องค์พระปฐมเจดีย์ไม่เคยมีนักโบราณคดีมาขุดค้นทำการศึกษา เป็นหลักฐาน คงมีแต่พระบาทสมเด็จพระจอมเกล้าเจ้าอยู่หัว ทรงให้ทำการขุดลงไปภายในซากเจดีย์พบอิฐหลายขนาด หลายรุ่น จึงทรงพิเคราะห์ว่าเจดีย์องค์นี้เป็นเจดีย์เก่าแก่ ที่มีการสร้างเสริมต่อเติมมาหลายครั้ง สมัยที่พระองค์ทรงทอดพระเนตรครั้งแรกนั้น พระเจดีย์เป็นฐานกลม แต่มียอดเป็นปรางค์ ซึ่งเป็นส่วนที่ทำขึ้นใหม่ ยอดเจดีย์เดิมหักไป จึงให้ทำการบูรณะให้งดงามสูงใหญ่แล้วให้ชื่อว่า "พระปฐมเจดีย์" จากการศึกษารูปแบบขององค์พระปฐมเจดีย์ในอดีตจากข้อมูลด้านต่างๆแล้ว อาจสันนิษฐานได้ว่าพระเจดีย์องค์นี้คงจะมีรูปลักษณะที่แตกต่างกันไปตามยุค สมัยดังนี้

เมื่อพระเจ้าอโศกมหาราชแห่งชมพูทวีป เผยแพร่พุทธศาสนามายังดินแดนสุวรรณภูมิโดยพระโสณะเถระ และพระอุตรเถระ เป็นสมณฑูต ทำ ให้เกิดการสร้างสถูปสำหรับบรรจุพระบรมสารีริกธาตุของพระพุทธเจ้าขึ้น ณ เมืองโบราณของจังหวัดนครปฐมในอดีตรูปร่างของสถูปคงเป็นลักษณะเดียวกับสถูป ที่เมืองสาญจิ ในรัฐมัธยมประเทศ ภาคกลางของอินเดียในอดีต เป็นศิลปะสมัยคุปตะมีความสูงประมาณ 37 เมตร (18 วา 2 ศอก) มีอายุล่วงมาแล้ว 2,245 ปี

องค์พระปฐมเจดีย์เกิดขึ้น เพราะพระบาทสมเด็จพระจอมเกล้าเจ้าอยู่หัว ทรงพบเจดีย์ขนาดใหญ่มียอดเป็นปรางค์ ก่อขึ้นไปบนเนินดินอยู่กลางป่า พิเคราะห์ดูแล้วว่าเป็นของโบราณ ชาวบ้านนับถือสักการะกันมาเป็นเวลายาวนาน เรียกว่า "พระธม" มีพระบรมสารีริกธาตุบรรจุอยู่ภายใน ทรงเลื่อมใสศรัทธาแล้วทำการบูรณะให้มีความใหญ่โตถาวร เป็นการสืบพระพุทธศาสนาให้คู่กับชาติไทยสืบไป พระองค์โปรดเกล้าฯให้บูรณะเป็นเจดีย์ทรงลังกากลม สูง 120.45 เมตร นับว่าเป็นเจดีย์ที่มีความสูงที่สุดในโลก ให้ชื่อว่า "พระปฐมเจดีย์" ตาม หนังสือเก่าๆที่พระองค์ทรงทอดพระเนตรพบ ห่อหุ้มเจดีย์ทั้งสามสมัยดังกล่าวไว้ถ้าเดินเข้าไปในช่องบัวใบเทศ จะพบที่ว่างภายในเป็นทางให้เดินทักษิณาวัตรรอบพระปฐมเจดีย์องค์เดิมได้ แต่จะไม่เห็นผิวของเจดีย์องค์เดิมมากนักเพราะมีการก่ออิฐหุ้มไว้ มีช่องขนาด 175 x 75 เซนติเมตรอยู่ทั้ง 4 ทิศ เปิดผิวเจดีย์องค์เดิมให้เห็นได้เล็กน้อย เมื่อเดือนธันวาคม 2544 สมเด็จพระบรมโอรสาธิราช สยามราชกุมาร เสด็จมาทำพิธีบรรจุพระพุทธรูปของสมเด็จพระบรมราชินีนาถ ลงในช่องทิศตะวันออกพระปฐมเจดีย์ราชวรมหาวิหารเป็นสัญลักษณ์ของประเทศไทย ที่สำคัญและเชิดหน้าชูตา นั่น คือองค์พระปฐมเจดีย์ ปูชนียสถานสำคัญทางพระพุทธศาสนาเจดีย์องค์แรกในสุวรรณภูมิก่อนแห่งใดในโลก จึงเป็นที่เชิดหน้าชูตาของชาวไทยทั้งชาติ แทบทุกวันจะมีนักทัศนาจรทั้งชาวไทยและชาวต่างประเทศมานมัสการอยู่เสมอ เป็นแหล่งศึกษาค้นคว้าประวัติศาสตร์ เนื่องจากรวบรวมโบราณวัตถุไว้มากมาย เป็นที่ตั้งของพิพิธภัณฑ์สถานแห่งชาติ จากหนังสือเรื่องพระปฐมเจดีย์กับนำเที่ยวของ ม.