

クライン・ゴールドン方程式

最初に、ミンコフスキー時空での表記の話をまとめています。
クライン・ゴールドン方程式は導出だけ行って、詳しい話はしていません。
特殊相対性理論の入門的な話は知っているとしています。

表記の定義を最初にしておきます (後で出てくるものもここに載せておきます)。計量は特殊相対論でのものを使い、符号は $(+, -, -, -)$ を採用して

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

線素 ds^2 は

$$ds^2 = (cdt)^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$$

によって与えられます。 $ds^2 > 0$ が時間的 (time-like)、 $ds^2 < 0$ が空間的 (space-like)、 $ds^2 = 0$ が光的 (light-like) です (光的はヌル的 (null-like) とも呼ばれます)。

計量によって座標 (0 成分が時間、1~3 成分が空間座標) の反変ベクトル x^μ と共変ベクトル x_μ の 4 次元での内積は

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) = (ct, \mathbf{x})$$

$$x_\mu = (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, x_1, x_2, x_3) = (ct, -x, -y, -z) = (ct, -\mathbf{x})$$

$$g_{\mu\nu}x^\mu = x_\nu$$

$$g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu = x^\mu x_\mu = x \cdot x = x^2 = (ct)^2 - ((x_1)^2 + (x_2)^2 + (x_3)^2) = (ct)^2 - \mathbf{x}^2$$

$$x^\mu y_\mu = x \cdot y = x_0 y_0 - (x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3) = x_0 y_0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$$

と定義し、太字は 3 次元ベクトルとします。通常、特殊相対論で出てくる 4 次元のベクトル (ローレンツ変換に従う 4 成分持ちのベクトル) は 4 元ベクトルと呼ぶことが多いです。 $x^\mu y_\mu = x \cdot y$ は単に xy のように書くことができるので注意してください。同じベクトルの内積 $x^\mu x_\mu$ を、 $x^\mu x_\mu > 0$ は時間的、 $x^\mu x_\mu < 0$ は空間的、 $x^\mu x_\mu = 0$ は光的と呼ぶのは線素と同じです。

添え字に対してはアインシュタインの規約

$$\sum_{\mu=0}^3 x^\mu x_\mu = x^\mu x_\mu$$

を使うことにします。3次元ベクトル成分1~3だけの場合でも同じように和を省略します。3次元成分にはローマ文字をあてることにし、例えば

$$x_\mu y^\mu = x_0 y^0 + x_i y^i = x_0 y^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$$

式の中に同じ添え字があることを添え字を潰すと言ったりもします。そのように潰されている添え字は式の外に出てこないの、好き勝手に文字を付け替えられます。そのような添え字をダミーインデックスとも言います。例えば、 $A^\mu + B_\nu C^\nu D^\mu = A^\mu + B_\alpha C^\alpha D^\mu$ のようなことで、 ν, α の添え字が潰れています。

4元運動量と微分演算子は

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left(\frac{E}{c}, p^1, p^2, p^3\right) = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p}\right)$$

$$p_\mu = \left(\frac{E}{c}, -\mathbf{p}\right)$$

$$p^\mu x_\mu = \frac{E}{c} ct + p^1 x_1 + p^2 x_2 + p^3 x_3 = \frac{E}{c} ct + g_{11} p^1 x^1 + g_{22} p^2 x^2 + g_{33} p^3 x^3 = Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$$

$$\partial^\mu = (\partial^0, \partial^1, \partial^2, \partial^3) = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, -\nabla\right)$$

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \nabla\right)$$

$$\hat{p}^\mu = i\hbar\partial^\mu$$

x^μ と ∂^μ の符号が異なっていることに注意してください。ナブラ ∇ は

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) = \partial_i = -\partial^i$$

