week6: Das ideale Bose-Gas und Bose-Einstein-Kondensation

Letzte Woche hatten wir den Hamilton-Operator mit $V(x_i - x_j) = 0$ für die idealen Gase betrachtet und hatten die N-Teilchen Eigenfunktionen und Eigenwerte hingeschrieben. Für das ideale Bose-Gas mit

$$H_N \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^N \Delta_{x_i}^\Gamma \;:\; L_s^2(\Gamma_x^N) \;\to\; L_s^2(\Gamma_x^N) \tag{1}$$

waren das die

$$e_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_N} \;=\; \bigotimes_{s\, k\in\Gamma_k} e_k^{\otimes_s n_k} \;=:\; |\,\{n_k\}\,\rangle_s \tag{2}$$

mit den Besetzungszahlen

$$\begin{aligned} n_k \;&:=\; \text{Anzahl von } e_{k_j} \text{ in } e_{k_1}\otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_N} \text{ mit } k_j = k \\ &=\; \text{Anzahl von } k_j \text{ in } \{k_1, \cdots, k_N\} \text{ mit } k_j = k \end{aligned} \tag{3}$$

und den Energie-Eigenwerten

$$E_{k_1,\ldots,k_N} \;=\; \sum_{j=1}^N \varepsilon_{k_j} \;=\; \sum_{k\in\Gamma_k} n_k\, \varepsilon_k \tag{4}$$

mit den Einteilchen-Energien

$$\varepsilon_k \;=\; \tfrac{\hbar^2}{2m}\,\mu_k \;=\; \tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^d \left(\tfrac{\sin(k_i\Delta x)}{\Delta x}\right)^2 \;\overset{\Delta x\to 0}{\to}\; \tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^d k_i^2 \;=\; \tfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{5}$$

Dichte-Matrix

Wir wollen jetzt die Ein-Teilchen Dichte-Matrix berechnen. Für eine beliebige Temperatur $T > 0$ ist die definiert durch

$$\langle\rho\rangle_\beta(x,y) \;:=\; \frac{\sum_{n=0}^\infty \rho_n(x,y)\, e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-\beta E_n}} \tag{6}$$

mit

$$\beta \;:=\; \tfrac{1}{k_B T}\,, \qquad k_B \;\approx\; 8.62\cdot 10^{-5}\,\tfrac{\text{eV}}{\text{K}} \tag{7}$$

und den ρ_n's gegeben durch

$$\rho_n(x,y) \;:=\; \textstyle\sum_{x_2,\cdots,x_N\in\Gamma_x} \bar\psi_n(x,x_2,\cdots,x_N)\,\psi_n(y,x_2,\cdots,x_N) \tag{8}$$

Die ψ_n sind die Eigenfunktionen von H_N mit Eigenwert E_n. In dieser Notation tut das kleine n dann die Eigenwerte durchnummerieren wenn man die etwa der Grösse nach ordnet, das ist also nicht die Teilchenzahl, für die Teilchenzahl benutzen wir jetzt ein grosses N. Aus den Formeln (2)-(4) ist ersichtlich, dass man die Eigenwerte und Eigenfunktionen nicht durch ein einzelnes n indizieren sollte, sondern durch eine Auswahl von Besetzungszahlen

$$\{n_k\} \;\in\; \Big\{\, \{\, n_k \,\}_{k\in\Gamma_k} \;\in \mathbb{N}_0{}^{|\Gamma_k|} \;\Big|\; \textstyle\sum_k n_k \;=\; N \,\Big\} \;=:\; I_N \tag{9}$$

etwa mit I für Indexmenge, also dann

$$\begin{aligned} \psi_n \;\rightsquigarrow\; \psi_{\{n_k\}} \;&:=\; \sqrt{c_{\{n_k\}}}\; e_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_N} \\ &=\; \left[\tfrac{N!}{\Pi_k\, n_k!}\right]^{1/2} \;|\, \{n_k\}\,\rangle_s \end{aligned} \tag{10}$$