จ.สุภัทรดิศ ดิศกุล ทรงนิพนธ์ไว้ ท่านให้ความเห็นเกี่ยวกับการสร้างพระปฐมเจดีย์ว่า การที่จะทราบว่าพระปฐมเจดีย์สร้างขึ้นเมื่อใด และใครเป็นผู้สร้างนั้น จะต้องย้อนกล่าวตั้งแต่พระพุทธองค์เสด็จดับขันธนิพพาน พระพุทธศาสนาได้แพร่หลายอยู่ในมัชฌิมประเทศคืออินเดียตอนกลาง แต่ยังหาได้เป็นศาสนาประธานของประเทศไม่ ต่อมาสมัยพระเจ้าอโศกมหาราชขึ้นครองราชสมบัติ ในแคว้นมคธของอินเดียเมื่อ พ.ศ. 274 ทรงเป็นกษัตริย์ที่มีพระเดชานุภาพใหญ่หลวง พระองค์สลดพระทัยในการรบพุ่ง มุ่งหมายจะแผ่พระเดชานุภาพทางธรรมเพราะทรงเห็นว่า พระพุทธศาสนามีคติธรรมล้ำเลิศกว่าศาสนาอื่น ๆ จึงทรงอุปถัมภ์และเผยแพร่ในนานาประเทศ โดยส่งพระสงฆ์เป็นสมณฑูตออกไป มีข้อความตอนหนึ่งในหนังสือมหาวงศ์คือ พงศาวดารของเกาะลังกา โดยพรรณาไว้ว่า "สุวรรณภูมิ เถเรเทวโสณ อุตตรเมวจ" แปลความว่า ให้พระโสณเถระกับพระอุตรไปยังสุวรรณภูมินักปราชญ์ทั้งหลายเห็นพ้องกับอาจารย์ริสเดวิดส์ที่ว่าเริ่มต้นแต่รามัญประเทศ (คือเมืองมอญ) ไปจดเมืองญวน และตั้งแต่พม่าไปจนถึงปลายแหลมมาลายูเมืองนครปฐม น่า จะเป็นราชธานีของสุวรรณภูมิ และคงเรียกว่า สุวรรณภูมิ ซึ่งเป็นเมืองหลวงของประเทศด้วยหลักฐานที่ปรากฏชัดว่าเมืองนครปฐมเป็นเมือง ที่พระพุทธศาสนามาเผยแพร่เป็นครั้งแรกที่นี่คือ องค์พุทธเจดีย์ สันนิษฐานว่าสร้างในสมัยเดียวกับครั้งพระเจ้าอโศกมหาราชยังครองราชสมบัติ อยู่แน่นอน เพราะลักษณะองค์เจดีย์นั้น เดิมเป็นสถูปกลมรูปทรงคล้ายบาตรคว่ำ (โอคว่ำ) แบบสัญจิเจดีย์ ในประเทศอินเดียที่พระเจ้าอโศกมหาราชสร้างไว้และวัดที่สร้างขึ้นเป็นวัดแรก ในประเทศไทย ก็คือ วัดพระปฐมเจดีย์นี่เองผู้ปกครองวัดหรือสมภารเจ้าวัดก็คือพระอรหันต์ ผู้นำพระพุทธศาสนามาเผยแพร่ในยุคนั้นผู้สร้างพระเจดีย์องค์เดิม จะต้องเป็นพระมหากษัตริย์ผู้ยิ่งใหญ่ที่มีกำลังความสามารถมากและคงสร้างไว้ ในเมืองหลวงด้วย พระสถูปองค์เดิมสูง 19 วา 2 ศอก (35 เมตร) หลักฐานอื่น ๆ ที่พบมากได้แก่ พระสถูปต่าง ๆ ศิลธรรมจักร จารึกพระธรรมเป็นภาษามคช คือ คาถาเยธมมา พระแท่นพุทธอาสน และรอยพระพุทธบาท ทำเป็นที่สักการะแทนพระพุทธรูปในสมัยนั้น ยังไม่มีพระพุทธรูป ลักษณะขององค์พระเจดีย์ตอนบนเป็นพุทธอาสนสี่เหลี่ยมตั้งไว้มีฉัตรปักเป็น ยอด