAGTGGAAACTGTCCACCGTGTAGCG	2	((((((((((((((((((((((((...))))))))))))))	4	-47.1 ± 15
tN20a-fm25	AGACACACAGGCCTTAGTGGAACTGTGGCCACCGTAGGCCG	6	((((((((((((((((((((((((...))))))))))))))	8	-55.8 ± 9.5

Mutated Aptamer	Sequence	Seq. Differences to Parent Aptamer	Secondary Structure	SS Differences to Parent Aptamer	HADDOCK Score
tN20a-fm26	GCACACACAGGTCGTAGTGGAGACTGTCCACCGTAGACCG	4(.((((((((((((.....)))))))).))))))	16	-
tN20a-fm27	TGACACAGAGGTAAGTGGAAACAGTCCACCGTAGACCG	6	((((((((((((.(.(((.(.)))))))))))..)))).	6	-43.3 ± 14.5
tN20a-fm28	AGCCAAACAGGTCGTAGAGAAAAGTCCACGCTACACCG	6(.(((.(((((((((.....)))))))))..)))))	16	-
tN20a-fm29	AGACAAACAGGTCGATGTGGAAAGTGTCCACCGTCGACCG	4(.((((((((((((.....)))))))).))))))	15	-
tN20a-fm30	AGAAAAATAGGTCATAGTGGAAACGGGCCACCCATAACCG	7((((((.((((.(.)))))..)))))	16	-
tN20a-fm31	AGACAATTCGGTCGGAGTGGAAAGTGTCCACCGTACACCG	6	.(((.(.)))(((((((((((((.....)))))))).))))))	14	-
tN20a-fm32	AGACATACAGGTGGTAGTGGAAAGTGTCCACCGTAGACCG	3	((((((((((((.(.(((.(.))))))))..)))))	2	-86.4 ± 15.2
tN20a-fm33	AGCAAGGCAGGTCGTAGTGGAAATGTCCACCGTAGACCA	6	((((.(.)))(((((((((((((.....)))))))).))))))	14	-
tN20a-fm34	AGACAAACAGTTCGTAGTGGAGACTGTCCACCGTAGACCG	4	(((((.(((((((((.....)))))))))..)))))	8	-41 ± 15.2
tN20a-fm35	AGAAAAATCAGGTCGTAAGTGGAAAGTGTCCACCGAAGACCC	5	((((.(.)))(((((((((((((.....)))))))).))))))	16	-
tN20a-fm36	TGACAAACAGGTCGTAGGTGGAAAGTGTCCACTGTAGACCC	5	((((.(.)))(((((((((((((.....)))))))).))))))	14	-
tN20a-fm37	AGACAAACAGGTCGGAGTTGAAAGTATCCACCGCAGACAG	5	((((((((.(.(((.(.)))))..)))))..)))))	4	-41.9 ± 3.7
tN20a-fm38	AGACATACAAGTCGTAGTGGAAAGTGTCCACCCTAGACAA	5	((((((((.(.)))))..)))((((.(.)))(((((.....))))))	18	-
tN20a-fm39	ATCAAAAAGATCGTAGTGGAAACCGTCCACCATAGACTG	8((((((((((((((((.....)))))))))..)))))	15	-
tN20a-fm40	AGACAAACAGGTCGTAGTGGAAAGTGTCCACCGTGGACCG	2((((((((((((((((.....)))))))))..)))))	15	-
tN20a-fm41	AGACAAACAGGTAGTGTGGAAAGTGTCCACCGAGACCG	4	(((((.(((((((((((((.....)))))))).))))))..)))))	4	-80.6 ± 7.8
tN20a-fm42	AGACAAACTGGTCTTTGTGGAAAGTGTCCATCGTAGGCAG	6	((((((((.(.)))))..)))((((.(.)))(((((.....))))))	21	-
tN20a-fm43	AGACCAACAGGTCGTATTGTAAAGTGTCCACCGTAGAGCG	5	((((((((((((.(.(((.(.)))))..)))))..)))))	2	-80.7 ± 11.3
tN20a-fm44	AAACAAACAGGTCGGAGTGGCAACTTCTGCAGTAGACCT	8((((((((((((.....)))))))))..)))))	14	-
tN20a-fm45	AGACAAACAGGTCGTAGTTGAAAGTGTCCACCGTATACCG	3	((((((((((((.(.(((.(.)))))..)))))..)))))	2	-48.5 ± 12.7
tN20a-fm46	AGACAAACAGGTTGTAGTGGATACTGTCCCGGAGACCG	4	((((((((((((((((((.....)))))))))..)))))	4	-33.6 ± 12.8
tN20a-fm47	AGAGAAACAGGTCGTAGTCAAAGTGTCCACCGTAGCCTG	5	((.(.(((.(.(((.(.)))))..)))))..)))))	2	-51 ± 7.2