Und auf dem letzten Übungsblatt 5 hatten wir dann in der zweiten Aufgabe den folgenden Ausdruck für die $\rho_n = \rho_{\{n_k\}}$ hergeleitet:

$$\begin{aligned} \rho_{\{n_k\}}(x,y) \;&:=\; \textstyle\sum_{x_2,\cdots,x_N\in\Gamma_x} \bar{\psi}_{\{n_k\}}(x,x_2,\cdots,x_N)\,\psi_{\{n_k\}}(y,x_2,\cdots,x_N) \\ &=\; \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \bar{e}_{k_i}(x)\,e_{k_i}(y) \\ &=\; \sum_{k\in\Gamma_k} \frac{n_k}{N}\,\bar{e}_k(x)\,e_k(y) \\ &=\; (\Delta x)^d \sum_{k\in\Gamma_k} \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\; \frac{n_k}{N}\; e^{-\,i\,k(x-y)} \end{aligned} \tag{11}$$

Mit (11) bekommen wir dann

$$\begin{aligned} \langle\rho\rangle_\beta(x,y) \;&=\; \frac{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; \rho_{\{n_k\}}(x,y)\; e^{-\,\beta\,E_{\{n_k\}}}}{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; e^{-\,\beta\,E_{\{n_k\}}}} \\ &=\; \frac{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; \sum_{k\in\Gamma_k}\; \frac{n_k}{N}\,\bar{e}_k(x)\,e_k(y)\;\; e^{-\,\beta\,\sum_k n_k\,\varepsilon_k}}{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; e^{-\,\beta\,\sum_k n_k\,\varepsilon_k}} \\ &=\; \sum_{k\in\Gamma_k} \frac{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; \frac{n_k}{N}\; e^{-\,\beta\,\sum_k n_k\,\varepsilon_k}}{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; e^{-\,\beta\,\sum_k n_k\,\varepsilon_k}}\;\; \bar{e}_k(x)\,e_k(y) \\ &=:\; \sum_{k\in\Gamma_k} \frac{\langle n_k\rangle_{\beta,N}}{N}\;\bar{e}_k(x)\,e_k(y) \end{aligned} \tag{12}$$

mit der Impulsraumdichte

$$\langle n_k\rangle_{\beta,N} \;:=\; \frac{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; n_k\; e^{-\,\beta\,\sum_k n_k\,\varepsilon_k}}{\sum_{\{n_k\}\in I_N}\; e^{-\,\beta\,\sum_k n_k\,\varepsilon_k}} \tag{13}$$

Zur weiteren Berechnung von $\langle n_k\rangle_{\beta,N}$ betrachten wir jetzt die Grössen

$$Z_k(z) \;:=\; 0 \;+\; \sum_{N=1}^{\infty} z^N \sum_{\{n_k\}\in I_N} n_k\, e^{-\beta\sum_k n_k\varepsilon_k} \tag{14}$$

$$Z(z) \;:=\; 1 \;+\; \sum_{N=1}^{\infty} z^N \sum_{\{n_k\}\in I_N} e^{-\beta\sum_k n_k\varepsilon_k} \tag{15}$$

Wir können schreiben

$$\begin{aligned}
Z_k(z) \;&=\; \sum_{N=1}^{\infty}\sum_{\{n_k\}\in I_N} n_k\, z^N\, e^{-\beta\sum_k n_k\varepsilon_k} \\
&=\; \sum_{N=1}^{\infty}\sum_{\{n_k\}\in I_N} n_k\, z^{\sum_k n_k}\, e^{-\beta\sum_k n_k\varepsilon_k} \\
&=\; \sum_{n_{k_1}=0}^{\infty}\cdots\sum_{n_k=1}^{\infty}\cdots\sum_{n_{k_{|\Gamma|}}=0}^{\infty} n_k \prod_{q\in\Gamma_k}\left(z\,e^{-\beta\varepsilon_q}\right)^{n_q} \\
&=\; \sum_{n_k=1}^{\infty} n_k\left(z\,e^{-\beta\varepsilon_k}\right)^{n_k} \;\times\; \prod_{q\neq k}\sum_{n_q=0}^{\infty}\left(z\,e^{-\beta\varepsilon_q}\right)^{n_q} \\
&=\; \frac{z\,e^{-\beta\varepsilon_k}}{(1\,-\,z\,e^{-\beta\varepsilon_k})^2} \;\times\; \prod_{q\neq k}\frac{1}{1\,-\,z\,e^{-\beta\varepsilon_q}}
\end{aligned} \tag{16}$$