ฐานพระสถูปเป็นรูปสี่เหลี่ยมรอบฐานทำเป็นที่เดินประทักษิณ มีรั้วล้อมรอบภายนอก ก่อด้วยอิฐชนิดเดียวกันเมื่อมีพระปฐมเจดีย์ก็น่าจะมีสิ่งก่อสร้างอื่น ๆ ตามมามีการปฏิบัติธรรมของพระสงฆ์เป็นครั้งคราวโดยเฉพาะในฤดูเข้าพรรษา สมเด็จกรมพระยาดำรงราชานุภาพได้ทรงกล่าวไว้ในหนังสือมูลเหตุแห่งการสร้าง วัดในประเทศสยามข้อ 3 ว่า ”…ที่ลานพระปฐมเจดีย์ ข้าพเจ้าได้ลองให้ขุดคูแห่งหนึ่งที่ริมถนนขวาพระ ก็พบซากห้องกุฏิพระสงฆ์แต่โบราณ....." ก็แสดงว่าวัดแรกของประเทศไทยก็คือวัดพระปฐมเจดีย์นี่เอง และกุฏิสมัยนั้นอยู่ทางด้านขวาพระเมืองนครปฐมได้เจริญและเสื่อมลง วัดพระปฐมเจดีย์ก็เช่นเดียวกันได้ชำรุดทรุดโทรมรกร้างไปตามสภาพบ้านเมือง จนกระทั่งถึงสมัยรัชกาลที่ 2 ในราชวงศ์จักรี กุฏิของพระสงฆ์ได้ย้ายมาอยู่ทางด้านทิศเหนือขององค์พระปฐมเจดีย์ คือทางด้านหน้าวิหารพระร่วงโรจนฤทธิ์ ศาลาการเปรียญอยู่บริเวณด้านพระศรีมหาโพธิ์ หมู่กุฏิพระสงฆ์ ปลูกอยู่ทางด้านตะวันตกของศาลาการเปรียญ ส่วนพระอุโบสถคงอยู่ ณ ที่เดิมคือ ด้านตะวันออก ตรงกับพระอุโบสถในปัจจุบัน เพียงแต่ว่าตั้งอยู่กับพื้นดินการสร้างพระเจดีย์จะต้องบรรจุพระบรม สารีริกธาตุ แน่นอนเพราะสมัยที่พระเจ้าอโศกมหาราช ได้ทรงมอบพระบรมสารีริกธาตุให้สมณฑูตทุกสาย สมณฑูตเหล่านั้นเมื่อประกาศพระพุทธศาสนา ณ ที่ใดเป็นหลักฐานมั่งคงแล้ว ก็จะสร้างพระเจดีย์เพื่อบรรจุพระบรมสารีริกธาตุเช่นเดียวกับที่พระองค์ได้ ทรงกระทำในชมพูทวีป

พระปฐมเจีย์ได้รับการปฏิสังขรร์มาหลายสมัยจากสถูปทรงโอ่งคว่ำ คือ   
1. สมัยสุวรรณภูมิ ตั้งแต่แรกสร้างปฐมเจดีย์ ราว พ.ศ. 350 - ราว พ.ศ. 1000   
2. สมัยทวารวดี เป็นสมัยที่ก่อสร้างเพิ่มเติมองค์พระปฐมเจดีย์ตั้งแต่ ราว พ.ศ. 1000 จนถึง พ.ศ. 1600   
3. สมัยพระปฐมเจดีย์ทรุดโทรม ตั้งแต่ พ.ศ. 1600 จนถึง พ.ศ. 2396 จนถึงสมัยปัจจุบัน

รูปพรรณสัณฐานขององค์พระปฐมเจดีย์องค์เดิม ๆ เป็นอย่างไรก็ขอให้พิจารณาดูรูปเขียนบนฝาผนังด้านองค์พระเจดีย์ และมีเจดีย์จำลองอย่างทางทิศใต้ ในเรื่องการสร้างองค์เจดีย์แต่เดิมนั้น มีเล่าสืบ ๆ กันมาเป็นตำนานอยู่หลายตำนานด้วยกัน ดังจะยกจากเรื่องพระปฐมเจดีย์ของท่านเจ้าพระยาทิพากรวงศ์ (ชำ บุนนาค) เรียบเรียงไว้แต่ปีฉลู พ.ศ. 2408 ซึ่งสำนักงานจัดทำประโยชน์และรักษาองค์พระปฐมเจดีย์ จัดพิมพ์เมื่อ 8 พฤษภาคม พ.ศ. 2516 เป็นตำนานฉบับพระยาราชสัมภากรและฉบับตาประขาวรอดได้เล่าไว้ว่า ท้าวภาลีธิราช ครองเมืองศรีวิชัย (คือ เมืองนครชัยศรี) มีบุตรชายชื่อ พระยากง ต่อมาพระยากงได้ครองราชย์สมบัติแทนบิดาที่สวรรคตไป