tN20a-fm48	AGTCAGAAAGGCGTAGAGGAAAGTGTCCATCGGAGACCG	7	.((((((.(.)))))..)))((((.(.)))(((((.....))))))	19	-
tN20a-fm49	AGTCTCACAGTCGTAGTGGAAAGTGCCTCCGTAGACCG	6	((((((((((((((((((.....)))))))))..)))))	4	-21.2 ± 15.5
tN20a-fm50	AGACAAATGGGTCGTAGTGGAAAGCGTCCACCGTAGACGG	5	((((((((((((((((((.....)))))))))..)))))	8	-20.5 ± 11.6
tN20a-sm1	AGACATACAGTTGGTAGTAAAGTGTCCATCGAAGACCG	5	((((((((((((((((((.....)))))))))..)))))	2	-25.8 ± 10.5
tN20a-sm2	AGACATACAGCTGGTAGTGGAAAGTGTCCACCCTAGACCA	3	((((((((((((((((((.....)))))))))..)))))	2	-31.2 ± 19

Mutated Aptamer	Sequence	Seq. Differences to Parent Aptamer	Secondary Structure	SS Differences to Parent Aptamer	HADDOCK Score
tN20a-sm3	AGACAGACAGATGCTTGTGAAAACGTTCACCGTAGACCG	5	((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-55.6 ± 14.2
tN20a-sm4	AGACATGCAGGTGGTAGTGAAAACGTCCACGATAGACCG	3	((((((((((((((((((((((((..)))))))))))))))))).	4	-52.1 ± 12.9
tN20a-sm5	AGGCATACAAGTGGTAGTGATAACTGTCCACCGTAGACCG	3	((((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))))	2	-84 ± 11.3
tN20a-sm6	ACACATACAGGTGGTCCGTGAAAACGTCCAACGTAGACCG	4	..((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))..)	4	-51 ± 11.1
tN20a-sm7	AGACATACAGGTGGAACGTGACTGTCCACCGTAGCCCG	5	((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	4	-64.3 ± 14.5
tN20a-sm8	AGAAATACAGGTGATAGTGAAAACGTACTACCGTAGCCCG	5	((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-23.3 ± 3.3
tN20a-sm9	AGACATACAGGTGGTAGTGAAAACGTGCGACCGCGACCG	3	((((..((((((((((((((((((((((..)))))))))))))))))).	4	-36.8 ± 8.4
tN20a-sm10	CGACATACAGGTGGTAGTGAAAACGTCCAACGTAGACCG	3	((((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))))	0	-68 ± 19.9
tN20a-sm11	CGACCTAAAGGTGGTAGTGAAAACGTCCAACGTACACCG	6	((((((((..((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))))))))	2	-59.4 ± 6.7
tN20a-sm12	AGACATACAGGAGCTAGTGAACACTGGCCACCGTAGAACG	5	((((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-61 ± 17.5
tN20a-sm13	AGACATAAAGTTGTAGTGAAAACGTCCACCGTAGACCG	2	((((((((..((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))))))))	2	-60.3 ± 11.8
tN20a-sm14	ACTCATACACGAGGTAGTGAAAAAGCCACCGTAGACCG	7	..(((..(((..((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))..	6	-91.1 ± 5.5
tN20a-sm15	AGACCTGCACGTGGTCGTGAGAACTGTCCACCGCGTCCG	8	(((((..((((((((((((((((((((((((..)))))))))))))))))).	6	-60 ± 7.6
tN20a-sm16	AGACATACAGGCGGTAGTGAAAACCGTCCACCGTAGACCG	2	((((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-29.7 ± 1.1
tN20a-sm17	AGACCGACAGGTGGTAGTGACAACGTCCACCATCGACCG	5	((((((((..((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))))))))	2	-56.7 ± 16.1