und analog

$$Z(z) \;=\; \prod_q \frac{1}{1\,-\,z\,e^{-\beta\varepsilon_q}} \;=\; \frac{1}{1\,-\,z\,e^{-\beta\varepsilon_k}} \;\times\; \prod_{q\neq k}\frac{1}{1\,-\,z\,e^{-\beta\varepsilon_q}} \tag{17}$$

Für den Quotienten erhalten wir

$$\frac{Z_k(z)}{Z(z)} \;=\; \frac{z\,e^{-\beta\varepsilon_k}}{1\,-\,z\,e^{-\beta\varepsilon_k}} \;=\; \frac{z}{e^{+\beta\varepsilon_k}\,-\,z} \;=:\; \langle n_k\rangle_\beta(z) \tag{18}$$

das ist also ein sehr kompakter, schöner handlicher Ausdruck im Vergleich zu (13), was sich nicht so ohne weiteres weiter vereinfachen lässt. Der Ausdruck (18) hängt nicht mehr von der Teilchenzahl N ab, dafür gibt es einen neuen Parameter z. Die Idee zur Berechnung von $\langle n_k\rangle_{\beta,N}$ in (13) ist nun die folgende:

$$\langle n_k\rangle_{\beta,N} \;\approx\; \langle n_k\rangle_\beta(z) \tag{19}$$

wobei das $z = z(N)$ so zu wählen ist, dass

$$\langle N\rangle_\beta(z) \;:=\; \frac{1}{Z(z)}\sum_{N=0}^{\infty} N\, z^N \sum_{\{n_k\}\in I_N} e^{-\beta\sum_k n_k\varepsilon_k} \;\stackrel{!}{=}\; N \tag{20}$$

In der Darstellung (13) haben wir Erwartungswerte von Besetzungszahlen im Impulsraum im sogenannten kanonischen Ensemble, da hat man immer eine feste Teilchenzahl N, was rechentechnisch gesehen eher unpraktisch ist, da sich der Ausdruck (13) dann nicht weiter vereinfachen lässt. Die Berechnungsmethode (19) mit (20) liefert dann die Erwartungswerte der Besetzungszahlen im Impulsraum im sogenannten grosskanonischen Ensemble. In den

Standard-Lehrbüchern über Statistische Mechanik kann man dann mehr oder weniger rigorose Plausibilisierungen finden, dass beide Rechenmethoden im thermodynamischen Limes, das bedeutet Teichenzahl $N \to \infty$ und Volumen $V = (2L)^d \to \infty$ bei konstanter Dichte N/V, dieselben Ergebnisse liefern sollten, zumindest in physikalisch relevanten Situationen. Wir werden im folgenden im grosskanonischen Ensemble weiterrechnen, genau so wie man das in den Standard-Lehrbüchern finden kann.

Schauen wir uns zunächst die letzte Gleichung (20) an: Wir können schreiben

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle_\beta(z) &= \frac{1}{Z(z)}\, z\frac{d}{dz} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_k\} \in I_N} e^{-\beta \sum_k n_k \varepsilon_k} \\
&= \frac{1}{Z(z)}\, z\frac{d}{dz}\, Z(z) \;=\; z\frac{d}{dz} \log Z(z) \\
&\overset{(17)}{=} z\frac{d}{dz} \sum_q \log \frac{1}{1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}} \;=\; -\, z\frac{d}{dz} \sum_q \log[1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}] \\
&= -\, z \sum_q \frac{-\, e^{-\beta \varepsilon_q}}{1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}} \;=\; \sum_q \frac{z\, e^{-\beta \varepsilon_q}}{1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}}
\end{aligned} \tag{21}$$

