

ได้ศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและอันตรกิริยาของ PNA ซึ่งยึดจับกับ DNA (PNA•DNA) ที่มีโครงสร้างทั้งแบบขนานและขนานสวนรวมถึง DNA•DNA โดยวิธีทางพลวัตเชิงโมเลกุล ผลที่ได้พบว่าโครงสร้างของทั้ง 3 ระบบมีเบสที่เข้าคู่กันอย่างดี และมีพารามิเตอร์ที่บ่งบอกว่ามีลักษณะเป็นแบบบี (B-form) อย่างไรก็ตาม PNA•DNA แบบขนานมีโครงสร้างเบี่ยงเบนจาก B-form เล็กน้อย ฟังก์ชันการกระจายตัวในแนวรัศมีของ PNA•DNA แบบขนานสวนแสดงให้เห็นถึงการมีน้ำมาล้อมรอบหรือซอลเวชันที่น้อยกว่าระบบอื่นๆ นอกจากนี้ได้คำนวณพลังงานในสถานะแก๊ส (H_{gas}) พลังงานอิสระของการซอลเวชัน ($G_{\text{solvation}}$) และเอนโทรปีของตัวถูกละลาย ผลการคำนวณพบว่าโมเลกุล DNA•DNA มีผลต่างพลังงานในสถานะแก๊ส (ΔH_{gas}) มีค่ามากเนื่องจากแรงผลักระหว่างแกนหลักของสาย DNA ทั้ง 2 ที่เป็นประจุลบ ในขณะที่ ΔH_{gas} ของ PNA•DNA จะมีค่าน้อยกว่าถึงแม้ว่า DNA•DNA จะมีค่า $G_{\text{solvation}}$ ต่ำที่สุดแต่เมื่อรวมกับ ΔH_{gas} ที่มีค่าสูงทำให้ผลรวมหรือพลังงานอิสระของการยึดจับมีค่าสูงกว่าระบบที่เป็น PNA ซึ่งผลที่ได้สอดคล้องกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการ

Structural and interaction properties of a novel pyrrolidinyl PNA binding to DNA (PNA•DNA) in both parallel and antiparallel configurations as well as DNA•DNA were studied using molecular dynamics simulations. As a result, the conformations of three simulated systems remain well-defined base pairing and base stacking with the base pair and base step parameters preferred the B-helical structure, although slight distortion from the B form was observed for parallel PNA•DNA duplex. The radial distribution functions of antiparallel PNA•DNA is much less solvated, and hence much higher hydrophobic compared to other two systems. Furthermore, Molecular Mechanics-Generalized Born/surface area approach and normal mode analysis have been used to calculate the binding free energy components, the gas-phase energy H_{gas} , solvation free energy $G_{\text{solvation}}$ and solute entropy. The calculations result that the large gas-phase energy difference, ΔH_{gas} , of DNA system is clearly caused by the repulsion of the two negatively charged sugar-phosphate backbones, whereas the pyrrolidinyl PNA reduces ΔH_{gas} of the PNA•DNA systems significantly, especially in antiparallel fashion. Although DNA•DNA system can be better solvated and hence lower $G_{\text{solvation}}$, summation of these components leads to less binding free energy compared to PNA systems. This indicates that antiparallel PNA•DNA is the most stable duplex, in good agreement with that observed experimentally.