tN20a-sm18	AGACATACAGATGGTGGTTAAAACGTCCACCGTAGATCT	5	((((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-49 ± 9.3
tN20a-sm19	AGACTTACAGGTGGTAGTGAAAACGTCAACCGTAGACCG	2	((((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-38.2 ± 8.1
tN20a-sm20	AGGCAAAACAGGCGCAGTGAAAACCTCCCACCGTAGACTC	8	(((((..((((((((((((((((((((((((..)))))))))))))))))).	4	-44.8 ± 19.8
tN20a-sm21	AGACAGACAGGCCGTAGTGAGAACTGTCCACCGTTGATCG	6	((((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-18.6 ± 21.8
tN20a-sm22	GGACATCCAGGTGGTAGTGAATACTGTCCAGCGCAGCCCG	6	((((((((((((((((((((((((((..)))))))))))))))))).	4	-23.8 ± 5
tN20a-sm23	AGACATACACGTGGTGGTAAAACAGTCCACAGTATACCG	5	((((((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))))))))	2	-82.2 ± 12.3
tN20a-sm24	AGACATACAGGTGGTAGTGAAAAGCTGTCCACTTATAGTCA	5	((((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-27.6 ± 5.8
tN20a-sm25	AGACATACAGGCGACAGTAAAAGCTGTCCACCGTAGACCG	5	((((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	4	-15.7 ± 13.1
tN20a-sm26	AGACAAAACAGGTTCTAGTGAAAACGTCCACCGTAGAGCG	4	..((((((((((((((((((((((..))))))..)))))))((((..))))(((((..))))	16	-
tN20a-sm27	AGAGATTCAGGTGCGAGAGAAAACGTCCACCGTAGACCG	6	((..((((((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	6	-58.3 ± 16.4
tN20a-sm28	AGACATACAGATGCGAGTGAAAAGCTGCCATCGTAGACCG	6	((((((((((((((((((((((((((..))))))..))))))))))))))	2	-18.4 ± 6.3
tN20a-sm29	AGACATACAGGTGGTCTGAATACTATCCACCGTAGACAA	6	(((((..(((..((((((((((((((((((((((..)))))))))))))))))).	6	-45 ± 27.2

Mutated Aptamer	Sequence	Seq. Differences to Parent Aptamer	Secondary Structure	SS Differences to Parent Aptamer	HADDOCK Score
tN20a-sm30	AGACACACAGGTGGTAGGGAATACTCCCCACCGTAGAGCG	6	((.((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	4	-35.2 ± 10.4
tN20a-sm31	AGACATATAGGTGGGAGTGAAAATCTCCAGCTGAGACCG	6	((((((((((((.(((((((..)))))))))))))))))).	4	-26.5 ± 9.8
tN20a-sm32	AGACATCCAGGTGGTAGTGAAAATTGTACACGGTAGAGCG	5	((((((((((((((((((((..))))))))))))))))))	2	-11.2 ± 8
tN20a-sm33	AGACATACAGGGGGTAGTGAAAATGTCCACCGTAGAGCG	2	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-59.5 ± 35.1
tN20a-sm34	AGACATAAAGGTGGAAGTGAAAGCTGTCCACCGTAGAGCG	4	((.((((((((((((((((((.))))..))))))))))))))	4	-32.5 ± 3.1
tN20a-sm35	AGACATACATGTGGTAGTGCAAATGTCCGACCGTCGACCG	4	..((((..)))(((((..)))((((..))..)).	16	-
tN20a-sm36	AGAGATACAGGAGGTAGTGACAACTGCCACCGTAAACAG	6	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-15.6 ± 3.6
tN20a-sm37	AGCCATACTGGGGCAGCGAAAATGTCCACCTTAGACCG	6	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-30.2 ± 14.6
tN20a-sm38	GGACATACAGGTGGAAGAGAAAACAGTTCACCGTGTACCG	6	(((((.(.(.(((((((..)))..)))))))))).	6	-35.5 ± 21.7