Der Impuls $q = 0 = (0, ..., 0) \in \mathbb{R}^d$ mit $\varepsilon_q = 0$ ist besonders und wir machen ihn in der letzten Gleichung explizit,

$$\langle N \rangle_\beta(z) = \sum_{q \neq 0} \frac{z\, e^{-\beta \varepsilon_q}}{1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}} + \frac{z}{1 - z} \tag{22}$$

Offensichtlich ist

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle_\beta(z = 0) &= 0 \\
\langle N \rangle_\beta(z = 1) &= +\infty
\end{aligned}$$

und für die Ableitung bekommen wir

$$\begin{aligned}
\tfrac{d}{dz} \langle N \rangle_\beta(z) &= \sum_q \frac{e^{-\beta \varepsilon_q}[1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}] - z e^{-\beta \varepsilon_q}(-e^{-\beta \varepsilon_q})}{[1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}]^2} \\
&= \sum_q \frac{e^{-\beta \varepsilon_q}}{[1 - z\, e^{-\beta \varepsilon_q}]^2} > 0
\end{aligned} \tag{23}$$

Es gibt also ein eindeutiges

$$z = z_N \in (0, 1) \tag{24}$$

mit

$$\langle N \rangle_\beta(z_N) = N \tag{25}$$

Um weiter rechnen zu können, betrachten wir den Limes Gitterabstand $\Delta x = 1/M \to 0$ und Volumen $L \to \infty$. In dem Fall wird k eine kontinuierliche Variable,

$$k \overset{L \to \infty}{\in} [-\pi M, +\pi M] \overset{\Delta x \to 0}{=} (-\infty, +\infty) \tag{26}$$

und das Volumenelement d^dk für die Integration ist

$$d^dk \;=\; (\Delta k)^d \;=\; \left(\tfrac{2\pi}{2L+\Delta x}\right)^d \;\overset{\Delta x\to 0}{=}\; \left(\tfrac{2\pi}{2L}\right)^d \tag{27}$$

Wir bekommen

$$\begin{aligned}\langle N\rangle_\beta(z) \;&=\; \frac{1}{(\Delta k)^d}\sum_{k\neq 0}(\Delta k)^d\,\frac{z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}}{1\,-\,z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}} \;+\; \frac{z}{1-z}\\ &\approx\; (2L)^d\int_{\mathbb{R}^d}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\frac{z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}}{1\,-\,z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}} \;+\; \frac{z}{1-z}\end{aligned} \tag{28}$$

Es sei jetzt

$$v \;:=\; \frac{V}{N} \;=\; \frac{(2L)^d}{N} \tag{29}$$

das zur Verfügung stehende Volumen pro Teilchen, das ist gerade 1/Dichte. Im thermodynamischen Limes $N, V \to \infty$ bleibt das kleine v also fest. Wir haben dann

$$\langle N\rangle_\beta(z) \;=\; v\,N\int_{\mathbb{R}^d}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\frac{z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}}{1\,-\,z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}} \;+\; \frac{z}{1-z} \tag{30}$$

mit

$$\varepsilon_k \;=\; \tfrac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{31}$$

Betrachten wir das Integral. Wegen $z<1$ ist $ze^{-\beta\,\varepsilon_k}<1$ und wir können schreiben

$$\begin{aligned}I_d(z) \;&:=\; \int_{\mathbb{R}^d}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\frac{z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}}{1\,-\,z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}}\\ &=\; \int_{\mathbb{R}^d}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\,\sum_{n=0}^{\infty}(z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k})^{n+1}\\ &=\; \sum_{j=1}^{\infty} z^j\int_{\mathbb{R}^d}\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\;e^{-\beta\,j\,\varepsilon_k}\end{aligned} \tag{32}$$

Betrachten wir weiter $d=3$ Raumdimensionen. Wir benutzen das Integral (Ü-Blatt 6)

$$\int_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\;e^{-\beta\,\frac{\hbar^2k^2}{2m}} \;=\; \frac{1}{\lambda^3} \tag{33}$$

mit der sogenannten thermischen Wellenlänge

$$\lambda \;:=\; \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \tag{34}$$