微分演算子の作用の仕方は例えば

$$\partial_\mu A^\mu = \partial_0 A^0 + \partial_i A^i = \partial_0 A^0 + \nabla \cdot \mathbf{A}$$

$$\partial_\mu (p \cdot x) = p_\nu \partial_\mu x^\nu = p_\nu \frac{\partial x^\nu}{\partial x^\mu} = p_\nu \delta_\mu^\nu = p_\mu$$

δ_μ^ν はクロネッカーデルタで、 $\delta_\mu^\nu = 1$ ($\mu = \nu$) , $\delta_\mu^\nu = 0$ ($\mu \neq \nu$) です。ちなみに、 $g^\mu_\nu = \delta^\mu_\nu$ は計量の定義です。また、 \exp の微分は頻繁に出てきて

$$\partial_\mu \exp[p_\nu x^\nu] = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \exp[p_\nu x^\nu] = p_\alpha \frac{\partial x^\alpha}{\partial x^\mu} \exp[p_\nu x^\nu] = p_\mu \exp[p_\nu x^\nu]$$

このように、微分演算子 ∂_μ が単に p_μ に置き換わります。もし3次元部分だけを微分するなら

$$\partial_i \exp[p_\nu x^\nu] = \partial_i \exp[p_0 x_0 + p_i x^i] = \frac{\partial}{\partial x^i} \exp[p_0 x_0 + p_i x^i] = p_i \exp[p_0 x_0 + p_i x^i]$$

$$\nabla \exp[p_\nu x^\nu] = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \exp[p_0 x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}] = -(p_x, p_y, p_z) \exp[p_0 x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}] = p_i \exp[p_0 x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}]$$

ここでは

$$\partial_i = \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = -p_i, \quad \mathbf{x} = (x, y, z)$$

としましたが、表記の仕方はいろいろあるので注意が必要です。

ここでの定義はそのまま、相対論的量子力学、QED、場の量子論、有限温度の場の理論、弦理論全体で特に断らない限り使います。

言葉の注意をしておきます (電磁気学の「ミンコフスキー空間」参照)。4次元でのベクトル x^μ と4次元での運動量 p^μ を使っていますが、何も考えずに4成分のベクトルとして作っているわけではないです。そもそも、大本の4元ベクトルは時間と位置の座標による x^μ です。そして、 x^μ は

$$\bar{x}^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \quad (\Lambda^\mu_\nu = \frac{\partial \bar{x}^\mu}{\partial x^\nu})$$

という変換を満たすとして定義されます。つまり、この変換規則に従うものを4元ベクトルです。というわけで、特殊相対論をもとにする話では、何でもかんでも4つの成分を持ったベクトルを4元ベクトルと呼ぶわけではないことに注意してください (ローレンツの4元ベクトルと呼んで区別している本もある)。

4元ベクトルの和の内積は

$$(x \pm y)_\mu (x \pm y)^\mu = (x \pm y)^2 = x^2 + y^2 \pm 2x \cdot y$$

$$(x + y) \cdot (x - y) = x^2 - y^2$$

x, y は4元ベクトル x_μ, y_μ 、 $x \cdot y$ は4次元での内積です。また、表記の定義が分かっているならば当たり前ですが

$$a_\mu b^\mu = a_\alpha c^\alpha$$

$$b^\mu = c^\alpha$$

とはできませんが

$$a_\mu b^\mu c^\nu = x_\alpha c^\alpha y^\nu$$

$$a_\mu b^\mu = x_\alpha y^\alpha$$

として、このように両辺にいる c^μ を落とすのは間違いです。

4元ベクトルの計算例がてら、時間的なベクトルと空間的なベクトルが直交することを示します。ここでの直交は4元ベクトルの内積が0という意味です。つまり、時間的なベクトルを t_μ 、空間的なベクトルを s_μ とすると

$$t_\mu s^\mu = 0$$

ということです。これを証明するのは簡単です。 $t_\mu s^\mu$ を展開すれば

$$t_\mu s^\mu = t_0 s^0 + t_1 s^1 + t_2 s^2 + t_3 s^3 = t_0 s_0 - \mathbf{t} \cdot \mathbf{s} = 0$$

