

ได้ศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและพลังงานของสายคู่ดีเอ็นเอแบบโค้งงอ (DNA hairpin) และ ดีเอ็นเอซึ่งยึดจับกับดีเอ็นเอ (PNA•DNA) ที่มีโครงสร้างทั้งแบบขนานและขนานสวนโดยการจำลอง แบบทางพลวัตเชิงโมเลกุล รวมทั้งคำนวณพลังงานไอออไนเซชันของ PNA•DNA โดยการคำนวณ ทางเคมีควอนตัมด้วย ผลที่ได้พบว่า โครงสร้างของ DNA hairpin ทั้ง 2 ระบบ (Sa-AA-Sd และ Sa-AAA-Sd) มีความเสถียรตลอดการจำลองแบบนาน 12 นาโนวินาที เมื่อนำโครงสร้างของ DNA hairpin ที่ได้ไปคำนวณสมบัติการถ่ายโอนประจุพบว่าให้ผลสอดคล้องกับสายคู่ DNA ปกติ ดังนั้นสรุปได้ว่าเราสามารถนำ DNA hairpin เป็นตัวแบบแทน DNA ปกติ ในการศึกษาการถ่ายโอนประจุใน สาย DNA ได้ สำหรับการศึกษาคู่ PNA•DNA ที่มีเบสอะดีนีนอยู่ที่สาย PNA และเบสไทมีนอยู่ที่สาย DNA พบว่า PNA•DNA แบบขนานสวนมีความเสถียรกว่า PNA•DNA แบบขนาน โดยมีพลังงาน อิสระการยึดจับประมาณ -44 และ -24 kcal/mol ตามลำดับ และค่านี้ใกล้เคียงกับระบบ PNA•DNA ที่มีเบสไทมีนอยู่ที่สาย PNA และเบสอะดีนีนอยู่ที่สาย DNA ซึ่งศึกษามาก่อนหน้านี้ แสดงว่าการสลักรู เบสระหว่างสาย PNA และสาย DNA ไม่มีผลต่อความเสถียรของสายคู่ PNA•DNA เมื่อศึกษาผลของ เกลือต่อความเสถียรของสายคู่ DNA และ PNA•DNA พบว่าเกลือไม่มีผลต่อความเสถียรของ PNA•DNA ในขณะที่การเติมเกลือจะทำให้ความเสถียรของสายคู่ DNA เพิ่มขึ้นอย่างมากโดยมี พลังงานอิสระการยึดจับเปลี่ยนจาก -5 kcal/mol (กรณีไม่มีเกลือ) เป็น -20 kcal/mol (กรณีมีเกลือ) ซึ่ง เกิดเนื่องจากเกลือทำให้แรงผลักระหว่างสาย DNA ทั้งสองลดลง นั่นเป็นการยืนยันว่าความเสถียรของ DNA และ PNA ขึ้นกับแรงผลักระหว่างสายทั้งสองเป็นปัจจัยหลัก และสำหรับการคำนวณพลังงาน ไอออไนเซชันของคู่เบสอะดีนีน-ไทมีน และคู่เบสกวานีน-ไซโทซีน โดยมีแกนหลักด้านหนึ่งเป็น PNA ส่วนอีกด้านเป็น DNA พบว่าพลังงานไอออไนเซชันที่คำนวณได้มีค่าใกล้เคียงกับคู่เบสที่มีแกนหลัก ทั้งสองด้านเป็น DNA แสดงว่าชนิดของแกนหลักไม่มีผลต่อพลังงานไอออไนเซชัน

Structural and energetic properties of DNA hairpins and PNA binding to DNA (PNA•DNA) in both parallel and antiparallel configurations were studied using molecular dynamics simulations. Also, the ionization potentials of PNA•DNA were calculated using quantum chemistry. As a result, the conformations of both simulated DNA hairpins (Sa-AA-Sd and Sa-AAA-Sd) remain stable throughout 12 ns. The calculated charge transfer property of these trajectories showed that the charge transfer couplings are in agreement with those of the normal DNA duplex. Therefore, the hairpins are good models to study hole transfer through DNA. For PNA•DNA systems consisting of adenine bases on PNA strand and thymine bases DNA strand, the antiparallel configuration exhibits higher stability than the parallel one with the binding free energy of -44 and -24 kcal/mol for antiparallel and parallel duplexes, respectively. These results are consistency with our previous study in which the PNA strand contained thymine bases. This indicated that alternation of base pairs on PNA and DNA strands does not affect the stability of PNA•DNA complex. In addition, study of the effect of adding salt revealed that added salt can screen the negatively charged DNA strand, resulting the significant increase of the stability of DNA duplex; the binding free energy increases from -5 to -20 kcal/mol. However, the added salt has no effect on the stability of PNA•DNA systems. For the ionization potential calculation of adenine-thymine and guanine-cytosine base pairs with PNA and DNA backbones, we found that the obtained ionization potentials are consistency with those of the corresponding base pairs of DNA duplex. This showed that the type of backbone has no significant effect on the ionization potentials of base pairs.