Das ist die de Broglie Wellenlänge eines Teilchens mit kinetischer Energie $(\hbar k)^2/(2m) = \pi\,k_BT$. Wir bekommen dann

$$\int_{\mathbb{R}^3}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\;e^{-\beta\,j\,\frac{\hbar^2k^2}{2m}} \;=\; \frac{1}{\lambda^3}\,\frac{1}{j^{3/2}} \tag{35}$$

und damit

$$I_3(z) \;=\; \frac{1}{\lambda^3} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^{3/2}} \;=:\; \frac{1}{\lambda^3}\, g_{\frac{3}{2}}(z) \tag{36}$$

mit der verallgemeinerten Riemannschen Zeta-Funktion

$$g_s(z) \;:=\; \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^s} \tag{37}$$

Also bekommen wir die folgende Gleichung für das z:

$$\langle N\rangle_\beta(z) \;=\; v\,N\,\frac{1}{\lambda^3}\, g_{\frac{3}{2}}(z) \;+\; \frac{z}{1-z} \;\stackrel{!}{=}\; N \tag{38}$$

oder

$$\frac{v}{\lambda^3}\, g_{\frac{3}{2}}(z) \;+\; \frac{1}{N}\,\frac{z}{1-z} \;=\; 1 \tag{39}$$

Das $g_{\frac{3}{2}}(z)$ ist eine streng monoton wachsende Funktion auf $[0,1]$ mit $g_{\frac{3}{2}}(0) = 0$ und

$$g_{\frac{3}{2}}(1) \;=\; \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^{3/2}} \;=:\; \zeta(3/2) \;\approx\; 2.6124 \tag{40}$$

Das v ist unabhängig von T und der Faktor $1/\lambda^3$ ist proportional zu $T^{3/2}$, also

$$\frac{v}{\lambda^3} \;\to\; \begin{cases} +\infty & \text{für } T \to +\infty \\ 0 & \text{für } T \to 0 \end{cases} \tag{41}$$

Für grosse T hat die Gleichung

$$\frac{v}{\lambda^3}\, g_{\frac{3}{2}}(z) \;=\; 1 \tag{42}$$

also immer eine Lösung $z \in (0,1)$, die dann, mit einer leichten Korrektur von $O(1/N) \sim 10^{-23}$, ebenfalls die Gleichung (39) erfüllen tut. Wenn die Temperatur T jedoch so niedrig ist, dass

$$\frac{v}{\lambda^3}\, g_{\frac{3}{2}}(1) \;=\; \frac{v}{\lambda^3}\,\zeta(3/2) \;<\; 1 \quad \stackrel{\substack{\text{Definition}\\ \text{von } T_{\text{crit}}}}{\Leftrightarrow} \quad T \;<\; T_{\text{crit}} \tag{43}$$

wird mit

$$k_B\, T_{\text{crit}} \;=\; \frac{2\pi}{[\zeta(3/2)]^{\frac{2}{3}}}\, \frac{\hbar^2}{v^{\frac{2}{3}} m} \tag{44}$$

dann ist der zweite Term auf der linken Seite von (39), also das

$$\frac{1}{N}\,\frac{z}{1-z}$$

der relevante Term, der eine Lösung von (39) erlaubt: Wir machen den Ansatz

$$z \;=\; 1 - \frac{c}{N} \tag{45}$$

mit einer positiven Konstante c und bekommen

$$\frac{v}{\lambda^3}\, g_{\frac{3}{2}}\big(1 - c/N\big) \;+\; \frac{1}{N}\,\frac{1 - c/N}{c/N} \;=\; 1 \tag{46}$$

was im wesentlichen dasselbe ist wie

$$\frac{v}{\lambda^3}\, g_{\frac{3}{2}}(1) \;+\; \frac{1}{c} \;=\; \frac{v}{\lambda^3}\,\zeta(3/2) \;+\; \frac{1}{c} \;=\; 1 \tag{47}$$

oder

$$c \;=\; \frac{1}{1 \,-\, \frac{v}{\lambda^3}\,\zeta(3/2)} \;\approx\; \frac{1}{1 \,-\, 2.61\,\frac{v}{\lambda^3}} \tag{48}$$