これに、 t^μ は時間的 $t_0^2 - \mathbf{t}^2 > 0$ なので

$$t_0^2 > \mathbf{t}^2$$

$$t_0^2 s_0^2 > \mathbf{t}^2 s_0^2$$

となっていることを使えば

$$t_0 s_0 = \mathbf{t} \cdot \mathbf{s}$$

$$t_0^2 s_0^2 = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{s})^2$$

$$\mathbf{t}^2 s_0^2 < (\mathbf{t} \cdot \mathbf{s})^2$$

さらにシュワルツの不等式から

$$(\mathbf{t} \cdot \mathbf{s})^2 \leq \mathbf{t}^2 \mathbf{s}^2$$

なので

$$\mathbf{t}^2 s_0^2 < \mathbf{t}^2 \mathbf{s}^2$$

$$s_0^2 < \mathbf{s}^2$$

$$s_0^2 - \mathbf{s}^2 < 0$$

となり、 s^μ は空間的です。ちなみに、時間的なベクトルに直交するのは空間的なベクトルですが、空間的なベクトルに直交するベクトルは時間的なベクトルとは限りません。

時間的と空間的なベクトルが直交することから、任意のベクトル x^μ は時間的な単位ベクトル e^μ ($e^\mu e_\mu = 1 > 0$) と空間的なベクトル s^μ によって

$$x^\mu = s^\mu + e^\nu x_\nu e^\mu$$

と書けます。確認するのは簡単で、両辺に e_μ をかけると

$$\begin{aligned} e_\mu x^\mu &= e_\mu s^\mu + e^\nu x_\nu e_\mu e^\mu \\ &= e_\mu s^\mu + e^\nu x_\nu \end{aligned}$$

時間的なベクトルと空間的なベクトルは直交するために $e_\mu s^\mu = 0$ なので、両辺が等しくなり成立していることが確かめられます。

ディラック方程式に関連した記号で、当たり前のごとく使われる表記をついでにここに載せておくと

$$\psi^\dagger \gamma_0 = \bar{\psi}$$

この記号は相対論的量子力学（ディラック方程式が出てくる話）では、当たり前のように使われるものなので覚えてください。

ここからクライン・ゴールドン方程式の話に移ります。量子力学において、3次元運動量 \mathbf{p} とエネルギー E の演算子化は

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = -i\hbar \nabla \\ E &\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{aligned}$$

と与えられています。ポテンシャルのない自由粒子とすれば、エネルギーは

$$E = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2$$

これを演算子化し、両辺に波動関数をくっつければシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t)$$

になります。

これを特殊相対論でのエネルギー

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (p^2 = E^2 - \mathbf{p}^2 c^2 = m^2 c^4)$$

に拡張したらどうなるのか、というのが相対論的量子力学の大本になります。つまり、このエネルギーを演算子化し、それに波動関数をくっつけばいいだけという話です。しかし、これを演算子化すると

$$\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \Rightarrow \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4}$$

となり、微分演算子のルートが出てきてしまいます。単純には、 $\hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi$ より $m^2 c^4 \psi$ が十分大きいとし

$$\sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} = 1 - \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 c^2 \nabla^2}{m^2 c^4} + \dots$$

と展開すれば定義できます。もしくは、フーリエ変換によって定義できますが省きます。

というわけで、ルートをなくすために E^2 を使うことにします。そうすると

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi &= E^2 \psi \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi &= -c^2 \hbar^2 \nabla^2 \psi + m^2 c^4 \psi \\ -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi + \nabla^2 \psi &= \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \psi \\ (\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \psi &= 0 \quad (\square = \partial_\mu \partial^\mu) \end{aligned}$$