tN20a-sm39	AGGGTTACAGGTGGAAGTGAAAATGTCCGCGTAGACTG	6	((((((((.(((((((((((..))))..))))))))))))))	2	-34.6 ± 5.6
tN20a-sm40	AGACATACAGGTGGTAGTGAAAATGTCCACGCTAGGCAG	4	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-26.7 ± 8.4
tN20a-sm41	AGACATACACGTCGTTGCGAAAATGTCAACCGTAGACCG	5	..((((..)))((((..)))(((((..))))))	22	-
tN20a-sm42	AGACAGTCAGGTGGTTGTGAAAATGTCTACCGTTGACCG	5	..((((((((((((((((((..))..))))..))))))	8	-50.9 ± 12.5
tN20a-sm43	AGACATACAGGTGGTAGTGACATCTGTCCATCGTTGACCG	4	((((((((((((.(((((((..)))))))))))))))))).	4	-30.2 ± 15.9
tN20a-sm44	TGCCATACAGGTGGTAGTGAAAATGACCTCCGTAGACCG	4	((((((((.(((((((((((..))))..))))))))))))))	2	-51.3 ± 16.2
tN20a-sm45	AGAGATATAGGTGTTAGTGAAAATGTCCGTCGTCGACCG	7	((.((((((((((((((((((((((.)))))))))))))))))).	4	-49.3 ± 2.6
tN20a-sm46	AGACATACAGGGTGTAGTGAAAATGCCCCACCTTAGACCG	5	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-28.7 ± 4.2
tN20a-sm47	AGCCATACAGGTGGTAGTGAAAATGTTACCGTACACCG	4	..((((((.(((((((((((..))))..))))..))))))	6	-61.9 ± 11.4
tN20a-sm48	AGCCATCTGGTGGTAGTAAAAATGTTACAGTAGGCCG	7	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-27.9 ± 5
tN20a-sm49	AGACATACAGGTGCTAGTGAAAATCCCCACCGAAGACCG	4	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-28.2 ± 11.1
tN20a-sm50	AGGCATCCAGGTGGAATTGAAAACCGCCCCACCGTAGACCG	6	(((((((((((((((((((((((.))))))))))))))))))	2	-11.2 ± 10.1

Table S6. Visualization and interaction profile of docking complex results.

Aptamer	Visualization	HADDOCK Score	Binding Sites Interactions Profile	
N20a (72-mer)		-68.8 ± 24.1	6 Hydrophobic Interactions	Ala9, Glu13, Pro47, Lys66, Tyr70 and Thr71
			13 Hydrogen Bonds	Leu3 (2), Gly16, Gln25 (2) , Lys27, Leu28, Gly60, Tyr70, Thr71 (2) and Ala74 (2)
			1 π-Stacking	Tyr70
			7 Salt Bridges	Arg21 (2) , Arg46 , Lys52 (2) and Lys66 (2)
tN20a (40-mer)		-80.8 ± 24.1	4 Hydrophobic Interactions	Leu28, Thr36, Thr58 and Arg65
			16 Hydrogen Bonds	Ser10, Arg21 (3) , Asn22, Gln25 , Gln32, Gln35, Gln42, Ser44 (2), Val50, Arg54 (2) and Arg65 (2)
			10 Salt Bridges	Arg21 (3) , Glu39, Arg46 (2) , Arg54, Arg62, Arg65 and Lys66
tN20a- fm32 (40-mer)		-86.4 ± 15.2	18 Hydrogen Bonds	His1, Ser10, Glu13 (3), Thr14, Gln18 (2), Arg21 (2) , Asn22 (2), Gln25 , Gln32, Thr36, Ser53, Ala57 and Arg65
			5 Salt Bridges	Arg21 , Arg46 , Lys52, Arg54 and His64
tN20a- sm14 (40-mer)		-91.1 ± 5.5	2 Hydrophobic Interactions	Gln25 and Leu28
			16 Hydrogen Bonds	His1, Leu12, Gly16, Leu17, Gln25 (2) , Ser29, Gln32 (2), Thr36, Ser37 (2), Ala57, Arg65 (2) and Arg73
			1 π-Cation Interaction	Arg65
			8 Salt Bridges	Arg21 (2) , His23, Lys27, Arg46 , Arg54, Arg62 and His64