Die Besetzungszahlen für einen Zustand mit Impuls k waren gegeben durch

$$\langle n_k\rangle_\beta(z) \;=\; \frac{z}{e^{+\beta\,\varepsilon_k} \,-\, z} \tag{49}$$

Insbesondere für $k = 0$,

$$\langle n_{k=0}\rangle_\beta(z) \;=\; \frac{z}{1 - z} \tag{50}$$

Für $T > T_{\mathrm{crit}}$ ist das $O(1)$, für $T < T_{\mathrm{crit}}$ wird dieser Zustand jedoch makroskopisch besetzt,

$$\langle n_{k=0}\rangle_\beta(z) \;\stackrel{T<T_{\mathrm{crit}}}{=}\; \frac{1 - c/N}{c/N} \;\approx\; \frac{1}{c}\,N \;=\; \Big(1 \,-\, 2.61\frac{v}{\lambda^3}\Big)\,N \tag{51}$$

Dieses Phänomen wird dann als Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet. Man kann also sagen, dass Bose-Einstein-Kondensation einsetzt, wenn

$$\frac{\lambda^3}{v} \;\gtrsim\; O(1)\;\;, \tag{52}$$

die thermische Wellenlänge, das ist im wesentlichen die de Broglie Wellenlänge, muss grösser werden als das dem Teilchen zur Verfügung stehende Volumen, das Teilchen wird dann sozusagen dazu gezwungen, mit den benachbarten Teilchen zu interferieren.

Berechnen wir noch die kritische Temperatur von flüssigem Helium-4. Bei Normaldruck verflüssigt sich Helium-4 bei Temperaturen unterhalb von 4.22 Kelvin und befindet sich dann in einem normal flüssigen Zustand, der dann auch Helium I genannt wird. Das Volumen pro Teilchen $v = V/N$ beträgt dann

$$v \;=\; 46\,\mathring{\mathrm{A}}^3 \;=\; 46 \times (10^{-10}\,\mathrm{m})^3 \tag{53}$$

Bei Temperaturen unterhalb von

$$T_{\mathrm{crit,exp}} \;=\; 2.18\,\mathrm{K} \tag{54}$$

geht der normal fluide Zustand dann in einen suprafluiden Zustand über, der dann Helium II genannt wird. Wir wollen den experimentell ermittelten Wert von 2.18 Kelvin mit dem theoretischen Wert für das ideale Bose-Gas vergleichen, der ist dann gegeben durch (44) und beträgt

$$
\begin{aligned}
T_{\text{crit,theo}} &= \frac{2\pi}{[\zeta(3/2)]^{\frac{2}{3}}} \frac{\hbar^2}{k_B\, v^{\frac{2}{3}}\, m} \\
&\approx \frac{2\pi}{[2.61]^{\frac{2}{3}}} \frac{(1.05 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js})^2}{1.38 \cdot 10^{-23}\,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}} \times 46^{\frac{2}{3}} \cdot 10^{-20}\,\mathrm{m}^2 \times \frac{4\,\mathrm{g}}{6.023 \cdot 10^{23}}} \\
&\approx \frac{2\pi}{[2.61]^{\frac{2}{3}}} \frac{(1.05)^2 \cdot 6.023}{1.38 \cdot 4 \cdot 46^{\frac{2}{3}}} \frac{10^{-68}\,\mathrm{J}^2\mathrm{s}^2}{10^{-23}\,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}} \cdot 10^{-20}\,\mathrm{m}^2 \cdot 10^{-23}\,\mathrm{g}} \\
&\approx 3.11 \cdot 10^{-1} \times \frac{10^{-2}\,\mathrm{J\,s^2\,K}}{1\,\mathrm{m}^2\,\mathrm{g}} \quad = \quad 3.11\,\mathrm{K}
\end{aligned} \tag{55}
$$

Rechnet man mit mehr Dezimalstellen nach dem Komma, bekommt man einen theoretischen Wert von 3.14 Kelvin, diese Zahl findet man dann in den Büchern.