これがクライン・ゴルドン (Klein-Gordon) 方程式です。ちなみに、クライン・ゴルドン方程式を最初に作ったのはシュレーディンガーです。クライン・ゴルドン方程式による水素原子のエネルギーが実験と合わなかったために、シュレーディンガーはクライン・ゴルドン方程式を諦めてしまいました。また、同時期にフォックも導いてますが、フォックは含めないことが多いです。

相対論的量子力学の話ではこれ以上クライン・ゴルドン方程式について触れる必要性がないので、詳しい話は場の量子論の「クライン・ゴルドン方程式～複素スカラー場～」に回してしまいます。

簡単にクライン・ゴルドン方程式の問題に触れておきます。まず、クライン・ゴルドン方程式の平面波解として、正エネルギーと負エネルギーを持ったものが独立に出てきます。このため、負エネルギーを持った自由粒子というわけの分からない状態が出てきます。

さらに、負の確率が現れてしまい、確率解釈ができません。これは確率密度が $|\psi|^2$ ではないためです。確率密度を与えるためにクライン・ゴルドン方程式での連続の方程式を求めておきます。クライン・ゴルドン方程式に左から ψ をかけ、その複素共役を取ったものを引くと

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^* (\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \psi - \psi (\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \psi^* \\ &= \psi^* (\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2) \psi - \psi (\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2) \psi^* \\ &= \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{c^2 \partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{c^2 \partial t^2} - (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \\ &= \frac{1}{c^2} (\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}) - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} (\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}) + \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}) \\ &\quad - (\nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi) - \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^*) + \nabla \psi \cdot \nabla \psi^*) \\ &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}) + \nabla \cdot (-(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi)) \end{aligned}$$

第 1 項と第 2 項は

$$\frac{i\hbar}{2mc^2} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}) = \frac{\partial}{\partial t} \rho$$

と書けるので、第 3 項を

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi)$$

とすれば

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

となり、連続の方程式になります。 ρ, \mathbf{j} は 4 元カレントとして

$$j^\mu = (c\rho, j^i) = (c\rho, \mathbf{j}) = (\rho c, j_x, j_y, j_z)$$
$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}), \quad j^i = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \partial^i \psi - (\partial^i \psi^*) \psi)$$

とでき、これによって連続の方程式は

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

となり、ローレンツ共変な形になります。

量子力学の「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」で触れたように、連続の方程式での ρ が時間依存しない定数であるために確率解釈が可能になっています。しかし、 $|\psi|^2$ は正ですが、ここでの ρ は一般的に正になる必要がありません (簡単に言えば、クライン・ゴールドン方程式は 2 階微分方程式なので、初期値は $\phi_0, \partial\phi_0/\partial t$ の 2 つで与えられるために符号に任意性がある)。このため、負の確率が現れ、確率解釈ができなくなります。

こういった問題を解決した相対論的方程式がディラック方程式です。ディラックの理論では、負のエネルギー解に意味を与え、確率解釈を可能とします。

最後に、クライン・ゴールドン方程式がシュレーディンガー方程式に対応することを見ておきます。クライン・ゴールドン方程式の解として

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) \exp[-\frac{i}{\hbar} mc^2 t]$$

これは静止質量による項を分離して書いただけです。この非相対論的極限を取ります。非相対論では、運動エネルギー E は $E \ll mc^2$ です (この極限を取るために静止質量の項を分離している)。

これをクライン・ゴールドン方程式に適用させます。まず、これを時間で 1 回微分して

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} - i \frac{mc^2}{\hbar} \phi \right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right]$$

もう1回微分して

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - i \frac{mc^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} - i \frac{mc^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi \right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right]$$

ϕ からは mc^2 が分離しているので、 ϕ のエネルギー固有値は mc^2 よりも十分小さいとして

$$|i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi| \ll |mc^2 \phi|$$

とすれば

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \simeq -\left(i \frac{2mc^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi\right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right]$$

