

慣性半径 (Radius of Gyration)

山内 仁喬

2024 年 3 月 6 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。