

# 慣性半径 (Radius of Gyration)

山内 仁喬

2021 年 11 月 30 日

慣性半径  $R_g$  は,

$$R_g = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N m_i r_i^2}{\sum_{i=1}^N m_i}} \quad (1)$$

で計算される。ここで,  $N$  は原子数,  $r_i$  は重心からの距離であり,  $m_i$  は原子の質量である。分子の重心は,

$$\mathbf{r}_{\text{com}} = \frac{\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i}{\sum_{i=1}^N m_i} \quad (2)$$

のように計算できる。慣性半径は、分子の広がり具合（質量がどの程度広がりを持って分布しているか）を表す指標として用いられる。また、慣性半径は X 線小角散乱から実験的に求めることもできるため、分子動力学シミュレーションと実験を比較するときにも使用される。