これをクライン・ゴールドン方程式に入れると

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi &= \nabla^2 \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi \\ -\frac{1}{c^2} \left(i \frac{2mc^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi \right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right] &= \left(\nabla^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi \exp\left[-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right] \\ -i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \nabla^2 \phi \\ i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi \end{aligned}$$

これがクライン・ゴールドン方程式の非相対論的極限で、自由粒子のシュレーディンガー方程式そのものになります。ついでに電磁場がある場合も求めます。マクスウェル方程式は

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E}(x) &= 4\pi \kappa_e \rho(x) \\ \nabla \cdot \mathbf{B}(x) &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E}(x) &= -\frac{1}{\kappa_b} \frac{\partial \mathbf{B}(x)}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{B}(x) - \frac{\kappa_b \kappa_m}{\kappa_e} \frac{\partial \mathbf{E}(x)}{\partial t} &= 4\pi \kappa_b \kappa_m \mathbf{j}(x) \end{aligned}$$

E は電場、 B は磁場、 ρ は電荷密度、 j は電流密度、 $\kappa_e, \kappa_b, \kappa_m$ は比例定数です(電磁気学では α, β_b, β_m としていますが、紛らわしくなるので κ にしています)。速度 v を持つ電荷 q の粒子に作用するローレンツ力 F は

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \kappa_b^{-1}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}))$$

スカラーポテンシャル Φ と 3次元ベクトルポテンシャル \mathbf{A} は

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{\kappa_b} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

4元ベクトルポテンシャルとすれば

$$A^\mu = (A_0, \mathbf{A}) = \left(\frac{\kappa_b}{c} \Phi, \mathbf{A}\right)$$

例えば cgs-ガウス単位系 ($\kappa_b = c$) や SI($\kappa_b = 1$) なら

$$\text{cgs-ガウス: } A^\mu = (\Phi, \mathbf{A}), \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$\text{SI: } A^\mu = \left(\frac{\Phi}{c}, \mathbf{A}\right), \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

となります。

電磁場があるときへの置き換えは量子力学の「スピン」で求めたように

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi, \quad -i\hbar \nabla \Rightarrow -i\hbar \nabla - \frac{q}{\kappa_b} \mathbf{A}$$

$\Phi = c\kappa_b^{-1}A_0$ から

$$i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c} \Phi = i\hbar \partial_0 - \frac{q}{\kappa_b} A_0, \quad -i\hbar \nabla - \frac{q}{\kappa_b} \mathbf{A} = i\hbar \partial^i - \frac{q}{\kappa_b} A^i$$

なので、4次元表記にすれば

$$i\hbar \partial^\mu \Rightarrow i\hbar \partial^\mu - \frac{q}{\kappa_b} A^\mu$$

もしくは、 $A'^\mu = \kappa_b^{-1} A^\mu$ ($\mathbf{B}' = \kappa_b^{-1} \mathbf{B}$) とすれば $i\hbar \partial^\mu - qA'^\mu$ とできます。この置き換えによって、電磁場中のク
ライン・ゴールドン方程式は

$$(-(i\hbar \partial_\mu)(i\hbar \partial^\mu) + m^2 c^2)\psi = 0 \Rightarrow \left(-\left(i\hbar \partial_\mu - \frac{q}{\kappa_b} A_\mu\right)\left(i\hbar \partial^\mu - \frac{q}{\kappa_b} A^\mu\right) + m^2 c^2\right)\psi = 0$$

成分をわければ

$$(-i\hbar\partial_0 - \frac{q}{\kappa_b}A_0)(i\hbar\partial^0 - \frac{q}{\kappa_b}A_0) - (i\hbar\partial_i - \frac{q}{\kappa_b}A_i)(i\hbar\partial^i - \frac{q}{\kappa_b}A^i) + m^2c^2\psi = 0$$

第1項と第2項はそれぞれ2乗なので

$$((i\hbar\partial_0 - \frac{q}{\kappa_b}A_0)^2 - (-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A})^2 - m^2c^2)\psi = 0 \quad (1)$$

