

慣性半径 (Radius of gyration)

山内 仁喬

2021 年 1 月 31 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、分子の拡がり具合 (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。