自由回転鎖の平均 2 乗両末端間距離の導出（要点のみ）

講義の時に使用した図と対比させて考えること。

隣接する結合ベクトルの内積（時間平均）は

$\langle b_i \cdot b_{i+1} \rangle = b^2 \cos\theta$・・・長さ b、なす角 θ のベクトルの内積

1 つ離れた結合ベクトルの内積は

$$\langle b_i \cdot b_{i+1} \rangle = b^2 \cos^2\theta$$

一般に、k だけ離れた結合ベクトルの内積は

$\langle b_i \cdot b_{i+k} \rangle = b^2 \cos^k\theta = b^2 p^k$ （$\cos\theta = p$ とおく）

平均 2 乗両末端間距離の一般式は

$$\langle R^2 \rangle = nb^2 + 2\{\langle b_1 \cdot b_2 \rangle + \langle b_1 \cdot b_3 \rangle + \langle b_1 \cdot b_4 \rangle + \langle b_1 \cdot b_5 \rangle + \langle b_1 \cdot b_6 \rangle + \cdots + \langle b_{n-1} \cdot b_n \rangle\}$$

$$= nb^2 + 2\sum\sum\langle b_i \cdot b_j \rangle$$

$\sum\sum\langle b_i \cdot b_j \rangle$ の書き出し方に注意する。2 をすでに和Σの外に出しているので、ダブりに注意しながら、書き下してみる。

b_1と積を作るものは、b_2からb_nまで。・・・計n–1 項

$$\langle b_1 \cdot b_2 \rangle + \langle b_1 \cdot b_3 \rangle + \langle b_1 \cdot b_4 \rangle + \langle b_1 \cdot b_5 \rangle + \langle b_1 \cdot b_6 \rangle + \cdots + \langle b_1 \cdot b_n \rangle$$

$$= b^2 p + b^2 p^2 + b^2 p^3 + b^2 p^4 + b^2 p^5 + \cdots + b^2 p^{n-1}$$

b_2と積を作るものは、b_3からb_nまで。・・・計n–2 項

$$\langle b_2 \cdot b_3 \rangle + \langle b_2 \cdot b_4 \rangle + \langle b_2 \cdot b_5 \rangle + \langle b_2 \cdot b_6 \rangle + \cdots + \langle b_2 \cdot b_n \rangle$$

$$= b^2 p + b^2 p^2 + b^2 p^3 + b^2 p^4 + b^2 p^5 + \cdots + b^2 p^{n-2}$$

b_3と積を作るものは、b_4からb_nまで。・・・計n–3 項

$$\langle b_3 \cdot b_4 \rangle + \langle b_3 \cdot b_5 \rangle + \langle b_3 \cdot b_6 \rangle + \langle b_3 \cdot b_7 \rangle + \cdots + \langle b_3 \cdot b_n \rangle$$

$$= b^2 p + b^2 p^2 + b^2 p^3 + b^2 p^4 + b^2 p^5 + \cdots + b^2 p^{n-3}$$

b_{n-1}と積を作るものは、b_nのみ。･･･1 項のみ

$$\langle b_{n-1}\cdot b_n\rangle = b^2 p$$

これらの総和をとるとき、b^2pという項は$n-1$ 回現れる。pの指数が 1 つ増えるごとに、個数が 1 つ減って、b^2p^{n-1}は 1 項のみである。従って、

$$\sum\sum\langle b_i\cdot b_j\rangle = (n-1)b^2 p + (n-2)b^2 p^2 + (n-3)b^2 p^3 + \cdots + b^2 p^{n-1}$$

$$= b^2\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)p^k = b^2\left(\sum_{k=1}^{n-1}np^k - \sum_{k=1}^{n-1}kp^k\right) = nb^2\sum_{k=1}^{n-1}p^k - b^2\sum_{k=1}^{n-1}kp^k$$

ここで、$\sum_{k=1}^{n-1}kp^k = \frac{1}{1-p}\left\{\frac{p(1-p^{n-1})}{1-p} - (n-1)p^n\right\}$なので、（1 回目の宿題と同じ手法）

$$b^2\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)p^k = nb^2\frac{p(1-p^{n-1})}{1-p} - b^2\frac{1}{1-p}\left\{\frac{p(1-p^{n-1})}{1-p} - (n-1)p^n\right\}$$

$$= b^2\left\{\frac{np - np^n + np^n - p^n}{1-p} - \frac{p-p^n}{(1-p)^2}\right\}$$

以上より、

$$\langle R^2\rangle = nb^2 + 2b^2\left\{\frac{np-p^n}{1-p} - \frac{p-p^n}{(1-p)^2}\right\}$$

$$= nb^2\left\{\frac{1-p+2p-2p^n/n}{1-p} - \frac{2(p-p^n)}{n(1-p)^2}\right\}$$

$$= nb^2\left\{\frac{1+p}{1-p} - \frac{1}{n}\frac{2p^n}{1-p} - \frac{2(p-p^n)}{n(1-p)^2}\right\}$$

$$= nb^2\left\{\frac{1+p}{1-p} - \frac{2p}{n}\frac{1-p^n}{(1-p)^2}\right\}$$

$n\to\infty$の時、第 2 項は無視できるので、

$$\langle R^2\rangle = nb^2\frac{1+p}{1-p} = nb^2\frac{1+\cos\theta}{1-\cos\theta}$$ ・・・となることが確かめられた。