3次元部分は

$$\begin{aligned} (i\hbar\partial_i - \frac{q}{\kappa_b}A_i)(i\hbar\partial^i - \frac{q}{\kappa_b}A^i) &= g_{ij}(i\hbar\partial^i - \frac{q}{\kappa_b}A^i)(i\hbar\partial^j - \frac{q}{\kappa_b}A^j) \\ &= -(-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A}) \cdot (-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A}) \end{aligned}$$

となっています。これの非相対論的極限を取ります。

電磁場がないときと同じように

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) \exp[-\frac{i}{\hbar}mc^2t]$$

として

$$(i\hbar\partial_0 - \frac{q}{\kappa_b}A_0)\psi = (i\hbar\frac{\partial}{c\partial t} - \frac{q}{\kappa_b}A_0)\psi = e^{-imc^2t/\hbar}(i\hbar\partial_0 + mc - \frac{q}{\kappa_b}A_0)\phi$$

もう1回作用させて

$$\begin{aligned} (i\hbar\partial_0 - \frac{q}{\kappa_b}A_0)^2\psi &= (i\hbar\partial_0 - \frac{q}{\kappa_b}A_0)e^{-imc^2t/\hbar}(i\hbar\partial_0\phi + mc\phi - \frac{q}{\kappa_b}A_0\phi) \\ &= e^{-imc^2t/\hbar}(i\hbar\partial_0 + mc - \frac{q}{\kappa_b}A_0)(i\hbar\partial_0\phi + mc\phi - \frac{q}{\kappa_b}A_0\phi) \\ &= e^{-imc^2t/\hbar}(-\hbar^2\partial_0^2\phi + i\hbar mc\partial_0\phi - i\hbar\frac{q}{\kappa_b}\partial_0(A_0\phi) \\ &\quad + i\hbar mc\partial_0\phi + m^2c^2\phi - \frac{q}{\kappa_b}mcA_0\phi \\ &\quad - i\hbar\frac{q}{\kappa_b}A_0\partial_0\phi - \frac{q}{\kappa_b}A_0mc\phi + \frac{q^2}{\kappa_b^2}A_0^2\phi) \\ &\simeq e^{-imc^2t/\hbar}(2i\hbar mc\partial_0 - 2\frac{q}{\kappa_b}mcA_0 + m^2c^2)\phi \end{aligned}$$

qA_0 も mc^2 に比べて小さいとしています。これを (1) に入れて

$$\begin{aligned}
0 &= \left(i\hbar\partial_0 - \frac{q}{\kappa_b}A_0 \right)^2 - \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A} \right)^2 - m^2c^2 \psi \\
&\simeq e^{-imc^2t/\hbar} \left(2i\hbar mc\partial_0 - 2\frac{q}{\kappa_b}mcA_0 + m^2c^2 \right) \phi \\
&\quad - e^{-imc^2t/\hbar} \left(\left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A} \right)^2 - m^2c^2 \right) \phi \\
&\quad - 2i\hbar mc\partial_0\phi = \left(-2\frac{q}{\kappa_b}mcA_0 - \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A} \right)^2 \right) \phi \\
-i\hbar\frac{\partial\phi}{c\partial t} &= \left(-\frac{1}{2mc} \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A} \right)^2 - \frac{q}{\kappa_b}A_0 \right) \phi \\
i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} &= \left(\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{\kappa_b}\mathbf{A} \right)^2 + q\frac{c}{\kappa_b}A_0 \right) \phi
\end{aligned}$$

これはスピンの寄与を持たない電磁場中の自由粒子のシュレーディンガー方程式です。このことから、クライン・ゴールドン方程式はスピンを含んでいないと分かり、クライン・ゴールドン方程式はスピン 0 の粒子を記述します。これはクライン・ゴールドン方程式の重要な性質です。